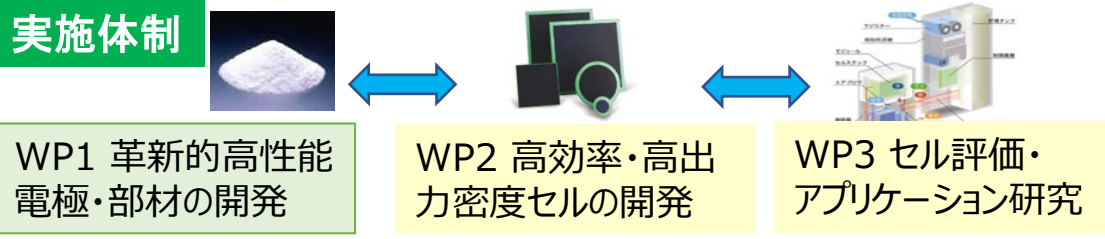


事業概要 水素社会の実現と定置用燃料電池の本格的普及拡大を目指して発電効率70%を見通す画期的な「プロトン伝導セラミック燃料電池（PCFC）」を実現するため、高性能な空気極および部材を開発する。



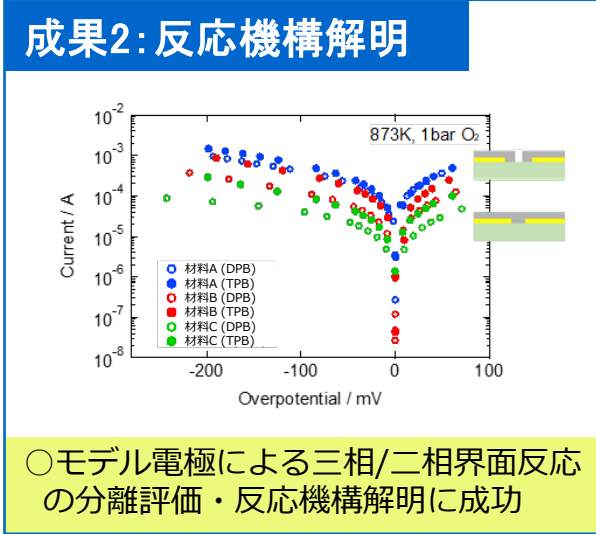
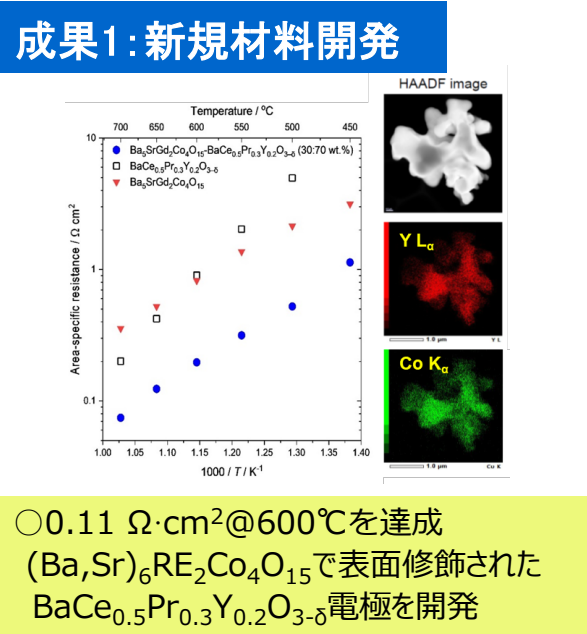
研究開発目標

高性能空気極材料・部材の開発

- ・計算/実験科学的手法併用による材料探索
- ・反応機構/基礎物性の理解に基づく電極材料/構造の最適化
- ・分極抵抗 $0.1 \Omega \cdot \text{cm}^2 @ 600^\circ\text{C}$ （中間目標）

研究開発項目と実施機関

- ・計算科学的手法による高性能空気極材料の開発・評価（JFCC）
- ・実験科学的手法による高性能空気極材料の開発・評価（京都大学）
- ・空気極材料の基礎物性評価（名古屋工業大学）
- ・電極反応機構の解明（東北大学）
- ・新規空気極材料の部材化・構造化（リタケカンパニーリミテド）



