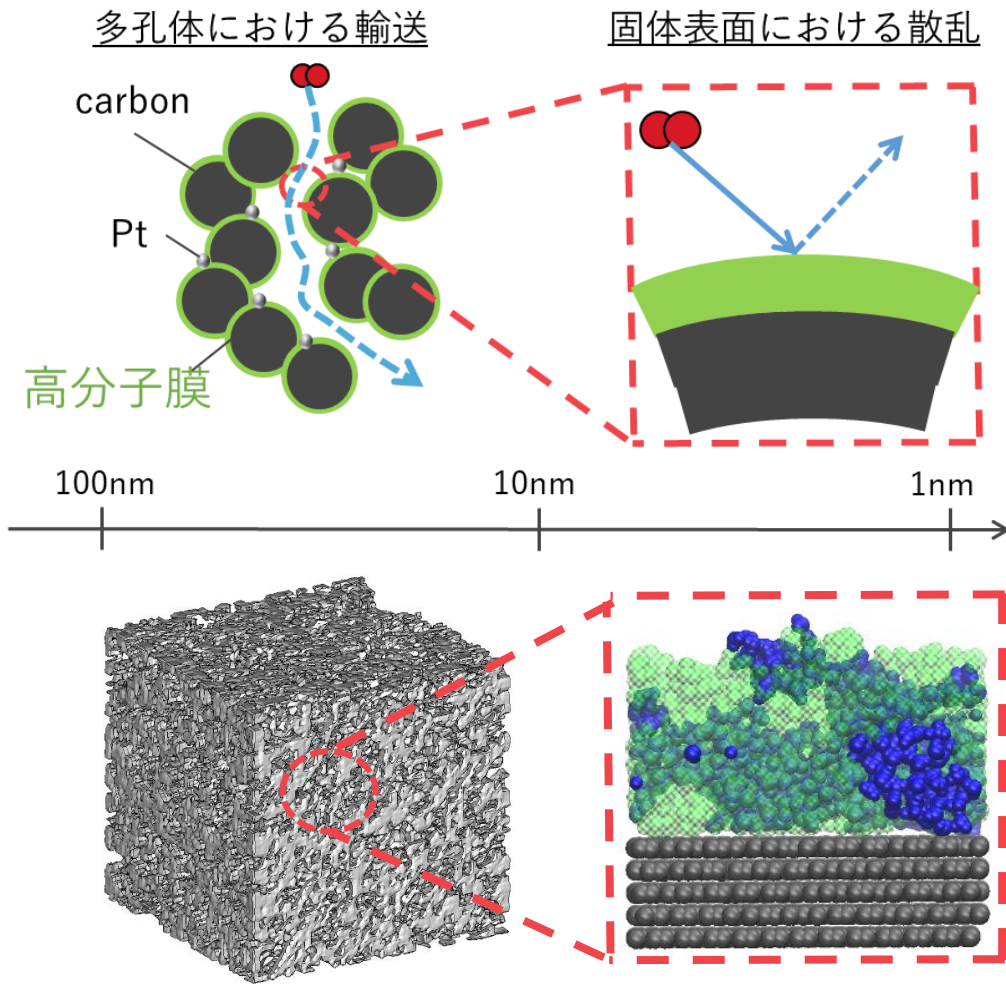


気体分子散乱現象を考慮した触媒層酸素輸送現象の解析



(上) 触媒層における酸素輸送機構の概念図
(下) DSMCおよび分子動力学法による計算系

■ 研究概要

カソード側触媒層は細孔径が数十～百nmとなっており、内部の酸素輸送機構は壁面における気体分子の散乱現象が支配的となるKnudsen拡散となる。触媒層における詳細な酸素輸送メカニズムの解明には、多孔体表面を覆うアイオノマー薄膜における酸素分子の散乱現象からボトムアップしたマルチスケール解析が必要となる。本研究では分子動力学法およびDSMC法を用いて、アイオノマー表面における酸素分子散乱を考慮した酸素輸送解析を行っている。

■ キーワード

Knudsen拡散、面分子干渉、触媒層、分子動力学法、モンテカルロ直接シミュレーション