

	PEFC	PAFC	MCFC	
電解質	高分子	リン酸	溶融炭酸塩	
作動温度()	100以下	200	600 ~ 700	
燃料	H ₂	H ₂	H ₂ , CO	
発電効率(%)	30 ~ 40	35 ~ 45	45 ~ 55	
発電規模	小	中	大	

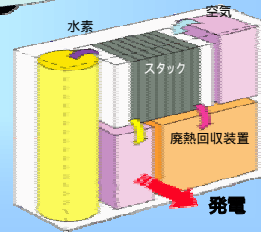
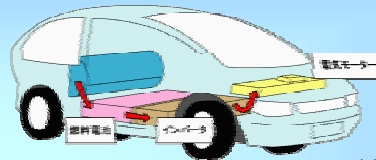
小・中規模発電のニーズ増大

業務用分散電源

車両用補助電源

家庭用小型電源

etc...



Advantage

- システムが簡単
- 熱・化学的安定性
- 燃料選択性が高い

作動温度の低温化によりSOFCの特性を活かす

低作動温度下の実現には...

発電反応場である燃料極性能の
向上が必須

研究目的

シミュレーションによる
水素反応挙動の解析



解析に基づいた最適設計

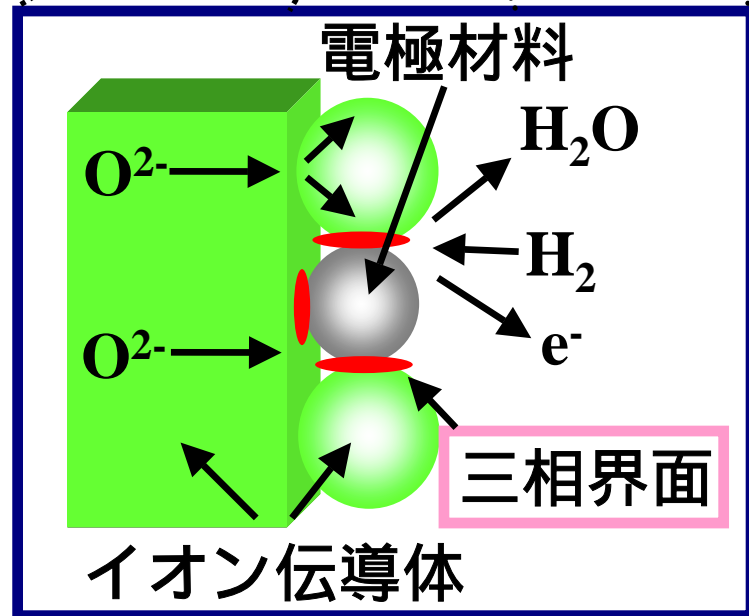
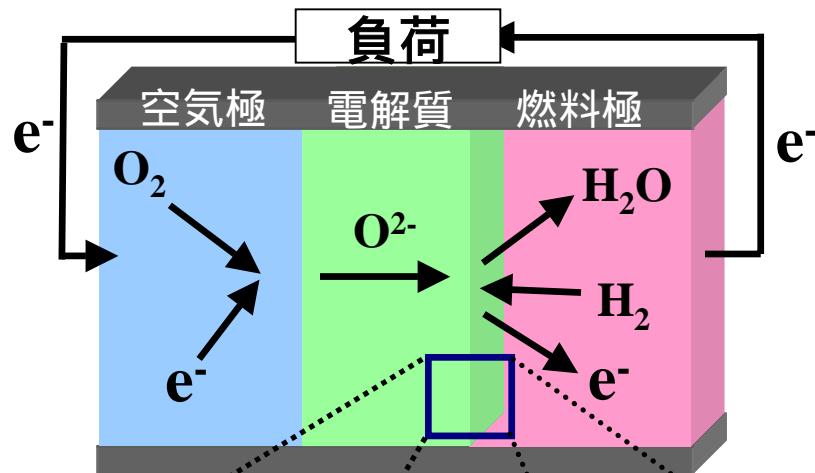
モデル構築

