

原研究室

[エネルギー高効率利用に向けた計算材料科学]

生産技術研究所 エネルギー工学連携研究センター
Collaborative Research Center for Energy Engineering

<http://web.feslab.iis.u-tokyo.ac.jp>

エネルギー計算材料工学

機械工学専攻

エネルギー材料への計算材料科学的アプローチ

Computational Materials Science Approach toward Energy Materials

ミクロからマクロに至る様々な計算材料科学的アプローチを活用しながら、固体酸化物形燃料電池 (SOFC) といった次世代型高効率エネルギーシステムに内在する様々な材料課題の現象解明や性能予測モデリング技術の開発に取り組んでいる。また、現象を正確に解明するためには、材料挙動の速度論的情報等を高精度にミクロスケールから評価できる技術が必要となる。そこで時空間スケールの克服を目指した新しいミクロ解析技術の基盤開発も行っている。

- ◆キネティックモンテカルロ解析によるSOFC燃料極メゾ構造の時間発展予測
- ◆原子スケール解析によるSOFC燃料極・電解質材料の拡散特性予測
- ◆加速化分子動力学法を開発し、転位核生成の活性化パラメータを導出
- ◆分子動力学-有限要素法連結手法を開発し、界面剥離過程を解析

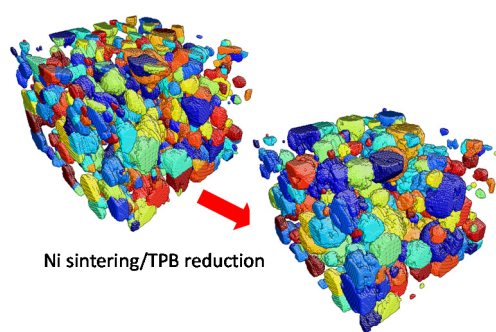


図1. SOFC運転中のNi粗大化過程のメゾスケール解析

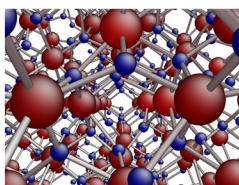


図2. YSZ電解質の原子空孔挙動

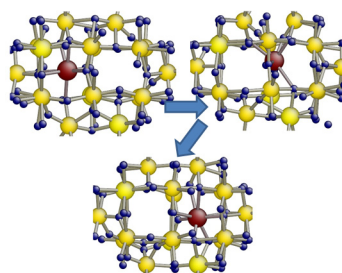


図3. Ni/NiO燃料極界面構造

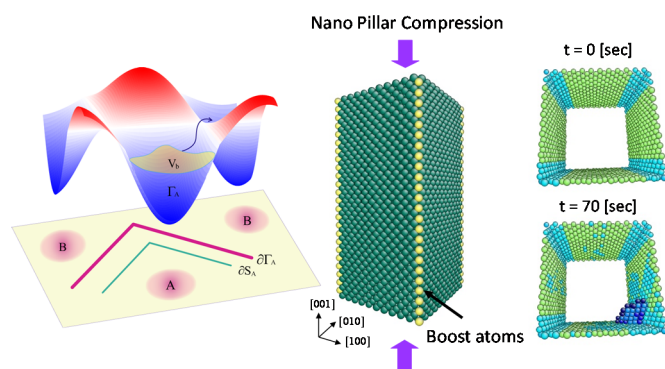


図4. 加速化分子動力学法による転位核生成解析

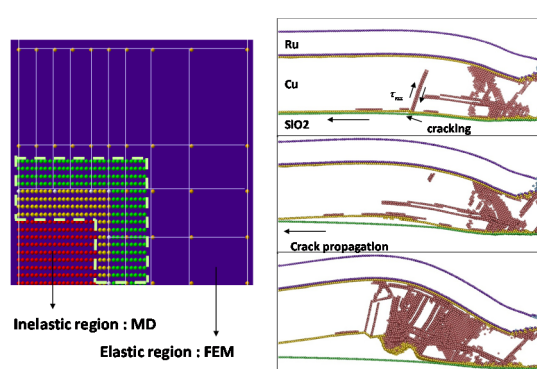


図5. 分子動力学-有限要素法連結手法による大規模界面剥離解析