計算科学による材料探索

- 第一原理計算に依る LaMO₃ の構造再現 → プロトン溶解の検討

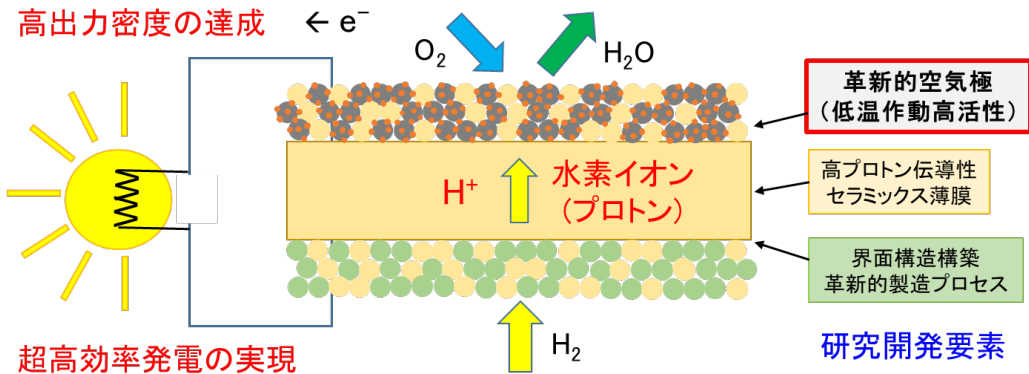
部分導電率精密評価

- トリプルコンダクターの電子(ホール)/プロトン/酸素部分導電率を評価することに成功

インクジェット印刷技術の開発

- (La,Sr)(Co,Fe)O₃系の印刷インクを試作

PCFCの構造と原理

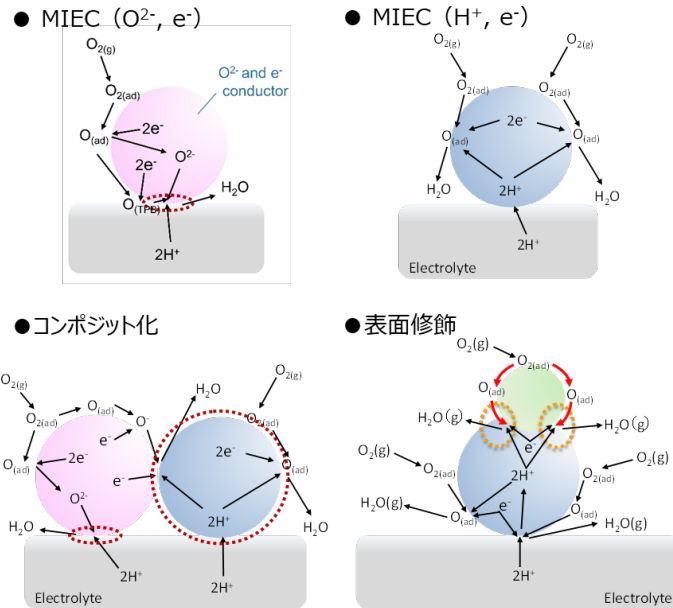
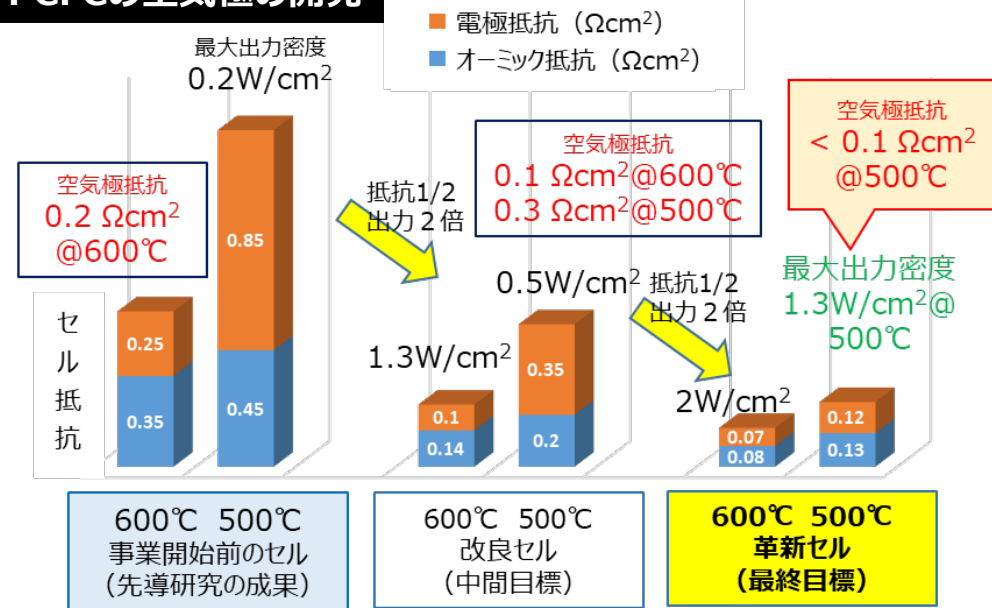


