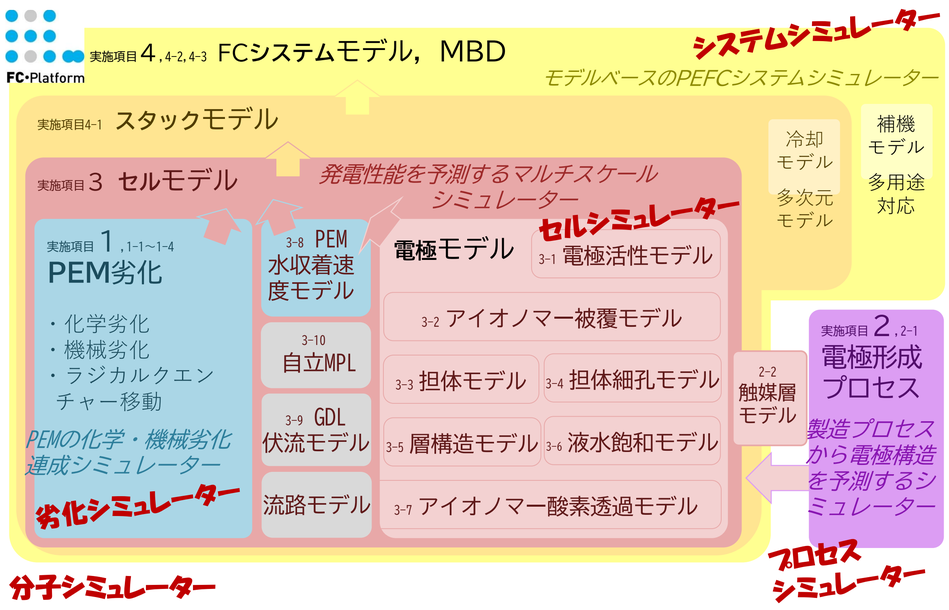
NEDO水素・アンモニア成果報告会2025

発表No.P2-21

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、東京科学大学、東京大学、九州大学

発表日：2025年7月16日



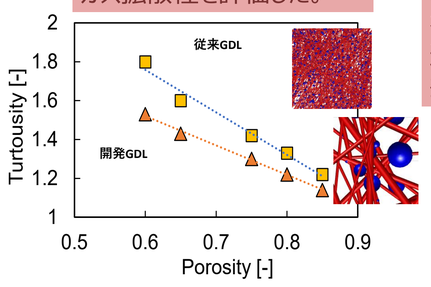
- 高効率，高耐久，低コストの燃料電池システムを実現するための**ユーザーニーズに基づく基盤技術**を開発する
- 新規に開発された材料に対して，物性値や特性値から，セルの**初期性能ならびに耐久性を予測する**＆**モデルベース開発**（MBD）
- シミュレーション技術を産業界および学術界へ普及させ活用してもらう

PEM劣化モデル、プロセス・性能シミュレーターの構成要素モデル、および、MBDの基盤技術としてPEFCシステムモデルを構築し、産業界で活用可能な**4つの数値シミュレーターを開発**した。

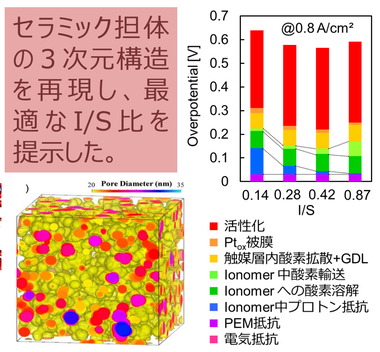
(1) 膜の劣化シミュレーター
(2) 電極製造プロセスシミュレーター
(3) マルチスケール性能シミュレーター
(4) FCシステムシミュレーター

