

大規模分子シミュレーションによる 固体高分子形燃料電池(PEFC)内物質輸送現象の解明

1. はじめに

近年、化石燃料に変わるエネルギー供給源として固体高分子形燃料電池(PEFC)が注目されており、家庭用分散電源や燃料電池自動車などすでに商用化されている。このPEFCのより一層の高効率化のためには燃料電池の反応物質である水素や酸素を速やかに電極に送り、または生成された水を外部に排出する機構を設計することが求められている。そのため、電池内部の反応物質の輸送特性の詳細な把握は極めて重要である。

この輸送特性を把握する有力な手法として数値シミュレーションがあるが、流れを連続体として扱うCFDをベースとしたシミュレーションではその輸送特性を把握することができない。その理由として、燃料電池を構成する拡散層(GDL)、撥水層(MPL)、触媒層(CL)および高分子電解質膜(PEM)内にはナノスケールからマイクロスケールまでのさまざまな構造が存在し、反応物質はその構造内を流れるため、その輸送挙動にナノスケール特有の現象が発現し、連続体理論の範疇ではその特性を捉えきれなくなるからである(図1)。

筆者はこのナノスケールの輸送現象に対し、分子動力学法(MD)を用いた大規模シミュレーションによる解明を行っている⁽¹⁾。本稿では、それらの研究内容について紹介したい。

2. MDによる反応物質輸送現象の大規模分子シミュレーション

燃料電池では、アノード側[図1(b)左側]で供給された水素が触媒によりプロトンと電子に分解され、プロトンは高分子電解質膜とアイオノマー(触媒層内で白金粒子および担持カーボンを覆う超薄膜)を通してカソード側[図1(b)右側]CLに到達するが、この輸送速度を促進するには高分子膜およびアイオノマー内部に適切な水クラスターを形成する必要がある。図1(c)と図1(d)の図はその様子を表したもので、この解析により、膜の水クラ

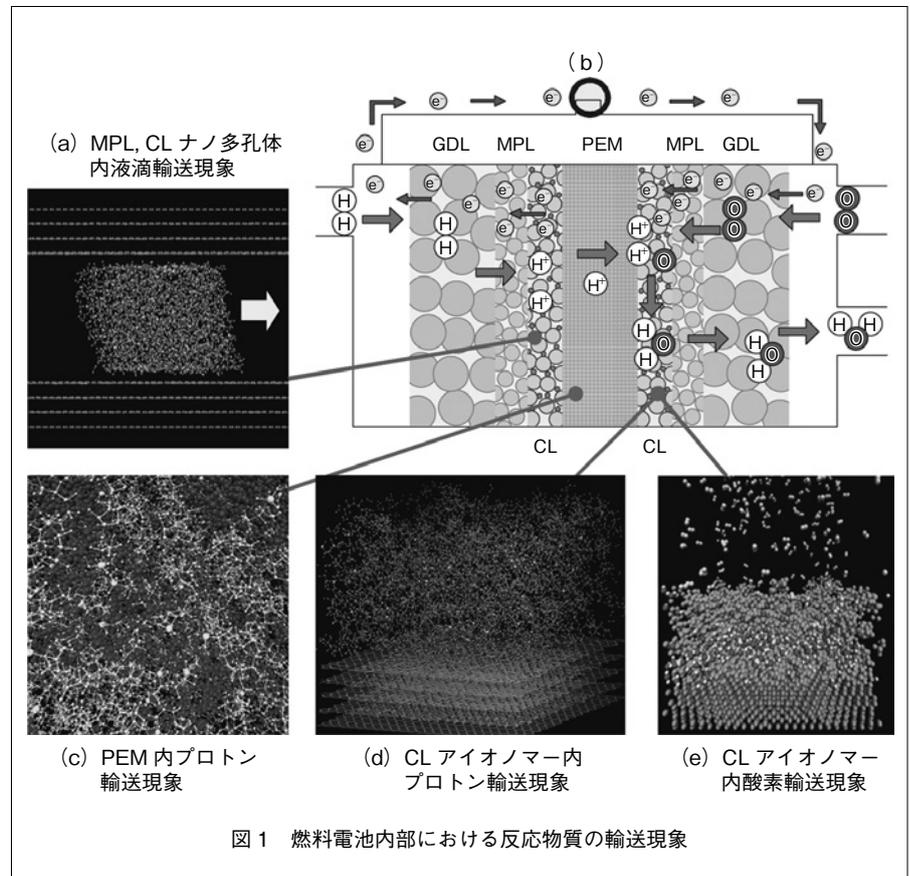


図1 燃料電池内部における反応物質の輸送現象

スターの構造特性とプロトンの輸送特性との相関が明らかとなった。

アイオノマーはプロトンの通り道になるだけでなく、酸素を適切に透過し白金表面に到達させなければならない。図1(e)はアイオノマーの酸素透過特性のシミュレーションの模式図を表したものである。この解析により、白金表面に存在するアイオノマーの構造の把握やバルク高分子膜との性質の差異が明らかとなった。

燃料電池内部にはさまざまな大きさの多孔体があり、その中を通過して水滴が排出される。この多孔体のサイズが小さくなると、その挙動が流れを連続体として扱うマクロな流体力学の法則に従わなくなる。この限界を把握するため、図1(a)に示すようにナノ多孔体内部を移動する液滴の挙動をシミュレーションし、マクロな流体力学の理論との比較を行った。この解析により、多孔体のサイズが数nm程度に

なると、表面張力の影響や排除体積の影響が無視できなくなり、その挙動がマクロな流体力学の法則に従わなくなることが明らかとなった。

3. おわりに -今後の展望

本稿では燃料電池内部の反応・生成物質の輸送現象を分子動力学法により解析した事例について紹介した。今後はこれらの知見を活用して高輸送性能を有する新規材料設計を行い、より高効率な燃料電池の開発に貢献していきたいと考えている。

(原稿受付 2014年10月6日)

[徳増 崇 東北大学]

●文献

- (1) Tokumasu, T., Fukushima, A., Mabuchi, T. and Sugaya, Y., Large-scale Molecular Dynamics Simulations for Analyses of Transport Phenomena in Polymer Electrolyte Fuel Cell, *J. of Comp. Chem. Japan*, 12-1 (2013), 8-15.