

界面を介したイオン流動に関する理論モデルの構築 固体高分子形燃料電池におけるプロトン流動

大阪大学大学院 基礎工学研究科 機能創成専攻
講師 土井 謙太郎

本研究では、固体高分子形燃料電池において、オーム抵抗による過電圧が顕著に現れる電流密度領域についての理論モデルを構築する。従来の流体モデルでは、電解質膜におけるプロトン流動を Poisson 方程式で記述することにより、オームの法則に支配された伝導過程と考えられてきた。しかしながら、電解質膜におけるエネルギー損失のみならず、電極/電解質膜界面における接触抵抗についても無視することはできないと考えられる。本研究では、二層界面におけるイオンの流動過程について、電極と電解質膜の界面にあるポテンシャル障壁の間を流動するプロトンを記述するための支配方程式を導出する。その結果、オーム抵抗が見られる電流密度領域において界面抵抗によるエネルギー損失を示すことができる。と考える。

燃料電池内部のナノスケール熱流動現象の数値解析

東北大学 流体科学研究所
准教授 徳増 崇

Fuel cells are believed to play an important role in energy supply in the near future. In a fuel cell, there are many nanoscale flows which are dominated by chemical reactions, for instance, proton transfer in polymer electrolyte membrane or dissociation phenomena of gas molecule on metal surface. In this seminar, the characteristics of microscopic interactions between each atoms and the relation between the microscopic phenomena and macroscopic heat and fluid flow is explained using some examples of molecular dynamics simulation.

量子論に基づくマルチフィジックスシミュレータの開発と機械工学プロセスへの応用

東北大学大学院 工学研究科
教授 久保 百司

世界に先んじた次世代材料・プロセス技術を創造するためには、電子・原子レベルでの化学反応の制御が必須である。特に、超微細化が急速に進む近年の材料・プロセス技術は、「化学反応」に加えて「摩擦、衝撃、応力、流体、伝熱、光、電場」などが複雑に絡み合ったマルチフィジックス現象プロセスであるため、化学反応の解明のみならず、これらマルチフィジックス現象の深い理解が不可欠である。これに対し、従来の機械工学は、巨視的あるいは連続体としての取り扱いを中心として発展してきたために、「化学反応」を含むマルチフィジックス現象には対応できていない。そこで著者らは、量子論に基づき「化学反応」を含むマルチフィジックス現象を解明可能な新規計算科学手法を開発し、ナノメカノケミストリー、ナノ加工、ナノ材料、ナノトライボロジーなど広範な研究領域において、「化学反応」を含むマルチフィジックス現象の電子・原子レベル制御を実現してきた。さらに、これら研究成果を未来産業技術の創生、さらには日本発の新しい市場・産業創出のために大きく展開したいと考えている。本講演では、著者らが開発した量子論に基づくマルチフィジックスシミュレータの開発と自動車エンジンにおけるトライボロジー、燃料電池における電極反応ダイナミクス、半導体プロセス、原子炉の応力腐食割れ現象など多様な系への応用例について概説する。