「燃料電池システムシミュレーターFC-DynaMoの開発」で市村地球環境学術賞貢献賞を受賞した。

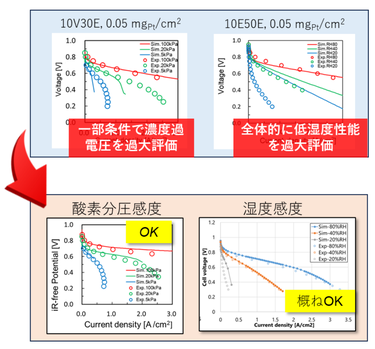
GDLの模擬構造を再現し、ガス拡散性を評価した。



セラミック担体の３次元構造を再現し、最適なI/S比を提示した。



実測と計算との乖離を検証し、モデル改良で予測精度が向上した。



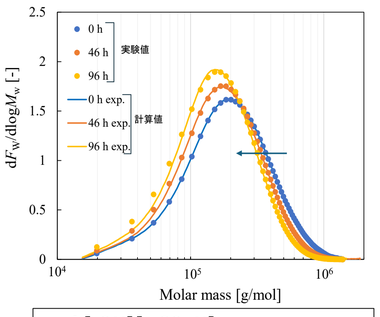
実施項目１. PEMの化学・機械劣化連成シミュレーターの開発

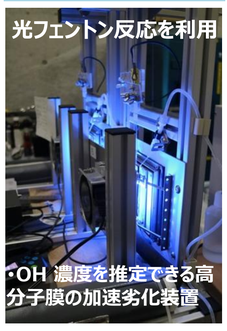
電解質膜の化学劣化に伴う分子開裂モデルおよび分子量分布の変化を定量的に提示した。

$Fe^{2+} + H_2O_2 \rightarrow Fe^{3+} + \cdot OH + OH^-$

$2[Fe^{III}(C_2O_4)_n]^{3-2n} \rightarrow 2Fe^{2+} + (2n-1)C_2O_4^{2-} + 2CO_2$

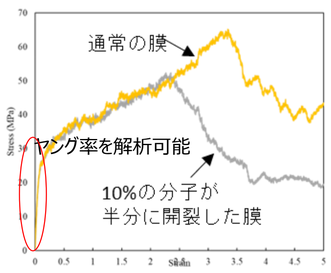
化学劣化の指標：分子の開裂に伴う分子量の低下



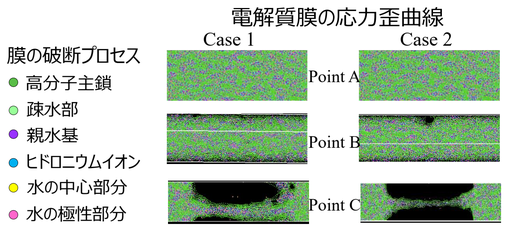


$r = k[\bullet OH][-SO_3H]$;
$k = 1.45 \times 10^3$ L mol^{-1} min^{-1} (90℃)

高分子が開裂した平均分子量の小さい膜の機械的強度が低下することを再現した。



電解質膜の応力歪曲線



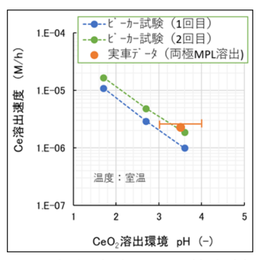
- 実車の添加CeO_2溶出速度を予測する実験式を導出した。
- CeO_2溶出速度の制御方法を提案した。

実車FCVのMPL→膜へのCe^{3+}溶出移動量

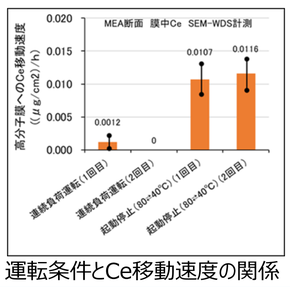
アノード：0.0012 (mg/cm²)/h×停止時間[h]

カソード：0.0009 (mg/cm²)/h×停止時間[h]

制御	制御方法一案
溶出加速	MPL中のCeO_2（Ⅳ）に、Ce_2O_3（Ⅲ）を追加添加する ⇒Ce_2O_3（Ⅲ）は、CeO_2（Ⅳ）の4倍の溶出速度
溶出抑制	FCV停止時の空気パージを増やす⇒MPLの液水滞留状態低減を図る



