

Title	SOFC長寿命化に貢献する強弾性構成モデルの提案と次世代型燃料電池設計指針の確立
Sub Title	Ferroelastic constitutive model contributing to prolongation of SOFC life and establishment of next-generation fuel cell design guideline
Author	村松, 眞由(Muramatsu, Mayu)
Publisher	
Publication year	2019
Jtitle	科学研究費補助金研究成果報告書 (2018. )
JaLC DOI	
Abstract	<p>本研究では, 固体酸化物燃料電池 (SOFC) の空気極となるランタンストロンチウムコバルトフェライト (LSCF) の微視組織の発展を考慮し, SOFCにおける強弾性現象を表現可能な数理モデルを開発した. Phase-field場と変形場の連成解析プログラムを実装し, マクロな力学特性を算出するとともに, 外部応力場において形成される組織に関する考察も行った. また, 多結晶材料における解析を実施した. その結果初期核生成サイトおよび結晶方位に依存して異なるバリエーションおよび方位のラメラ組織が形成される様子を再現した. さらに連成型均質化法における解析より, 強弾性相の成長中に生じるマクロ変形を示した.</p> <p>In this study, considering the development of microstructure of lanthanum strontium cobalt ferrite (LSCF), which is the cathode electrode of solid oxide fuel cell (SOFC), we developed a mathematical model that can express ferroelastic phenomena in SOFC. We implemented a coupled analysis program of Phase-field and deformation field, calculated macroscopic mechanical properties, and also considered the structure formed in external stress field. In addition, analysis for polycrystalline materials were performed. As a result, it was reproduced that lamellar structures of different variants and orientations were formed depending on the initial nucleation site and crystal orientation. Furthermore, from the analysis in the coupling homogenization method, the macroscopic deformation which occurs during the growth of the ferroelastic phase is shown.</p>
Notes	<p>研究種目: 若手研究(B) 研究期間: 2016~2018 課題番号: 16K17977 研究分野: 固体力学, 計算力学</p>
Genre	Research Paper
URL	<a href="https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=KAKEN_16K17977seika">https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=KAKEN_16K17977seika</a>

慶應義塾大学学術情報リポジトリ(KOARA)に掲載されているコンテンツの著作権は、それぞれの著作者、学会または出版社/発行者に帰属し、その権利は著作権法によって保護されています。引用にあたっては、著作権法を遵守してご利用ください。

The copyrights of content available on the Keio Associated Repository of Academic resources (KOARA) belong to the respective authors, academic societies, or publishers/issuers, and these rights are protected by the Japanese Copyright Act. When quoting the content, please follow the Japanese copyright act.

令和 元年 6 月 6 日現在

機関番号：32612

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K17977

研究課題名（和文）SOFC長寿命化に貢献する強弾性構成モデルの提案と次世代型燃料電池設計指針の確立

研究課題名（英文）Ferroelastic constitutive model contributing to prolongation of SOFC life and establishment of next-generation fuel cell design guideline

研究代表者

村松 眞由（Muramatsu, Mayu）

慶應義塾大学・理工学部（矢上）・講師

研究者番号：20609036

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000 円

研究成果の概要（和文）：本研究では、固体酸化物燃料電池(SOFC)の空気極となるランタンストロンチウムコバルトフェライト(LSCF)の微視組織の発展を考慮し、SOFCにおける強弾性現象を表現可能な数理モデルを開発した。Phase-field場と変形場の連成解析プログラムを実装し、マクロな力学特性を算出するとともに、外部応力場において形成される組織に関する考察も行った。また、多結晶材料における解析を実施した。その結果初期核生成サイトおよび結晶方位に依存して異なるバリエーションおよび方位のラメラ組織が形成される様子を再現した。さらに連成型均質化法における解析より、強弾性相の成長中に生じるマクロ変形を示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

これまでのSOFC性能評価にはもっぱら熱力学的もしくは電気化学的解析が行われてきたが、SOFC長期健全性予測のためには、長期稼働中の組織変化を考慮した変形シミュレーションこそが必要な数値解析となる。本研究は、実験に基づいて材料ダイナミクスレベルで強弾性の構成モデルを提案した。本解析技術によって、強弾性による特異な力学挙動が反映された長期耐久性解析結果を得ることができると予想され、次世代SOFC設計の指針策定がより簡便になる。これはSOFC内で生じる現象を明らかとする基礎研究の点でも、次世代SOFCの耐久性向上においても大きな意義があると考えている。

