

平成 18 年 2 月 24 日

氏名 瀬田孝将



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17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 3年次	
研究題目	衝撃波管-パルスレーザー誘起蛍光画像法による燃焼化学反応素過程の研究	
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)

炭化水素燃焼において重要な役割を果たす素反応に関して、新規開発された実験手法である衝撃波管-パルスレーザ誘起蛍光画像法により反応速度定数を決定し、その反応機構を理解することを目的として研究を行った。本年度は、前年度から継続してOHラジカルと芳香族炭化水素の反応について研究するとともに、CHラジカルの素反応の研究を行った。

前年度に測定されたOHラジカルと芳香族炭化水素(ベンゼン、トルエン)の反応速度定数に関して、詳細な理論解析を行った。量子化学計算及び遷移状態理論を用いて反応機構について考察し、高温領域では水素引抜反応が主経路であること、実験的に得られた反応速度定数の温度依存性を遷移状態理論で再現するためには、水素引抜反応の遷移状態の振動非調和性を考慮に入れなければならないことを示した(Figure 1)。

また、CHの素反応についても調べた。ジヨードメタンとヨードエタンの混合物を用いることで、三重項メチレンとH原子が反応してCHラジカルが生成することを示し、2000 K以下の温度領域におけるCHラジカルの生成に成功した。このラジカル前駆体を用いて、メチレンと水素原子の反応、CHラジカルとメタンや一酸化窒素の反応の速度定数を決定した。実験結果から、メチレンと水素原子の反応速度定数の温度依存性はほぼ無いということを示した。また、量子化学計算及び統計理論による解析の結果、CHラジカルの σ 結合への挿入反応は負の障壁を持ち、その反応速度を記述するためには長距離相互作用と近距離相互作用の両方を考慮に入れなければならないことを述べ、CHラジカルと水素やメタンの反応速度定数の温度依存性を矛盾なく説明することに成功した(Figure 2)。

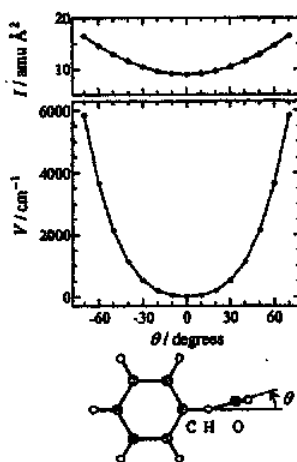


Figure 1. Variation of the potential energy along the C-H-O wagging (α'' -bending) vibration coordinate of the H-abstraction transition-state for OH + benzene.

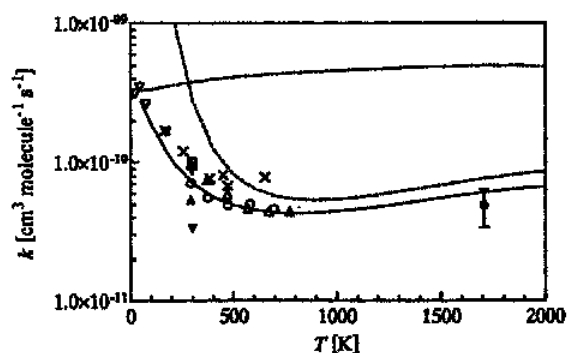


Figure 2. Temperature dependence of the rate constants for $\text{CH}(^2\Pi) + \text{CH}_4 \rightarrow \text{products}$.

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, "High-Temperature Reactions of OH Radicals with Benzene and Toluene", *in revision*

共著者役職 Takamasa Seta : 学生、Masakazu Nakajima : 助手、Akira Miyoshi : 助教授

2. Takamasa Seta, Masakazu Nakajima, and Akira Miyoshi, "Development of a technique for high-temperature chemical kinetics: Shock tube / pulsed laser-induced fluorescence imaging method", *Review of Scientific Instruments*, 76, 064103 (2005)

共著者役職 Takamasa Seta : 学生、Masakazu Nakajima : 助手、Akira Miyoshi : 助教授

3. Takamasa Seta, Mitsuo Yamamoto, Masateru Nishioka, and Masayoshi Sadakata, "Structures of Hydrated Oxygen Anion Clusters: DFT Calculations for $O^-(H_2O)_n$, $O_2^-(H_2O)_n$, and $O_3^-(H_2O)_n$ ($n=0-4$)", *Journal of Physical Chemistry A*, 107, 962-967 (2003)

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)

国際学会発表

Takamasa Seta, Masakazu Nakajima, and Akira Miyoshi, "High-temperature reactions of OH with benzene and toluene: Kinetic studies by shock tube / pulsed laser-induced fluorescence method", 6th *International Conference on Chemical Kinetics*, Gaithersburg, MD, USA (2005)

国内学会発表

瀬田孝将・中島正和・三好明、"CH ラジカルと炭化水素の高温反応"、第 43 回燃焼シンポジウム、東京 (2005)

瀬田孝将・中島正和・三好明、"OH ラジカルとベンゼン・トルエンの高温反応：衝撃波管／レーザー誘起蛍光画像解析法による速度論研究"、第 21 回化学反応討論会、大阪 (2005)

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)

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を用いた高温化学反応の測定装置の開発"、第 41 回燃焼シンポジウム、つくば (2003)