Ce溶出速度の pH依存性

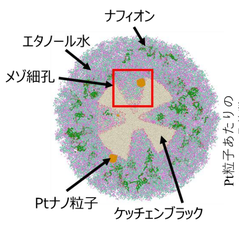


運転条件とCe移動速度の関係

実施項目２. 製造プロセスから触媒層構造を予測するシミュレーターの開発

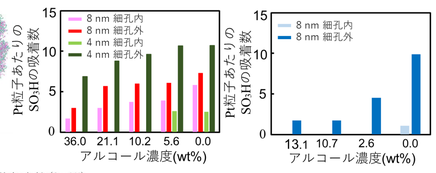
炭素担体細孔内のナフィオン吸着量のアルコール濃度と細孔径依存性を全原子MDで計算した。

触媒インクモデルの断面図

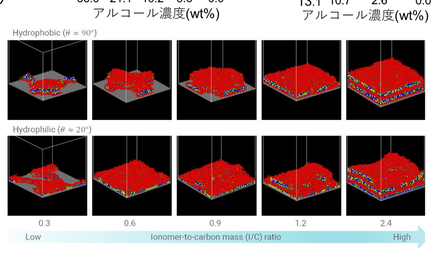


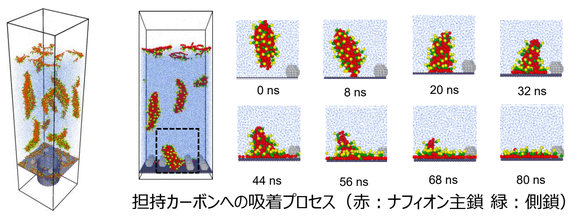
アルコール濃度及び炭素担体内の細孔サイズが異なる触媒インクモデルの分子動力学計算

アルコールの蒸発によるPtナノ粒子へのナフィオン吸着量の変化

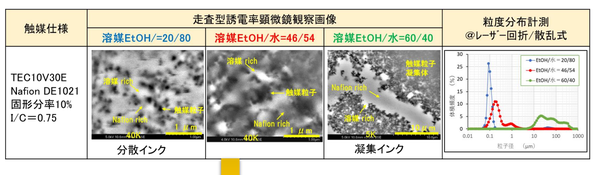


触媒インク中のアイオノマー状態、吸着プロセス、最終状態をMDで計算した。

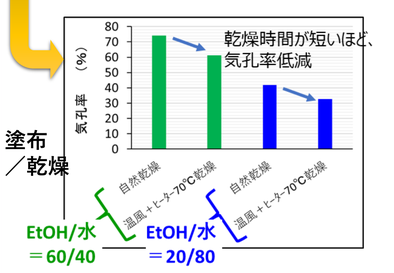




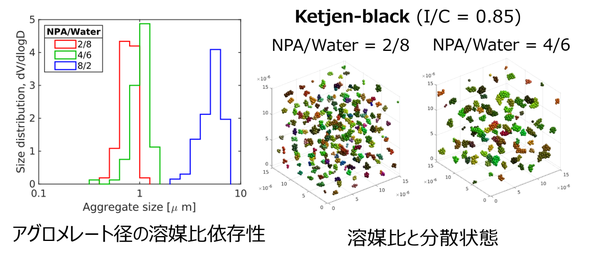
担持カーボンへの吸着プロセス（赤：ナフィオン主鎖 緑：側鎖）



・インク中の触媒粒子、アイオノマーの凝集体を可視化できる技術を確立した。
・インク物性と触媒層構造の関係を明らかにした。



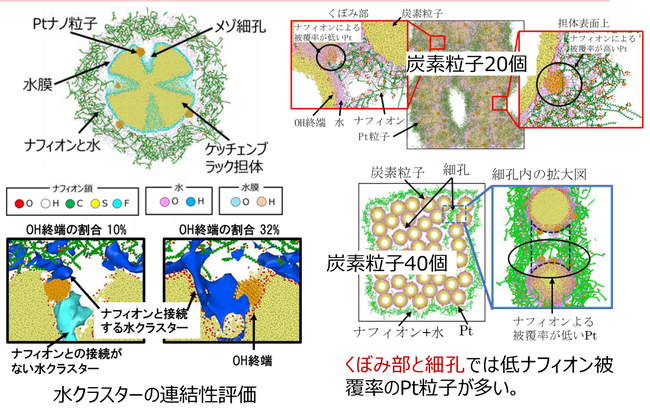
ハンセン溶解度パラメータで溶媒比とアイオノマーの吸着関係を表し、湿式プロセスにおける分散溶媒中の粒子凝集を再現した。