研究成果の概要（英文）：In this study, considering the development of microstructure of lanthanum strontium cobalt ferrite (LSCF), which is the cathode electrode of solid oxide fuel cell (SOFC), we developed a mathematical model that can express ferroelastic phenomena in SOFC. We implemented a coupled analysis program of Phase-field and deformation field, calculated macroscopic mechanical properties, and also considered the structure formed in external stress field. In addition, analysis for polycrystalline materials were performed. As a result, it was reproduced that lamellar structures of different variants and orientations were formed depending on the initial nucleation site and crystal orientation. Furthermore, from the analysis in the coupling homogenization method, the macroscopic deformation which occurs during the growth of the ferroelastic phase is shown.

研究分野：固体力学，計算力学

キーワード：SOFC 強弾性 Phase-field

## 1. 研究開始当初の背景

SOFC 長寿命化の鍵とされているのは、各メーカーごとに形状が大きく異なる SOFC に対し、9 万時間以上使用時の状況を予測する解析技術の構築である[NEDO 平成 27 年度実施計画書]。SOFC は複数の現象が組み合わさって発電するため各現象を組み合わせで解析しなくてはならない。従来 SOFC の電気化学特性や熱特性は研究されてきたが、力学的特性の検討は不十分で、変形解析技術の開発が望まれていた。さらに近年、SOFC の空気極となるランタニウムコバルトフェライト(以降 LSCF と略称)は、強弾性と呼ばれる性質を有し、帯状組織の発達とともに応力ひずみ曲線上特異な力学挙動を示すことが明らかとなり長期稼働時の SOFC 変形挙動への影響が指摘されている。しかしながら現状では強弾性を適切に表現する構成モデルが存在しないためこれを考慮した解析技術はなく、ひいては強弾性を考慮して設計された SOFC は皆無である。

SOFC の数値解析は、コロラド大学の Zhu グループや東京大学の鹿園グループが熱解析[Zhu, 2008]や電気化学解析 [Shikazono, 2010]に精力的に取り組んできたのに対し、申請者らのグループでは電気化学反応に伴う還元膨張ひずみおよび熱ひずみを考慮した熱・電気化学-力学解析に独自に取り組む、SOFC 発電時の変形挙動を明らかにしてきた。一方、申請者の所属研究室では、強弾性の組織形成と特異な応力状態に着目した実験研究を実施中である。さらに以前実施した研究で、申請者は金属の熱間圧延において組織形成(材料ダイナミクス)を反映した力学解析技術開発の経験を有する。そこで、実験に基づいて強弾性による組織発達を定式化し、これまで構築してきた熱・電気化学-力学解析へと導入すれば、SOFC 発電時の状況をより精度良く予測可能な解析が達成され、次世代型 SOFC 設計の指針の探索が可能になるとの着想に至った。

## 2. 研究の目的

本研究では、実験に基づいて、材料ダイナミクスに伴う強弾性の特異な力学挙動を表現可能な構成モデルを新たに構築し、これまでに申請者らが開発してきた熱・電気化学-力学解析技術へと反映させることで、次世代型 SOFC の設計に貢献する数値解析ツールを提案する。同時に、強弾性が SOFC の変形挙動に及ぼす影響を明らかにする。その際、ミクロスケールの組織発達によるマクロスケールの力学特性の変化には均質化法を適応する。さらに、実機 SOFC による実験および構築したツールによる数値解析から長寿命 SOFC の設計指針を確立する。

## 3. 研究の方法

本研究では、実験に基づいて、材料ダイナミクスに伴う強弾性の特異な力学挙動を表現可能な構成モデルを新たに構築し、これまでに申請者らが開発してきた熱・電気化学-力学解析技術へと反映させることで、次世代 SOFC の設計に貢献する数値解析ツールを提案する。同時に、強弾性が SOFC の変形挙動に及ぼす影響を明らかにする。その際、ミクロスケールの組織発達によるマクロスケールの力学特性の変化には均質化法を適応する。さらに、実機 SOFC による実験および構築したツールによる数値解析から長寿命 SOFC の設計指針を探索する。

