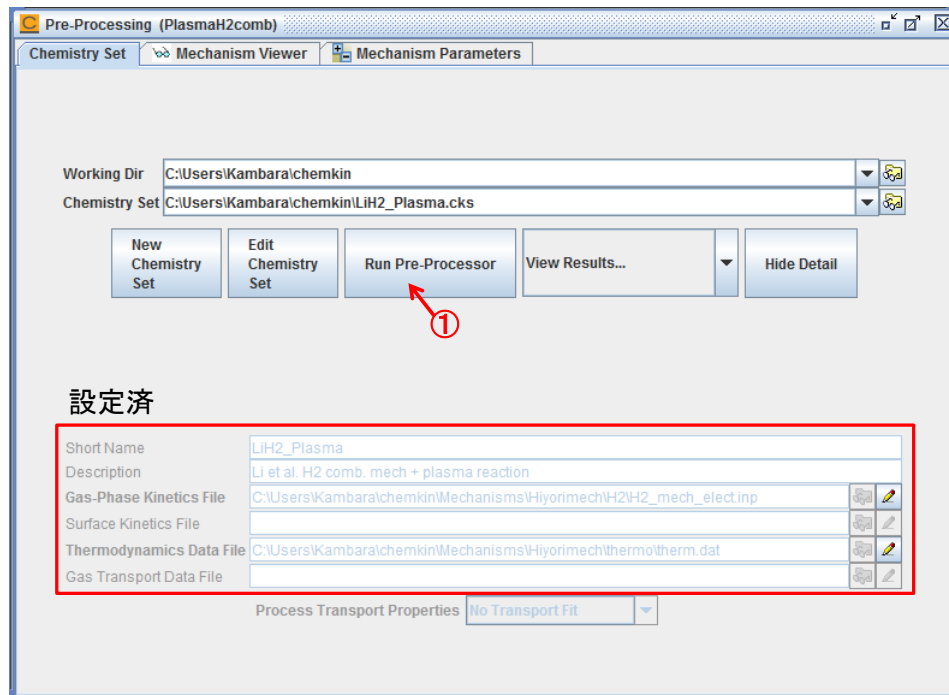


「デジふろ」でダウンロード可能なファイル(詳細化学反応解析支援ソフト  
「CHEMKIN-PRO」による素反応解析データ)について

CHEMKIN-PRO による素反応解析に必要なデータファイルには、

- (1) Gas-Phase Kinetics File (必須)
- (2) Surface Kinetics File (プラズマ反応を考慮する場合に必要)
- (3) Thermodynamics Data File (必須)

がある (下図の囲み部分を参照)。



「デジふろ」でダウンロード可能なファイルは、Gas-Phase Kinetics File については、8 種類の水素酸化反応モデルと 6 種類の NO<sub>x</sub> 生成・還元反応モデルがあり、Surface Kinetics File については、surface reaction.txt がある。

また、Thermodynamics Data File については、thermodata.txt と thermelect.txt があるが、プラズマ反応を考慮する場合、thermelect.txt にある化学種のうち、必要な化学種を thermodata.txt に追加して使用する。

これらのファイルを CHEMKIN に適用する場合、反応モデル (Gas-Phase Kinetics File) については.txt を.inp に、熱力学データファイル (Thermodynamics Data File) については.txt を.dat に変更すると便利である。

本ふろく資料を利用したことによる直接的あるいは間接的な損害に関して、著作者および弊社は一切の責任を負いかねますので、ご了承ください。また、本ふろく資料の著作権は著作者が有しております。

以上