プロジェクト全体の目標

FY2024末

- ・発電効率の向上：65%以上を実証し、70%の効率を見通す
- ・出力密度の向上：1.3 W/cm²@500℃
- ・作動温度の低減：現状600℃→500℃作動
- ・耐久性の向上：電圧低下率 <1%/1000h
- ・システムの検討：単セルで高効率を実証し、システムの机上検討を行う

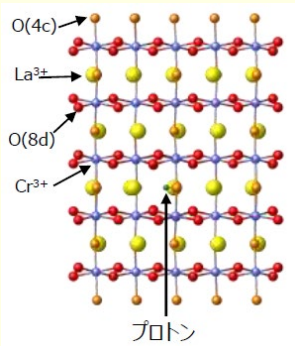
PCFCの空気極の開発



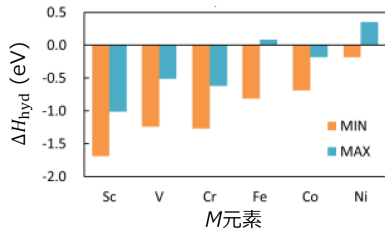
Ⓐ **高性能空気極の開発**：
材料選択/構造最適化の指針提示

Ⓑ **空気極の部材化・構造化技術開発**：
Ⓐを実現する部材化・構造化技術の確立

ペロブスカイト酸化物LaMO₃における水和エンタルピーを計算



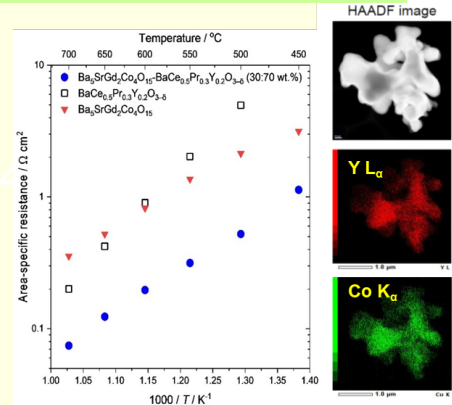
DFTによるプロトン再安定位置



① ファインセラミックスセンター
(1) 計算科学によるPCFC空気極探索・評価
電子構造・プロトン溶解過程/ホスト・添加カチオンの影響/表面構造の評価

(Ba,Sr)₆RE₂Co₄O₁₅-BaCe_{0.5}Pr_{0.3}Y_{0.2}O_{3-δ} 複合電極を検討

- ✓ BSRC成分自身にORR活性
- ✓ 反応は主に三相界面で進行
- ✓ BCPYへのCo拡散・固溶が二相界面におけるORR活性向上に寄与



② 京都大学
(2) 実験科学によるPCFC空気極探索・評価
PCFC空気極の性能評価
混合伝導体利用/コンポジット化/表面修飾

GLによる全体マネジメント

計算・実験結果の共有

● 高性能空気極設計指針の提示
材料・組成選択/微構造最適化/
表面修飾/コンポジット化など

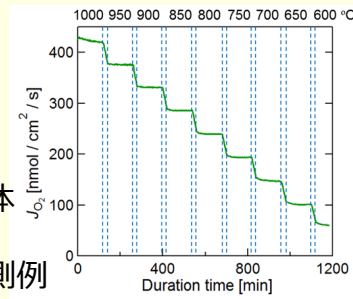
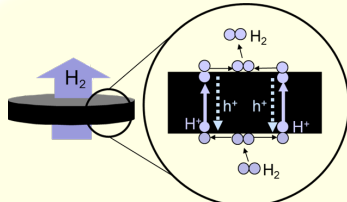
材料設計のフィードバック

