

MERIT 企業インターンシップ（国内）報告書

MERIT 4期生
理学系研究科 物理学専攻
辻本直人

【実施期間】

2017年9月11日～10月27日

【受け入れ先】

トヨタ自動車 基盤材料技術部

【概要】

約1ヶ月半、愛知県豊田市にあるトヨタ自動車の基盤材料技術部におけるインターンシップに参加した。基盤材料技術部では燃料電池についての計算機シミュレーションを精力的に行っており、今回は特に、燃料電池の触媒層に含まれているアイオノマー中での酸素の拡散機構について、理論的側面から解析を行った。

【研究内容】

燃料電池は、高効率・クリーンなエネルギー源として期待されている。それを搭載した燃料電池車の開発の鍵となるのが「高出力化」「小型化」「低コスト化」である。燃料電池は、電解質の両側に電極を接合した **Membrane Electrode Assembly**、**MEA** をセパレータで挟んだ単セルから構成され、これを積層することで高電圧を得る。**MEA** に注目すると、高出力化に向けて、「触媒活性」「アイオノマー（触媒層に含まれるプロトン伝導性の高分子）のプロトン伝導」「アイオノマー中の酸素透過度」の向上が重要となる。今回はアイオノマー中の酸素透過度の向上をターゲットにし、特によく使用されており、実験データも豊富にあるアイオノマーの一種であるナフィオン中の酸素拡散について、古典分子動力学法を用いて解析を行った。

拡散係数の実験値との比較から計算モデルの妥当性を検証し、計算結果の可視化、構造情報の定量化を通じて、酸素の拡散のメカニズム、および拡散に相関していると期待される構造情報を見出した。今回の結果は、アイオノマー中の酸素拡散の計算の高速化、高い拡散係数を示すアイオノマーの設計指針の提

案への端緒となると考えられる。

【謝辞】

本インターンシップの機会をくださったトヨタ自動車 基盤材料技術部に感謝いたします。特に、基盤材料技術部の菅様、久米様、高橋様、石倉様、木村様、他多くの社員の方々には期間中、研究はもちろんのこと生活面でも大変お世話になりました。指導教官である常行先生には、長期にわたり研究室を不在にするにもかかわらず、本インターンシップへの参加を快諾していただいたことを感謝申し上げます。インターンシップ参加へのきっかけを与えてくださった MERTI プログラム、PCoMS にも感謝いたします。