

論文の内容の要旨

Research on cost-performance improvement of Solid Oxide Fuel Cells:

- Analyses of system properties and electrode reactions, and
development of a markup language for a collaborative knowledge sharing platform -

(和訳: 固体酸化燃料電池低コスト化に関する研究

-燃料電池システム特性・電極反応機構解析および知識共有基盤記述言語の開発-)

氏名 古山 通久

1. 研究背景及び目的

固体酸化燃料電池 (SOFC) は高効率の発電が可能なシステムとして注目を集めている。SOFCは高温で運転されるため、排ガスを利用したガスタービンとの複合発電システム (SOFC/GT system) の構築により70%を超える発電効率が達成可能であることが複数の研究グループにより示されている。一方で実用化のために解決すべき問題も数多く存在し、多くの研究開発がなされている。それらの多くはある要素の特定の側面に対する改良・開発・解析である。しかしながらその要素のシステム全体の中での位置づけ、要求される複数の特性の包括的な把握が十分に行われているとは言えない。一方、モデルによるシステム解析も行われているが、モデル上で要素をより詳細に表現する必要がある場合も散見される。

本研究は、SOFC低コスト化を目標として行われた。低コスト化のための研究開発を効率的に行うためには全体としての特性把握、要素の特性把握、それらの把握を促進するプラットフォームが重要である。本研究ではSOFCを対象として以下のような複数の視点からの研究を行った。

SOFC/GTシステムの大規模電源としての導入可能性 (第三章)

SOFC/GTシステム特性の把握 (第四章)

SOFC電極反応機構解析 (第六章-第八章)

知識共有基盤用マークアップ言語の開発 (第九章)

2. 大規模電源としての導入可能性評価

SOFC/GTシステムの大規模電源としての導入可能性について電源構成モデルを用いて評価を行った。電源構成モデルは線形計画法により目的関数を最小とするよう各電源に発電量を割り振る。評価にはSOFC/GTシステム特性に関するデータは、田中らにより構築されたSOFC/GTシステムモデルにおける仮定及び得られた特性を用いた。

導入可能性の検討結果から、現在開発されている技術レベルでは初期投資コストが高いため大規模電源としては経済的には導入されることが分かった。初期投資コスト低下の影響を調べるため、他のパラメータは一定に保ち、初期投資コストのみを変化させた時の導入割合を図1に示す。得られたコスト低下の定量的目標をもとに、より詳細な検討を行った。

3. SOFC/GTシステムモデルに基づく低コスト化指針の検討

SOFC/GTシステムのコストのうち4割をSOFCが占めるため、SOFCのコスト削減が重要である。SOFCのコスト削減のためには、出力密度の増加、長寿命化などが考えられる。

図2に各運転温度における発電コストを示す。800℃から700℃への低温作動化にともない、発電コストが高くなる。そのコスト増加の内訳はSOFCの出力密度低下にともなうSOFCの初期投資コスト増加の影響がもっとも大きい。ここで、700℃においても800℃におけるセル性能と同様の性能が得られると仮定すると、800℃における発電コストと同程度の発電コストを達成可能であることが明らかとなった（図2、700℃高性能セル）。また、低温作動化にともなうSOFCの長寿命化が考えられる。700℃において800℃における寿命の4倍の寿命が達成されると仮定すると、800℃におけるシステムよりも低コストなシステムの構築可能性が示された（図2、700℃高性能セル+長寿命化）。

低温で高性能なセル性能を達成することにより低コスト化が可能であるとの示唆に基づき、実験に基づく高性能な電極開発に取り組んだ。

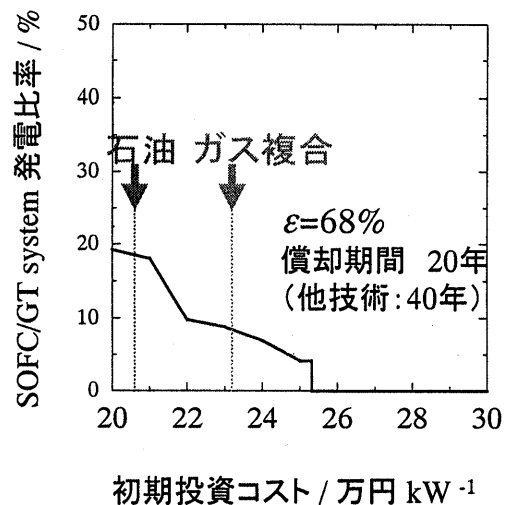


図 1 SOFC/GT システム導入率

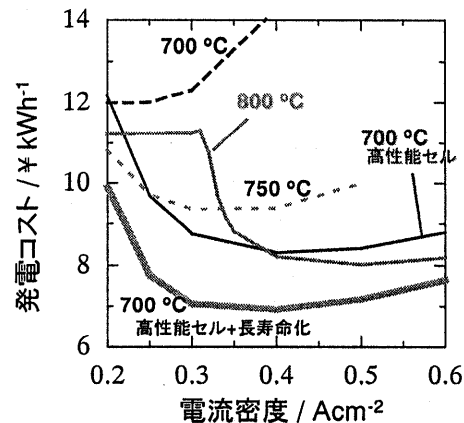


図 2 各運転温度における発電コスト

4. 空気極高性能化のための反応機構解析

電極性能高性能化の指針を得るための電極反応機構解析を行った。電極材料には $\text{Sm}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$ を用いた。図3に空気極反応イメージを示す。

