

燃料電池のモデリングに役立つマルチスケール構造解析

株式会社 豊田中央研究所
原田 雅史

カーボンニュートラル実現のため、水素をエネルギー源とする固体高分子形燃料電池（以下、燃料電池）が注目されている。さらなる高性能化と低コスト化が課題で、材料と工程の革新が望まれる一方、研究開発効率の向上が求められている。例えば高分子電解質膜の性能にブレークスルーがあったとき、その他すべての要素を最適化するため試行錯誤することになるが、性能を予測するモデルを使って各種パラメータの影響をシミュレーションすることによって、試作にかかる費用を削減できると考えられる。実際、エンジンの開発ではモデルベースデザインが成果をあげているので、燃料電池においても同様の設計技術が期待されている。

燃料電池の発電性能は、水素と酸素の物質移動・電極反応モデルに基づいて理論的に予測できる。ただし、燃料電池の中では、生成水が温度・湿度に応じて様々な相として移動し、その存在形態と分布の仕方が性能に影響を及ぼしている。水が適度に排出され、水素・酸素が速やかに供給されるほど発電性能は向上するが、これらの物質移動には燃料電池を構成する材料の物性と構造が影響を与えている。よって、得られる材料の物性に応じて最適な構造を設計するためには、燃料電池の構造と水の分布の関係を定量的に評価する技術が不可欠である。

本講演では、燃料電池の水に着目し、プロトンに対する感度が高い中性子を利用して構造解析した結果を紹介する。大型実験施設(J-PARC)にて、燃料電池触媒層に存在するアイオノマ(高分子電解質)とカーボンの界面における水の nm スケールでの偏析を中性子反射率で解析した[1]。また、触媒層中のカーボン粒子多孔体におけるアイオノマの nm スケールでの構造について小角中性子散乱法で定量化した[2]。そして、パルス中性子イメージングにより、燃料電池の金属製流路の中の水と氷を cm スケールで非破壊識別した[3]。対象とした界面・多孔体・流路は燃料電池において nm の分子スケールから cm の機械スケールで存在し、互いに連携して機能発現している。マルチスケールで様々な種類の測定が可能な中性子を用いることにより、一気通貫で解析できた。

中性子反射率法や小角中性子散乱法で得られた構造は、分子動力学などによる計算で検証できるが、十分なサイズの計算には多大なコストがかかる。また、水の流れは格子ボルツマン法などによる流体力学の計算で表現されるが、パルス中性子イメージングで識別した水と氷のように相変化を伴う場合は計算が難しい。基礎物理の分野では当たり前となっている実験と計算の連携に対し、対象の性能向上が目標となる産業応用では、実用材料を試作評価する人材との連携が求められる。

[1] K. Ito, *et al.*, *Langmuir* **36**, 12830 (2020).

[2] M. Harada, *et al.*, *ACS Omega* **6**, 15257 (2021).

[3] Y. Higuchi, *et al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23**, 1062 (2021).