③ 名工大
(3) 空気極材料の基礎物性評価
混合伝導体の材料物性評価
基礎物性・結晶構造の知見に基づく材料開発

④ 東北大学
(4) PCFC空気極の反応機構解明
モデル電極を活用した反応機構の解析
反応経路・有効反応場長の実験的特定

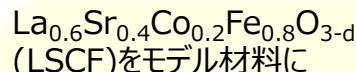
設計指針の実現

⑤ ノリタケカンパニーリミテド
(5) PCFC空気極の部材化・構造化技術
空気極材料粒子合成技術の開発
インクジェット印刷による電極部構造成形技術の開発

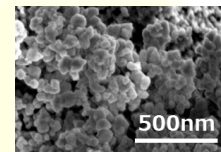


BCFYZ焼結体での酸素透過速度J_{O₂}の計測例

PCFC空気極用トリプルコンダクターの部分導電率を評価



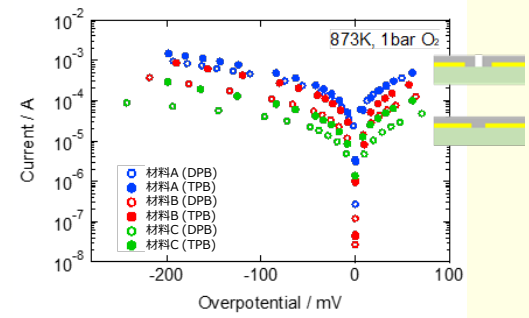
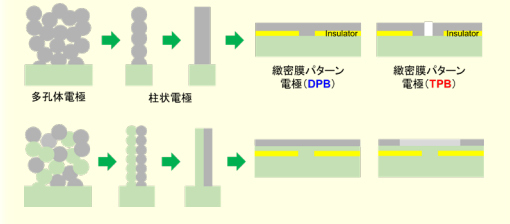
- ✓ 液相法による微粒の作製
- ✓ インクジェット印刷用インクの開発



PCFC空気極構造化のためのインクジェット技術を開発

モデル電極を用いてPCFC空気極の反応機構を解明

考案・作製されたモデル電極



- ✓ 材料による反応経路の違いを解明
- ✓ 性能の材料スクリーニング

超高効率プロトン伝導セラミック燃料電池デバイスの研究開発／ WP1 革新的高性能空気極・部材の開発 (GL:東北大 雨澤) 2020年度研究成果・トピックス

研究開発テーマ	実施機関	2020年度成果
① 計算科学的手法による高性能空気極材料の開発・評価	ファインセラミックスセンター	<ul style="list-style-type: none"> ホール+プロトン伝導を発現する空気極材料を探索 8種類のペロブスカイト型LaMO_3 (M = Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) の第一原理計算による解析で構造を再現
② 計算科学的手法による高性能空気極材料の開発・評価	京都大学	<ul style="list-style-type: none"> $(\text{Ba,Sr})_6\text{RE}_2\text{Co}_4\text{O}_{15}\text{-BaCe}_{0.5}\text{Pr}_{0.3}\text{Y}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$ (RE = 希土類元素) コンポジット電極を検討 Ba/Sr比の増加で分極減少、希土類の影響小 Co置換固溶による酸素還元能の向上を確認
③ 空気極材料の基礎物性評価	名古屋工業大学	<ul style="list-style-type: none"> 電子 (ホール) 、プロトン、酸素の部分導電率を評価 $\text{BaCo}_{0.4}\text{Fe}_{0.1}\text{Zr}_{0.1}\text{Y}_{0.1}\text{O}_{3-\delta}$ (BCFZY) の基礎物性を調査
④ 空気極反応機構の解明	東北大学	<ul style="list-style-type: none"> 多孔体空気極の造像を模擬したパターン緻密膜電極を用いてPCFC空気極の材料スクリーニングと反応機構評価を実施 三相界面と二相界面における反応の寄与度を明らかにしたコンポジット電極を模擬したモデル電極を開発
⑤ 新規空気極材料の部材化・構造化技術の確立	ノリタケカンパニーリミテド	<ul style="list-style-type: none"> 空気極材料部材化のためのインクジェット印刷技術の開発 実績のある$\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{Co}_{0.2}\text{Fe}_{0.8}\text{O}_{3-\delta}$ (LSCF) で印刷インクを試作