アグロメレート径の溶媒比依存性　溶媒比と分散状態

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

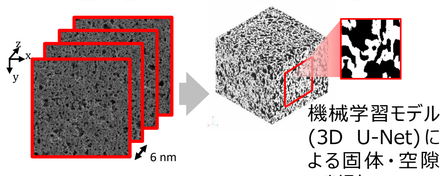
300万原子超の大規模触媒層モデルで分子動力学計算を実施し、水クラスターの挙動、凝集形態とナフィオン被覆状態の関係を明らかにした。



水クラスターの連結性評価

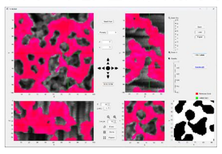
くぼみ部と細孔では低ナフィオン被覆率のPt粒子が多い。

Cryo FIB-SEM連続断面画像から高精度な三次元構造モデルを構築する手法を開発した。



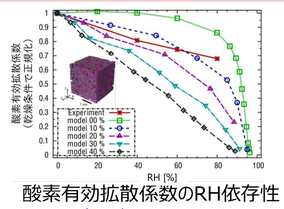
機械学習モデル（3D U-Net）による固体・空隙の判別

アノテーション画像作成アプリ



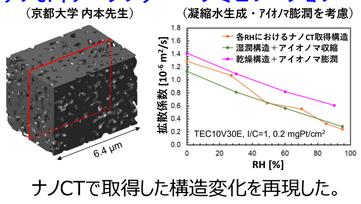
各断面画像および三次元データに対して固体・空隙判別を行い、高精度かつ効率的な処理を実現した。

触媒層内の液水分布を数値シミュレーションにより求め、酸素拡散係数の相対湿度依存性を予測する手法を開発した。



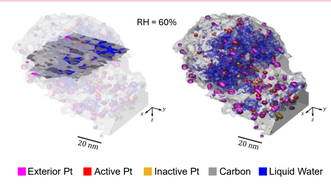
酸素有効拡散係数のRH依存性

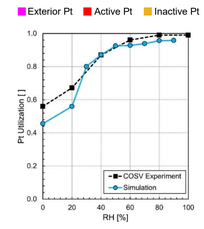
ナノCTイメージング（京都大学 内本先生）　シミュレーション（凝縮水生成・アイオノマ膨潤を考慮）



ナノCTで取得した構造変化を再現した。

触媒担体粒子内の水の相変化をシミュレーションにより求め、白金触媒の利用率の相対湿度依存性を再現した。



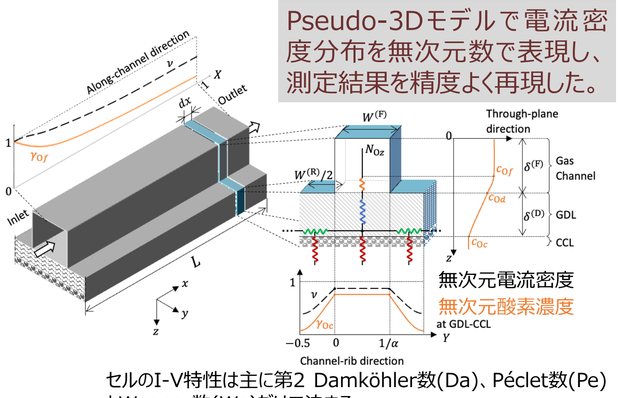


白金触媒の利用率

- ECSAのRH依存性を概ね再現した。
- 担体粒子内の細孔形状、濡れ性、白金粒子分布の影響を評価できる。

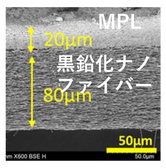
C. J. C. Otic, S. Katayama, M. Arao, M. Matsumoto, H. Imai, I. Kinefuchi, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **16**, 20375 (2024).

