

伝熱および金属中の温度分布を考慮した
水素吸収・放出双方向の一括速度論モデリング
Spatiotemporally Heterothermic Kinetic Model of
Hydrogen Absorption and Desorption in Metals with Heat Transport

西建吾, 打越武, 山崎隼, 中島悠貴, 〇田辺克明
Kengo Nishi, Takeru Uchikoshi, Jun Yamazaki, Yuki Nakashima, 〇Katsuaki Tanabe

京大工 / Kyoto Univ.

緒言

水素吸放出時の吸発熱による金属体の温度変化は、各種見積りの誤差要因となり得る。本研究では、従来の物質収支のみを扱う水素輸送モデルに、熱収支の要素を組み込むことで、より高精度なシミュレータの構築を試みた。

実験方法

水素吸収金属の例としてPd (3 cm × 3 cm × t mm) を用い、窒素雰囲気中で1000 °C、10時間のアニールを施した後、ジューベルツ法によりPd中のH吸蔵量の経時変化を測定した。主容器および参照容器の容積はそれぞれ 1.6×10^3 、 1.0×10^3 cm³、吸収開始圧力は760 Torrであった。

計算方法

表面吸脱着流束、表面-バルク間流束、バルク内拡散流束を表す一連の速度式群[1]から、Pd中のH濃度分布の経時変化を計算した。吸着・脱離エンタルピーおよび伝熱流束からPd中の温度分布の経時変化を算出し、温度依存の速度パラメータ群に反映させ、逐次計算を行った。当日詳細を示す。

結果

異なるPdサイズまた温度域でのPd温度の経時変化および水素吸収・放出曲線の実験値と計算値を図1に示す。このように、同一の速度式群、また、単一の速度パラメータの組から、一括して吸収と放出の両過程、かつ、複数の条件の一連の実験データを良好に再現し、モデルの妥当性が示された。本計算手法により、精度の高いパラメータ群の抽出、シミュレーションが可能となることが期待される。

[1] K. Nishi, T. Uchikoshi, J. Yamazaki, Y. Nakashima, K. Tanabe, *Int. J. Hydrogen Energy* **47**, 22105 (2022).

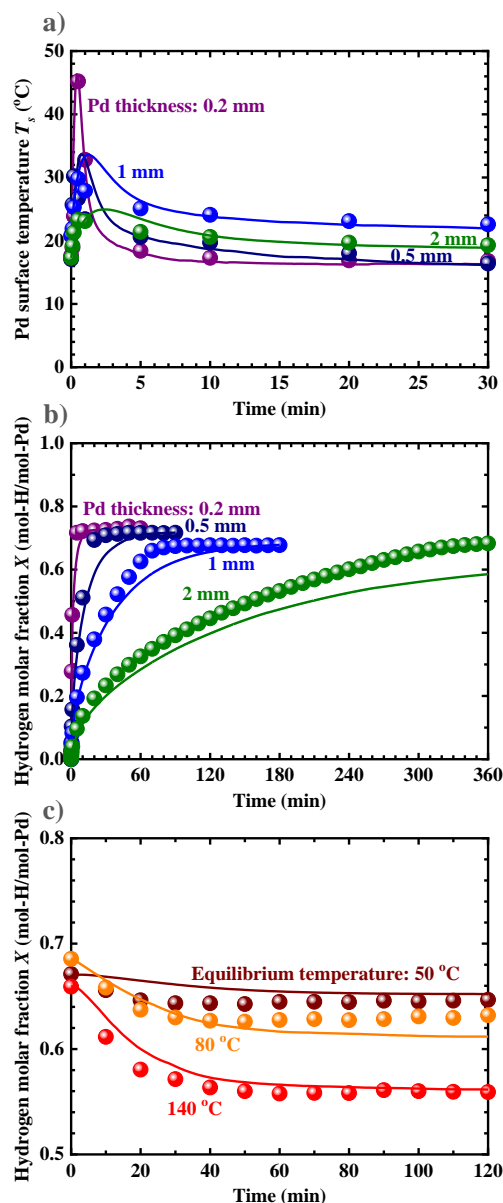


図1. (a)Pd表面温度の経時変化, (b)水素吸収曲線, (c)水素放出曲線 ($t = 1$ mm) (点: 実験値、線: 計算値)