分子動力学法

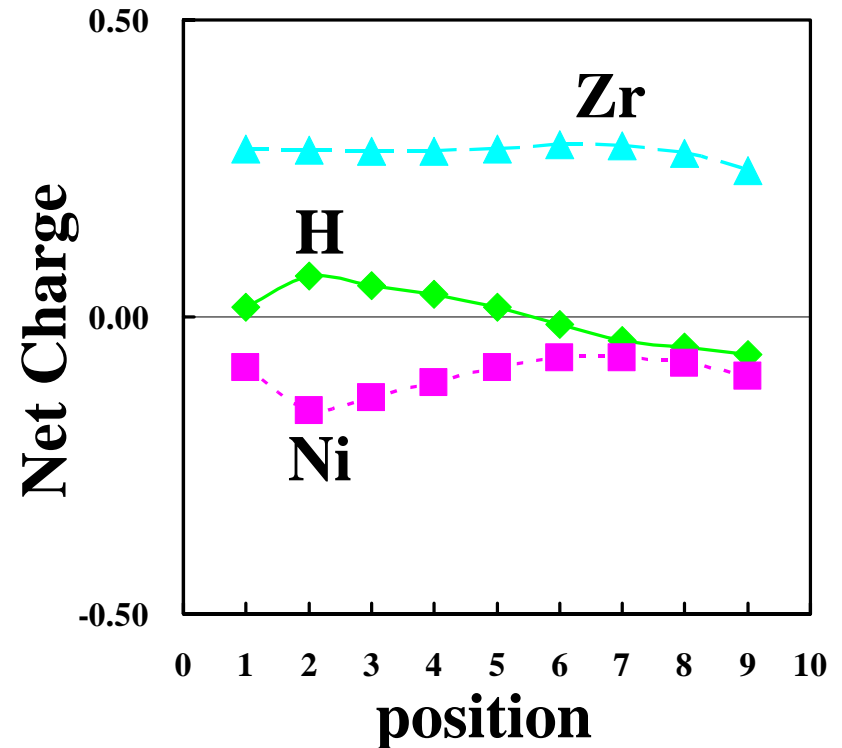
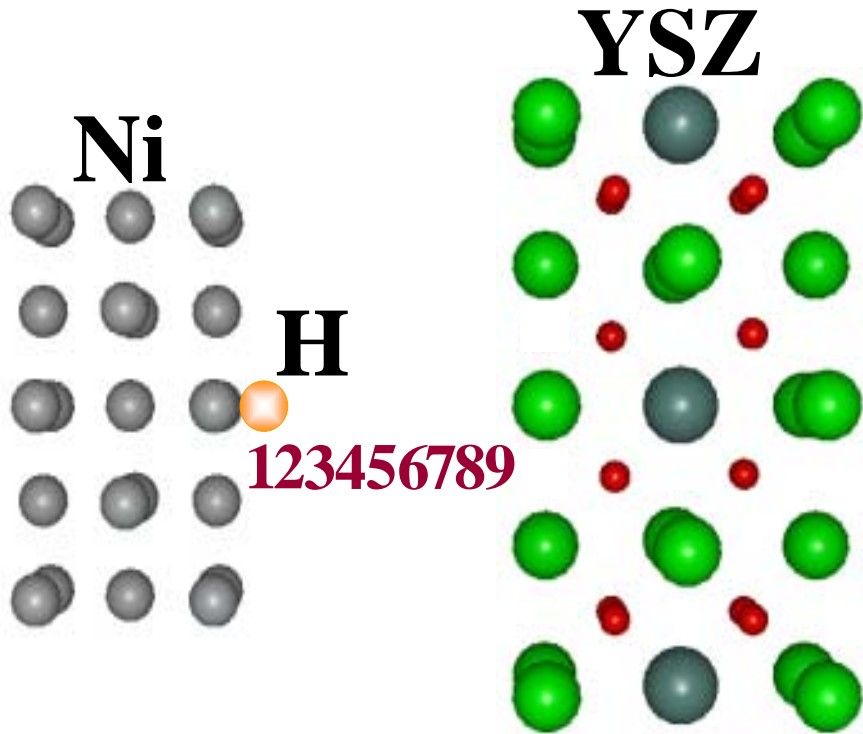


反応性評価

電子計算法



Ni-YSZ 界面の電子状態



Ni-YSZ界面中における各元素の
電荷移動量の水素原子位置依存性

状態1-6：電子の授受がNi-H間で行われている．状態2でHの価数最大
状態7-9：Zr-H間に電子の授受が見られる．

相互作用はNi-H間においてより強力であり，反応活性サイトは状態2近傍．