Pseudo-3Dモデルで電流密度分布を無次元数で表現し、測定結果を精度よく再現した。

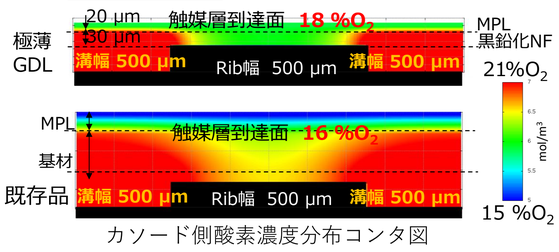


セルのI-V特性は主に第2 Damköhler数(Da)、Péclet数(Pe)とWagner数(Wa)だけで決まる。

黒鉛化ナノファイバー＋MPLの極薄GDLを作製し、2030年目標の抵抗低減を達成した。

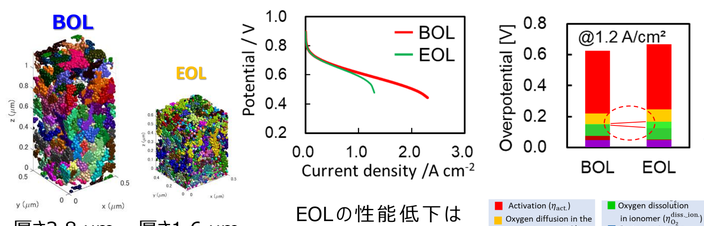


GDL物性値	2030年目標	極薄GDL（二層型）	既存品 (SGL25BC)
面積抵抗 (mΩ・cm²) @面圧1MPa	<1	5	7
酸素輸送抵抗 (s/m)	<18	15	24



