NEDO水素·燃料電池成果報告会2023

発表No.P2-17

燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型産学官連携研究開発事業/ 共通課題解決型基盤技術開発/長寿命化・高性能化達成のための設計シミュレーターの開発 団体名:京都大学、東北大学 流体科学研究所、東京工業大学、東京大学、九州大学 発表日:2024年7月19日









実施項目1-2. 応力下の補強膜高分子高次構造変化



●高分子主鎖 ◎ 疎水部 ● 親水基 ● ヒドロニウムイオン ● 水の中心部分 ● 水の極性部分

高分子が開裂した膜の機械的強度が低下することを再現した。

<u>実施項目1-3.酸化セリウムからのセリウムイオン溶出</u> 速度の計測と溶出制御法の開発(東京工業大学)

i)MPL添加CeO2の溶出・移動速度の導出

・CeO₂溶出現象は、MPLのpH環境が 支配的 (図1) で、FCV停止期間 (MPL液水滞留)中に進行する。

・実車FCVのMPL→膜へのCe³⁺溶出移動
 実験式は、下記で表される。
 アノード: 0.0012 mg/cm²×停止時間[h]
 カソード: 0.0009 mg/cm²×停止時間[h]

 容出
 FCV停止時の空気パージを増やす

 抑制
 →MPLの液水滞留状態低減を図る





実車のMPL添加CeO2溶出移動速度を予測する実験式を導出した。 CeO2溶出移動速度の制御方法を提案した。

<u>実施項目1-4.セリウムイオン輸送モデルの構築とPEM内</u> セリウムイオン分布予測シミュレーターの開発(東北大学)



<u>実施項目2-1.触媒インクからの触媒層構造形成過程の計測(東京工業大学)</u>

撹拌工程(装置仕様)が触媒インク粒度分布に及ぼす影響調査

結果

Collodal

Rod like

Dispersion

ael

- i)2種の撹拌装置を用いて溶媒組成の異なるインク(水リッチ,アルコールリッチ)を調製
 - (a)水リッチインク:インク粒度分布に撹拌装置の相違は見られない。
 - (b)アルコールリッチインク:粉砕ナノ太郎®を採用時に顕著な分散化を確認。
 - ⇒ 撹拌装置粉砕能力の相違が、インク分散性に影響を与える。
- ii)粉砕ナノ太郎®で分散化されたアルコールリッチインクも再凝集するため、約1日の経過で FILMIX®で撹拌したインクと同等の凝集状態に至る







触媒インク内部のアイオノマー状態、アイオノマー吸着プロセス、最終 状態をMD計算により評価した。

<u>実施項目3-10.極薄自立MPLの創出と酸素輸送シミュレーション(東京工業大学)</u>

実機流路条件での極薄GDLの性能低下が大きな課題になっていたが、 GDLの強度を高めることで性能改善の見通しを得ることができた。

連絡先:国立大学法人京都大学 河瀬元明 kawase@cheme.kyoto-u.ac.jp

NEDO水素·燃料電池成果報告会2023

発表No.P2-17

燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型産学官連携研究開発事業/ 共通課題解決型基盤技術開発/長寿命化・高性能化達成のための設計シミュレーターの開発 团体名:京都大学、東北大学 流体科学研究所、東京工業大学、東京大学、九州大学 発表日:2024年7月19日

FC-Platform

<u>実施項目3.発電性能を予測するマルチスケールシミュレーターの開発</u> <u>(東北大学、九州大学、東京大学)</u>

実施項目3-1,2. 電極反応の大規模数値シミュレーション手法の開発/担体の細孔構造、 アイオノマー被覆を改善する担体表面の設計法の開発(東北大学)

<u>実施項目3-5,6.Cryo-SEM画像から触媒層構造を数値的に再構築する技術開発と数値モデル化</u> <u>、触媒層内液水飽和モデルの開発(東京大学、九州大学、東北大学)</u>

水吸着量

---Experimen'

LDFT Simulation

-Saturation Rate

(per 10% RH incr

O,実効拡散係数のRH依存性

触媒担体粒子(Mirai-2G)の3D-TEM構造データを対象に 水の相変化を格子DFT法により解析し、白金触媒の 利用率の相対湿度依存性を再現した。

Exterior Pt Active Pt Inactive Pt Carbon Liquid water

C. J. C. Otic, S. Katayama, M. Arao, M. Matsumoto, H. Imai, I. Kinefuchi, ACS Appl. Mater. Interfaces 16, 20375 (2024).

実施項目4. モデルベースのPEFCシステムシミュレーターの開発

<u>スタック性能・劣化モデルの開発/ 多様なアプリケーションへ対応するためのシステムのモデルと制御器の開発/ユーザビリティの改善(京都大学、東京農工大学)</u>

連絡先:国立大学法人 京都大学 河瀬元明 kawase@cheme.kyoto-u.ac.jp