

## 審 査 の 結 果 の 要 旨

氏 名 何 岸

本論文 “Three-dimensional numerical optimization of solid oxide fuel cell cathode microstructure (固体酸化物形燃料電池空気極微細構造の三次元数値最適化)” は、次世代の高効率エネルギー変換デバイスとして期待されている固体酸化物形燃料電池(SOFC)の高性能化と信頼性向上に向け、酸化物イオン電子混合導電体 (Mixed Ionic Electronic Conductor; MIEC) 材料である  $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{Co}_{0.2}\text{Fe}_{0.8}\text{O}_{3-\delta}$  (LSCF)を用いた空気極、および LSCF と高いイオン伝導性を有する  $\text{Gd}_{0.1}\text{Ce}_{0.9}\text{O}_{2-\delta}$  (GDC) のコンポジット空気極の最適電極構造を明らかにすることを目的に行ったものである。SOFC は、高いエネルギー変換効率と多様な燃料に対応可能であることから大きな期待が寄せられているものの、一層の高効率化と高信頼性、および低コストが求められている。混合導電性 (MIEC) 材料は、固相と空隙の二相界面でも電気化学反応が生じることから、大きな反応活性面積による高性能化が期待できるため、現在の空気極の主流の材料となっている。一方、電極の微細多孔体構造も電極の性能や信頼性に大きな影響を与えることが知られているが、MIEC 材料のような高性能材料を用いた場合の電極構造については未だ不明な点が多い。空気極の一層の高効率および高信頼性を実現するためには、新材料の開発のみならず、電極構造についても、その性能向上因子を定量化し、それに基づいた設計指針を示す必要がある。そこで本論文では、混合伝導体材料である LSCF 空気極、および LSCF と高いイオン伝導体材料である GDC とのコンポジット空気極に対し、随伴解析を用いてこれらの電極微細構造を最適化するとともに、過電圧予測シミュレーションを実施することで、最適な多孔体構造および電解質－電極界面構造を明らかにした。また、今後一層高性能な材料が開発された場合を想定し、表面反応および三相界面反応活性やイオン伝導率の変化に対する最適電極構造の感度を定量化した。以下、本論文の主な内容を記載する。

第 1 章では、本研究で対象とする SOFC 空気極の重要性、またそれに対する本研究の意義と目的について述べている。ナノ粒子やナノファイバーといった粒子微細化に関する研究や、有効伝導率を増加させるための電解質－電極界面構造等に関する従来の研究事例について紹介している。第 2 章では、LSCF 空気極の微細多孔体構造に対する随伴解析を用いた最適化手法について解説するとともに、最適化後の構造について紹介している。電解質側の粒子径が計算格子幅に応じて小径化すること、LSCF 体積分率が電解質側から一定の勾配で減少すること等を明らかにした。第 3 章では、電極内によりイオン伝導率の高い

電解質材料の柱状フィンを挿入する効果について、格子ボルツマン法により明らかにしている。柱状フィンは、電極を構成する粒子径が小さいほど、相対的に反応活性が高い高性能材料ほど有効であることが明らかとなり、電解質－電極界面構造として平面以外の形状を採用することの有効性を示した。これらの結果を受け、第 4 章では電解質－電極界面形状の随伴解析による最適化を行っている。電解－電極界面が変形し、第 3 章で検討したような柱状フィン構造が最適化の結果として現れること、そしてこの柱状フィンの断面積やその断面における周長が初期構造によらず、ほぼ一定の分布を示すことを明らかにした。また、電解質のイオン伝導率が改善されるとこの柱状フィン構造は小さくなること、電極の表面反応や三相界面反応の活性が高まると柱状フィン構造は大型化することを明らかにした。以上の結果から、細かい粒子を電解質近傍に設置した上で、高いイオン伝導率の電解質材料を電極内に入り込ませ有効イオン伝導率を促進することで、空気極の高性能化を実現することができる見通しが得られた。第 5 章では、本研究で得られた結論を述べている。

このように、本論文は MIEC 材料を用いた空気極の更なる性能向上のための設計因子を系統的かつ定量的に評価したものであり、学術的な価値はもちろんのこと、実用的にも非常に有用な知見が得られている。よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。