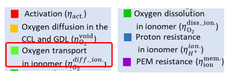
カソード側酸素濃度分布コンタ図

担体、Pt担持量、I/C違いのI-V性能の酸素分圧依存性を再現した。CB劣化による発電性能低下を定性的に評価した。

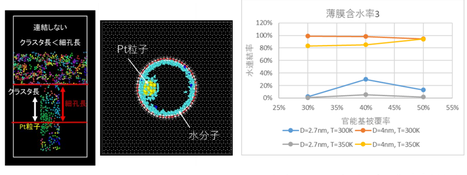


厚さ2.8 μm　空隙率 0.41　　厚さ1.6 μm　空隙率 0.16

EOLの性能低下は酸素輸送抵抗の増加に起因する。



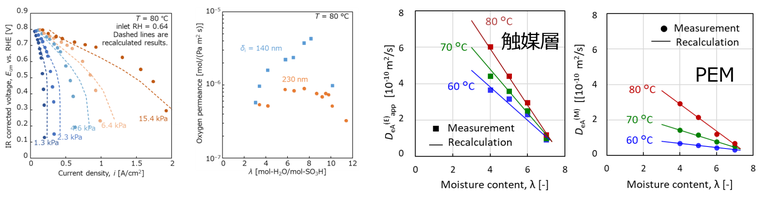
一次細孔内部の水の分布や水クラスターの連結性を評価できる手法を開発した。



高分子　水素分子　水分子　炭素原子　ヒドロニウムイオン　酸素原子　白金粒子

アイオノマーから白金触媒まで水クラスターが連結する確率は細孔径が大きく、温度が低い方が大きい。

反応速度定数、有効プロトン伝導度、有効酸素拡散係数、アイオノマー中酸素パーミアンス、水の有効拡散係数を決定した。

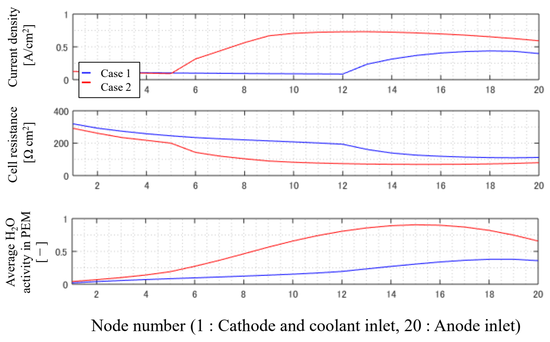


アイオノマー中酸素パーミアンスは含水率の上昇とともに向上するが、含水率が8を超えると低下する。

水の有効拡散係数は含水率に対して直線的に変化し、含水率が高いほど低い。触媒層内の有効拡散係数は膜内の約3倍。

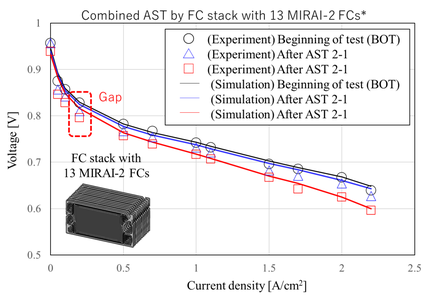
実施項目４．モデルベースのPEFCシステムシミュレーターの開発

各種部品の特性や作動条件とシステム全体の性能の関係を定量的に計算する燃料電池システムシミュレーターを開発した。物質輸送・反応の面内分布を表現可能な1+1Dモデルを実装した。

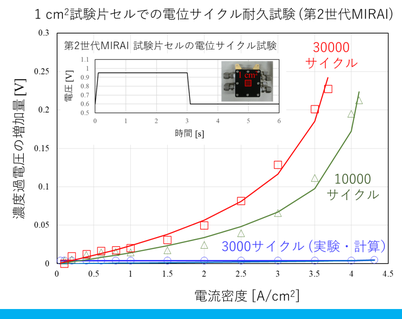


多用途展開に関し、液液熱交換器のブロックを作成し、車両用（デフォルト）と船舶用の切り替え可能とした。定置FC用の制御システムのプログラムを作成した。また、改質器のモデル仕様書、改質器のプログラムを作成した。

劣化モデル（白金粒子成長、カーボン腐食）を実装した。

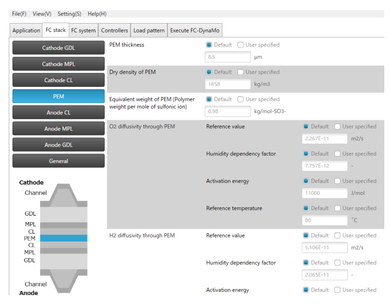


劣化シミュレーション結果を耐久試験実測値で検証した。



FC-DynaMo ユーザー登録数
MATLAB版：34
Windowsアプリ版：173

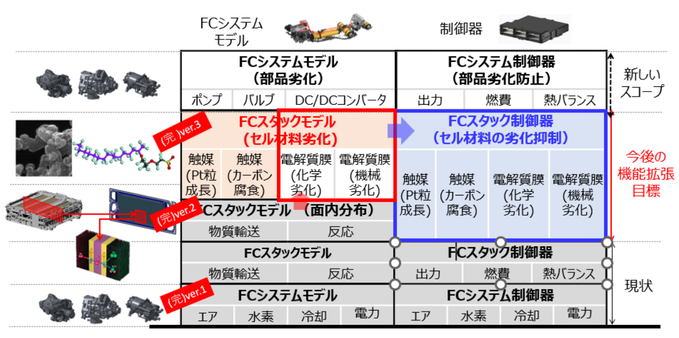
GUIから簡便に操作可能なアプリケーションを開発した。



状態量からユニット操作量を決定する制御システムを開発した。

状態量設定値マップを自動的に変更できるシステムを開発した。最適値←デフォルト値。

Net efficiency / %		Current density / (A/cm²) 0.2	1.0	1.5	2.0
Coolant temperature at FC outlet / °C	50	62.4←58.2	44.1←44.0	37.8←37.8	28.9←28.6
	65	63.9←62.3	46.4←45.9	40.6←40.6	35.1←35.0
	80	56.5←56.3	46.7←45.9	42.3←42.1	38.0←38.0
	85	56.4←56.1	47.4←46.2	43.6←42.7	39.4←39.0



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