## 4. 研究成果

本研究では、固体酸化物燃料電池(SOFC)の空気極となるランタニウムコバルトフェライト(LSCF)の微視組織の発達を考慮し、SOFC における強弾性現象を表現可能な数理モデルを開発した。Phase-field 場と変形場の連成解析プログラムを実装し、マクロな力学特性を算出するとともに、外部応力場において形成される組織に関する考察も行った。また、多結晶材料における解析を実施した。その結果初期核生成サイトおよび結晶方位に依存して異なるバリアントおよび方位のラメラ組織が形成される様子を再現した。さらに連成型均質化法における解析より、強弾性相の成長中に生じるマクロ変形を示した。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 2 件)

- (1) Muramatsu, M., Yashiro, K., Kawada, T. and Terada, K., "Simulation of Ferroelastic Phase Formation Using Phase-field Model", International Journal of Mechanical Sciences, Vols. 146-147, pp. 462-474, (2018). (査読有り)
- (2) Muramatsu, M., Kawada, T. and Terada, T., "A Simulation of Ferroelastic Phase Formation by Using Phase Field Model", Key Engineering Materials, Vol. 725, pp 208-213, (2017). (査読有り)

〔学会発表〕(計 9 件)

- (1) Muramatsu, M.\*, Kawada, T. and Terada, K., "An Analysis of Formation of Ferroelastic Phase in Metallic Oxide LSCF in Solid Oxide Fuel Cell", Abstract of 13th World Congress on Computational Mechanics (WCCM 2018), 2020057, in New York, USA, (2018).
- (2) 村松真由\*, 八代圭司, 川田達也, 寺田賢二郎, 「微視組織の発展を考慮した燃料電池材料のマルチスケール解析」, 第 23 回計算工学講演会, C-06-02 (5 pages), (2018)
- (3) Muramatsu, M.\*, "A Simulation of Cubic to Rhombohedral Ferroelastic Phase Transformation of LSCF Based on Phase-field Model", 4th Japanese-German Workshop on Computational Mechanics (GJ4), Session 1-3, in Sendai, Japan, (2017).
- (4) Muramatsu, M.\*, Yashiro, K., Kawada, T. and Terada, K., "A Simulation of Ferroelastic Phase Formation in LSCF Polycrystal Based on Phase-field Model", 5th International Conference on Material Modeling (ICMM5), Session 8-7, in Rome, Italy, (2017).
- (5) 村松真由\*, 八代圭司, 川田達也, 寺田賢二郎, 「強弾性相の発展を伴う LSCF のマルチスケールシミュレーション」, 第 22 回計算工学講演会, B-02-1 (6 pages), (2017).
- (6) 村松真由\*, 八代圭司, 川田達也, 寺田賢二郎, 「Phase-field 法を用いた固体酸化物燃料電池材料の相変態-変形連成シミュレーション」, 第 30 回日本機械学会計算力学講演会講演論文集, OS09-2-107 (2 pages), (2017).
- (7) Muramatsu, M.\*, Kawada, T. and Terada, K., "Mechanical Simulation Considering The Evolution of Microstructure in The Ferroelastic Material LSCF", The 22th International Symposium on Plasticity and Its Current Applications, WA-4-3, in Hawaii, USA, (2016).
- (8) 村松真由\*, 川田達也, 寺田賢二郎, 「強弾性相の発展を伴う LSCF のマルチスケールシミュレーション」, 第 21 回計算工学講演会講演論文集, F-7-4 (6 pages), (2016).
- (9) Muramatsu, M.\*, Kawada, T. and Terada, K., "An Analysis of Formation of Ferroelastic Phase in Metallic Oxide LSCF in Solid Oxide Fuel Cell", Abstract of 12th World Congress on Computational Mechanics (WCCM 2016), MS614D-3, in Seoul, Korea, (2016).

〔図書〕(計 件)

〔産業財産権〕

出願状況 (計 件)

名称：  
 発明者：  
 権利者：  
 種類：  
 番号：  
 出願年：  
 国内外の別：

取得状況 (計 件)

名称：  
 発明者：  
 権利者：  
 種類：  
 番号：  
 取得年：  
 国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等

## 6 . 研究組織

(1)研究分担者

研究分担者氏名：

ローマ字氏名：

所属研究機関名：

部局名：

職名：

研究者番号 (8 桁)：

(2)研究協力者  
研究協力者氏名：  
ローマ字氏名：

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。