最初に緻密な電極構造のセルを用いた測定結果から律速過程は酸素の吸着過程と判明し、実験結果のモデルによるフィッティングから吸脱着定数を求めた。

続いて多孔質電極を用いてその過電圧を測定したところ、膜厚に対するセル性能の飽和が見られ(図4)、多孔質電極反応が表面における吸着反応のみでは説明できないことが分かった。

多孔質電極のインピーダンス応答は等価回路を用いて三つの素過程に分離された。分離された各素過程に対応する界面導電率の酸素分圧依存は図5に示す通りとなった。

その酸素分圧依存性から、図5における σ_M に対応する過程は吸着過程に対応すると判断された。また、他の条件を一定に保ち、気相の拡散係数を増加させた測定を行ったところ、 σ_L に対応する過程の抵抗が低下した(図6)。そのため、この過程は気相拡散過程であると判断された。 σ_H は既往の研究との比較・ σ_H に対応する過程は O^{2-} の電極内拡散過程であると結論づけられる。酸素分圧が0.1atm以上の領域では O_2 の気相拡散の電極反応への影響は小さく、実用的条件では多孔質 $\text{Sm}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$ 空気極における電極反応は O_2 の吸着過程と O^{2-} の電極内拡散過程に支配されていることが分かった。

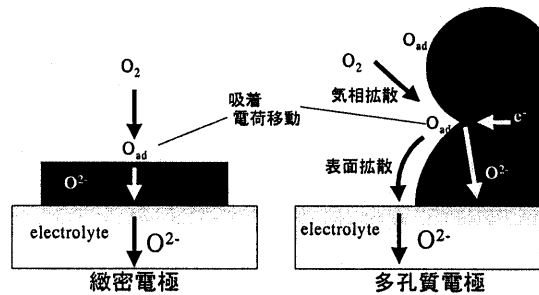


図 3 空気極反応機構模式図

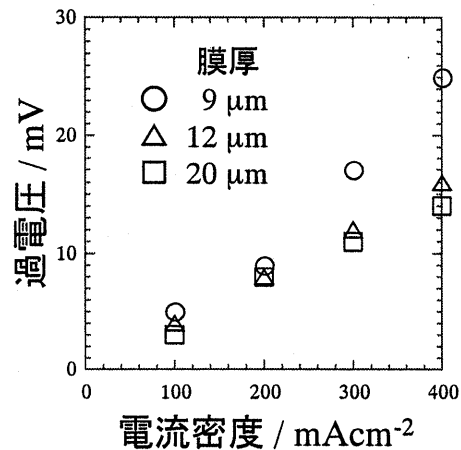


図 4 多孔質電極過電圧膜厚依存

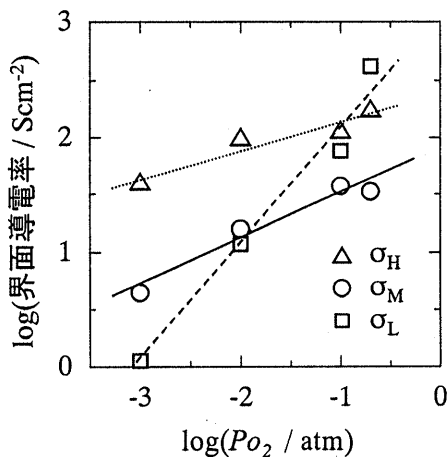


図 5 気相拡散の電極抵抗影響

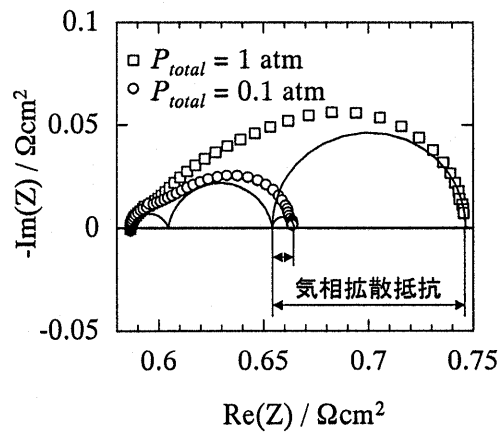


図 6 σ_B 酸素分圧依存

得られた解析結果をもとに、電極反応モデルの構築を行った。

モデル化に際しては多孔質空気極の構造・反応経路を図7のように近似した。

モデルに用いるパラメータのうち、吸着過程の抵抗は緻密電極の実験結果から算出された吸脱着定数を用いて算出した。電極微細構造は実験に用いた電極構造の電子顕微鏡による直接観察から決定した。イオン拡散抵抗及び交流特性の再現に必要な各過程の容量成分はフィッティングパラメータとして用いた。

