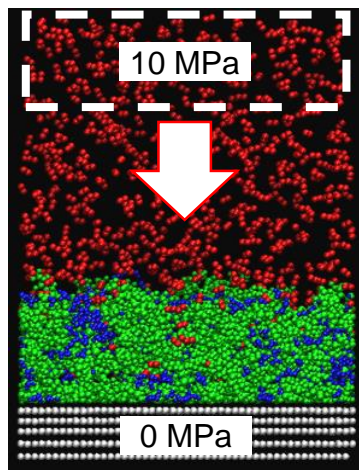
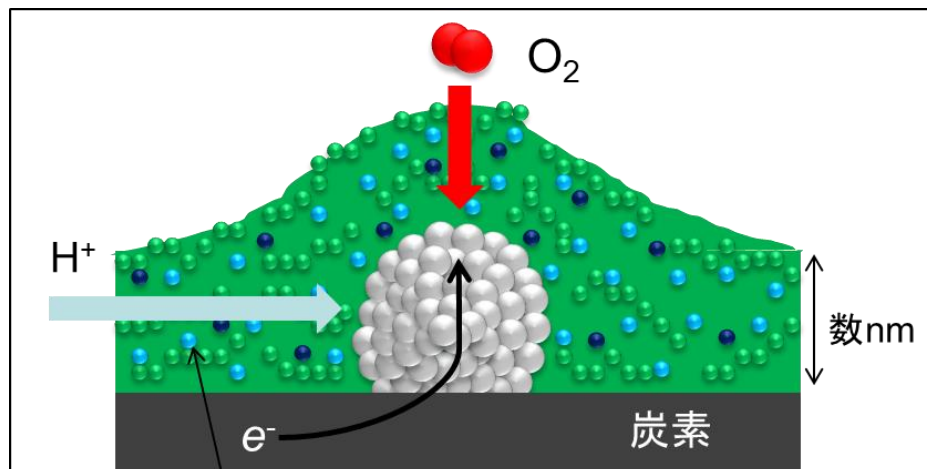


アイオノマー薄膜の酸素透過性に関する分子論的解析



(上) アイオノマー薄膜への酸素透過模式図
(下) 分子動力学法による酸素透過計算系

■ 研究概要

燃料電池の発電効率低下の要因として、触媒層における酸素輸送、特にアイオノマー薄膜における酸素透過性の低さが問題視されています。アイオノマー薄膜は白金担持カーボンを覆う湿潤した高分子薄膜であり、内部の輸送現象は原子・分子レベルでの解析が必要となっている。本研究では分子動力学法を用いて白金表面のアイオノマー薄膜の構造特性と酸素透過性の含水率依存性について解析しており、高酸素透過性を有するアイオノマー薄膜の設計要件を明らかにしている。

■ キーワード

アイオノマー薄膜、酸素透過、分子動力学法、化学ポテンシャル