

平成19年 2月27日

氏名 酒井 康行



21世紀COEプログラム

拠点：大学院工学系研究科
応用化学専攻、化学システム工学専攻、
化学生命工学専攻、マテリアル工学専攻

“化学を基盤とするヒューマンマテリアル創成”

平成18年度リサーチ・アシスタント報告書

ふりがな 氏名	さかい やすゆき 酒井 康行	生年月日
所属機関名	東京大学大学院化学システム工学専攻	
所在地	東京都文京区本郷7丁目3番1号	
申請時点での 学年	博士課程2年	
研究題目	トルエン詳細反応機構の構築	
指導教員の所属・氏名	東京大学大学院化学システム工学専攻 越 光男	

I 研究の成果 (1000 字程度)

(図表も含めて分かりやすく記入のこと)

トルエン等の芳香族は高エネルギー密度,高オクタン価といった実用燃料として望ましい特徴を有し、ガソリンや航空燃料などの重要な成分である。またトルエン自体の毒性のみならず、その燃焼過程において Soot 前駆体などの他の有害物質を生成することが知られており、トルエンの酸化過程が非常に関心を集めている。HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition)エンジンのシミュレーション等では 700-2000 K,10-60 atm 程度のモデルが必要となる。そこで本研究では、幅広い温度及び圧力依存考慮したトルエンの酸化過程モデルを構築し、トルエンの自着火過程について解明することを目的とした。

構築した反応モデルで衝撃波管内でのトルエンの着火遅れ時間の計算を行い、実験値と比較した。図 1 に示す。モデルは着火遅れ時間の温度、圧力依存を再現している。ただし高温(1400K 以上)においてはモデルは実験値よりも着火遅れ時間を大きく見積もっている。次にトルエンの自着火過程を解明するために、代表化学種の時間変化を計算した。図 2 に結果を示す。主にトルエンはベンジルラジカルを經由してベンズアルデヒドを生成する。生成したベンズアルデヒドは着火直前に消費され、その後急激な温度上昇が起こり着火に至ることが明らかになった。今後、高温域でのモデル改善のためには、着火のタイミングを決定すると考えられる、ベンズアルデヒドの反応について検討していくことが必要である。

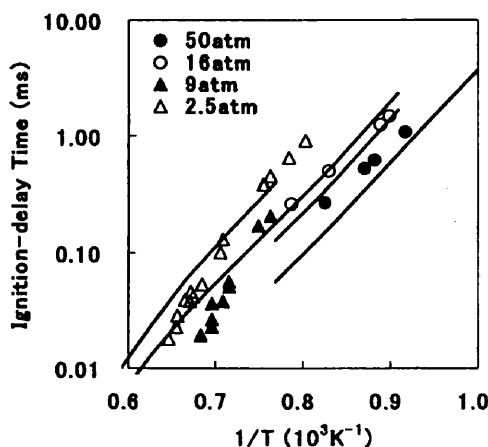


図 1 衝撃波管内でのトルエンの着火遅れ時間(点:実験値、実線:計算値)、トルエン濃度 1.25%、当量比 0.5

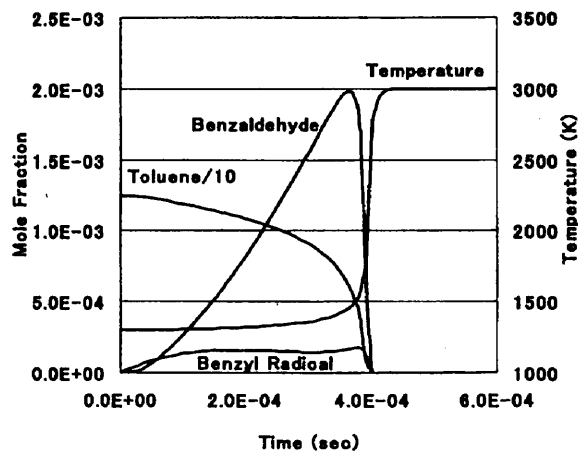


図 2 トルエンの自着火シミュレーション、代表化学種と温度の時間変化

氏 名 酒井 康行

- II (1) 学術雑誌等に発表した論文A (掲載を決定されたものを含む.)
共著の場合、申請者の役割を記載すること。
(著者、題名、掲載誌名、年月、巻号、頁を記入)

氏 名 酒井 康行

II (2) 学会において申請者が口頭発表もしくはポスター発表した論文
(共同研究者 (全員の氏名)、題名、発表した学会名、場所、年月を記載)

Yasuyuki Sakai and Mitsuo Koshi, Detailed kinetic modeling of toluene combustion at high pressure, 4th COE21 International Symposium, the University of Tokyo, October 10-11, 2006

酒井康行、稲村貴慶、小倉鉄平、越光男、トルエン詳細反応機構の構築、第44回燃焼シンポジウム、広島国際会議場、2006年12月6日-8日

Yasuyuki Sakai and Mitsuo Koshi, Detailed Kinetic Modeling of Toluene Combustion, BK21 and COE JOINT SEMINAR IN SEOUL 2006, Seoul National University, December 11-12, 2006