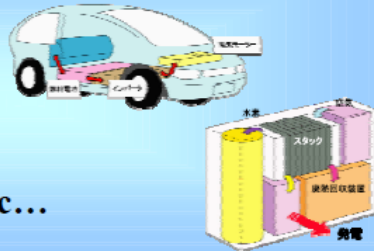


|          | PEFC           | PAFC           | MCFC                |
|----------|----------------|----------------|---------------------|
| 電解質      | 高分子            | リン酸            | 熔融炭酸塩               |
| 作動温度(°C) | 100以下          | 200            | 600~700             |
| 燃料       | H <sub>2</sub> | H <sub>2</sub> | H <sub>2</sub> , 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

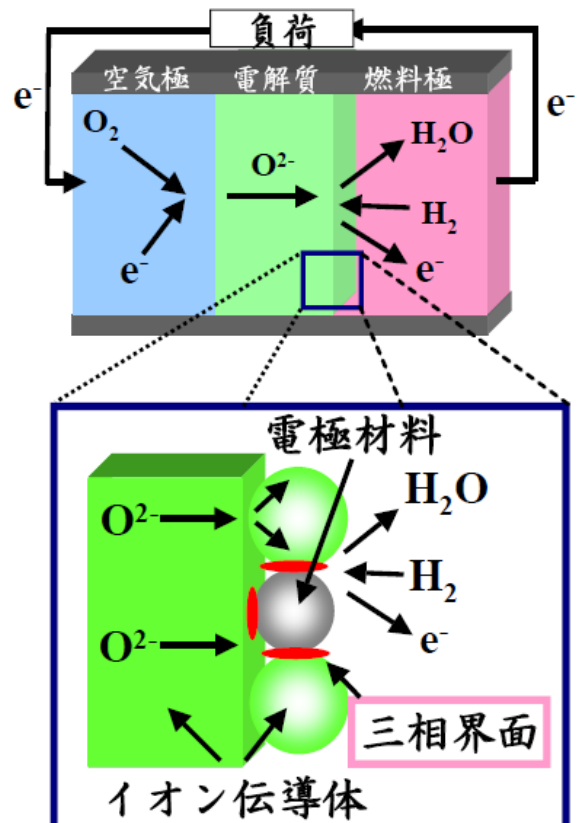
解析に基づいた最適設計

モデル構築

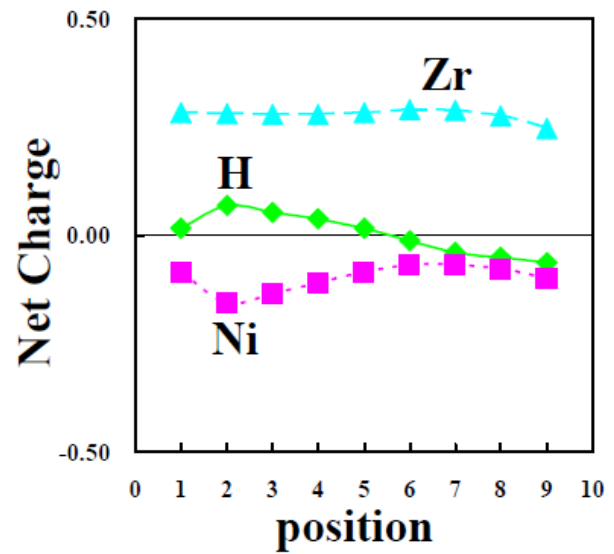
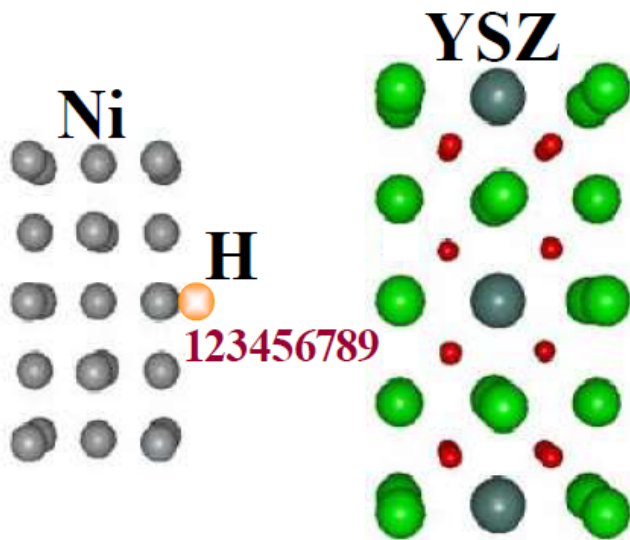
分子動力学法

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。