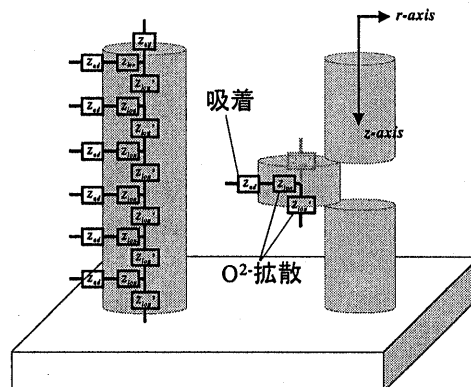


図7 多孔質電極の円筒近似

モデルは電極性能の膜厚依存をよく再現し、またこの時のイオン導電率は既往の研究の報告結果から算出した値と同程度であった。

構築されたモデルにより、空気極材料の吸脱着定数、イオン導電率の高い材料開発による電極性能向上を定量的に予測可能となった。

5. 知識共有基盤用マークアップ言語の開発

図8に、本研究で考える知識共有基盤を示す。この知識共有基盤により

- ・ひな形をもとにしたモデル設計
- ・設計したモデルによるSimulation
- ・計算結果、モデル構造等の表示
- ・容易なモデル拡張

等が可能となる。知識共有基盤構築のためには多くの課題があるが、本研究ではモデル情報の記述・保存方法に注目した。

本研究ではモデル情報をXML (eXtensible Markup Language) 文書として記述することとした。XMLはある内容に対してタグと呼ばれる記号を用いて様々な情報を付加する。記述者は自由に要素や属性、それらの関係を決定できる。記述に用いた要素・属性は文書型定義を用いて定義可能である。厳密な文書型定義により、モデル設計のひな形の提供、記述内容から Simulator を生成等が可能であるが、どのような文書型を定義するかについて十分考察が必要である。

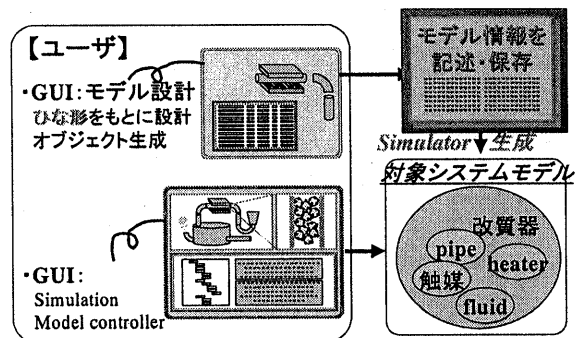


図8 知識共有基盤イメージ

本研究では、SOFC/GTシステムを構成するSOFCシステムをXMLによる記述対象として考える。記述範囲は対象の空間的情報、含まれる物質と物質の持つエネルギーに関する情報である。

最初に本研究で得られたSOFCシステム特性及び電極反応機構の理解・知識をもとにSOFCシステムをXML文書として記述し、記述に用いた要素・属性を定義した。続いて他の化学プロセスシステムにも適用可能な記述とするために、記述に用いた要素・属性を一般化・抽象化し、要素・属性を再定義した。本研究での定義した文書型定義の特徴として以下の点が挙げられる。

- ・一般的記述 (他の化学プロセスシステムへの適用可能性)

- ・領域に基づく記述(構造・物質・Energy)
- ・一次情報を記述
- ・マクロ、ミクロなモデル共に記述可能

定義された文書型は図8に示す知識共有基盤中においてモデル設計の際のひな形を与える役割を果たす。また文書型の定義によって、記述された文書はコンピュータ理解可能となる。すなわち、記述した文書からSimulationに用いるオブジェクトを生成することが可能となり、また記述内容から必要な情報を取り出し、加工・表示することが容易となる。

6. 結言

複数の視点からSOFC低コスト化に関する研究を行った。大規模電源としての評価からコストの数値目標を明らかにし、SOFC/GTシステムモデルを用いてセル高性能化によるコスト削減可能性に関する知見を得た。さらに、高性能電極開発のために電極反応機構解析を行い、解析結果に基づく電極反応モデルにより高性能電極開発の指針を得た。これらの研究過程で得た知識をもとに効率的な研究開発を促進する知識共有基盤用マークアップ言語の開発を行った。定義したマークアップ言語はモデル設計のひな形を与え、対象を表わすオブジェクトの生成・対象に関する情報の表示を容易に可能とする。