

多環芳香族炭化水素（PAHs）の成長過程

著者	瀬田 孝将
雑誌名	東京大学21世紀COEプログラム 化学を基盤とするヒューマンマテリアル創成 リサーチアシスタント
巻	平成16年度報告書
発行年	2005
URL	http://hdl.handle.net/2261/3868

平成 17 年 2 月 23 日

氏名 瀬田孝将 印

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 16 年度リサーチ・アシスタント報告書

ふりがな 氏名	せた たかまさ 瀬田 孝将	生 年 月 日
所属機関名	東京大学大学院 工学系研究科 化学システム工学専攻 三好研究室	
所在地	113-8656 文京区本郷 7-3-1 東京大学工学部 5 号館 6 階 601 号室	
申請時点での 学 年	博士課程 2 年次	
研 究 題 目	多環芳香族炭化水素(PAHs)の成長過程	
指導教官の所属・氏名	東京大学大学院 工学系研究科 化学システム工学専攻 三好 明 助教授	

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)

芳香族炭化水素の燃焼、PAHs 生成過程の化学反応を理解することは、高効率・クリーンな燃焼技術を開発するために必要不可欠である。本研究では、衝撃波管と LIF を組み合わせた新しい高温化学反応の測定装置の開発を行い、芳香族燃焼において重要な反応を研究する。本年度は、装置の開発及び OH + Aromatics の速度論研究を主に行った。

Figure 1 に測定結果の例を示す。CCD 画像中において、色の濃さが蛍光強度に対応している。蛍光の立ち上がりは HNO₃ の熱分解による OH の生成を示している。その後見られる蛍光強度の減少は、OH + benzene, toluene の反応による OH の減衰である。得られた LIF 強度の時間変化から擬一次反応速度定数を求めた。Figure 2 に二次反応速度定数のアレニウスプロットを示す。

高温領域における反応機構に関して、量子化学計算、遷移状態理論による考察を行った。OH + benzene のエネルギーダイアグラムを Figure 3 に示す。可能な経路は水素原子引抜反応と求電子付加経路の置換反応であるが、水素原子引抜反応でフェニルラジカルを生成する経路が支配的である。OH + toluene は機構が複雑であるが、計算結果から予想される生成物収率は、benzyl > methylphenyls > phenol > cresols となった。

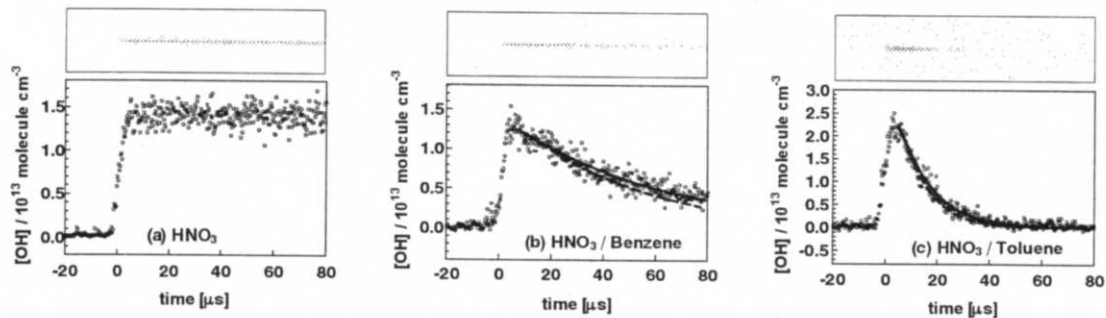


Figure 1. PLIF images and [OH] time profiles observed in HNO₃ / aromatics / Ar mixture.

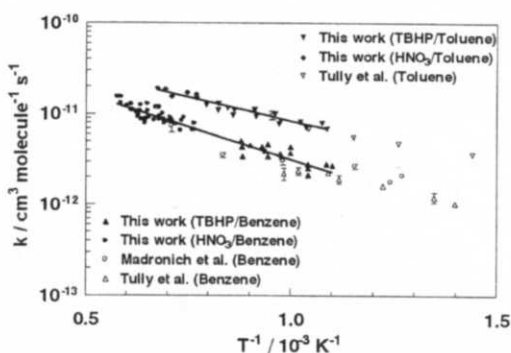


Figure 2. Arrhenius plots for OH + benzene and toluene in the high-temperature region.

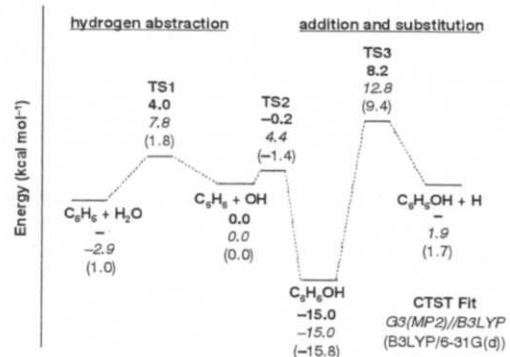


Figure 3. Calculated potential energy diagram for OH + benzene.

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)

1. Takamasa Seta, Masakazu Nakajima, and Akira Miyoshi, "Development of a novel technique for high-temperature chemical kinetics: Shock tube / pulsed laser-induced fluorescence imaging method", Review of Scientific Instruments, submitted

1. 共著者役職

Takamasa Seta : 学生

Masakazu Nakajima : 助手

Akira Miyoshi : 助教授

2. Takamasa Seta, Mitsuo Yamamoto, Masateru Nishioka, and Masayoshi Sadakata, "Structures of Hydrated Oxygen Anion Clusters: DFT Calculations for $\text{O}^-(\text{H}_2\text{O})_n$, $\text{O}_2^-(\text{H}_2\text{O})_n$, and $\text{O}_3^-(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n=0-4$)", Journal of Physical Chemistry A, vol. 107, p962967 (2003).

2. 共著者役職

Takamasa Seta : 学生

Mitsuo Yamamoto : 博士研究員

Masateru Nishioka : 助手

Masayoshi Sadakata : 教授

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)

○瀬田孝将・中島正和・三好明

「衝撃波管/レーザー誘起蛍光法を用いた高温化学反応の測定装置の開発」

第20回化学反応討論会, 東京, 2004

○瀬田孝将・中島正和・三好明

「衝撃波管-レーザー誘起蛍光法による OH ラジカルと芳香族炭化水素の高温
反応過程の研究」

第42回燃焼シンポジウム, 岐阜, 2004