

研究タイトル：

燃焼化学反応の経路・反応速度の解明

氏名：	伏見 凌太 / FUSHIMI Ryota	E-mail：	r.fushimi@hakodate-ct.ac.jp
職名：	助教	学位：	修士(工学)
所属学会・協会：	日本燃焼学会		
キーワード：	燃焼化学, 化学反応論, ラジカル, 反応速度定数		
技術相談	・計算化学を用いた反応探索 ・新規燃料の実用可能性の検討		
提供可能技術：			



研究内容： 燃焼初期着火反応の追跡

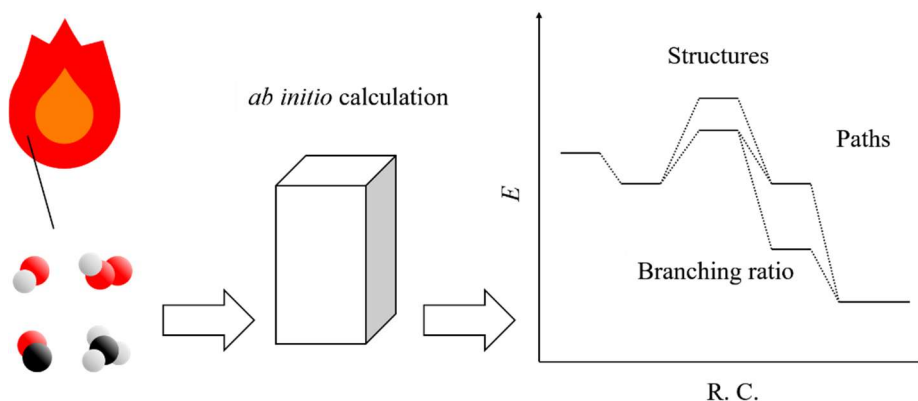
カーボンニュートラル・ゼロエミッション社会の構築が求められる現在、高効率な新規燃焼法や化石燃料に依存しない新規燃料が期待されている。これらのトライアル・アンド・エラーによる模索・開発はコスト・時間的に改良の限界があり、社会実装には、様々な条件下でどのような化学反応が起こり、着火に至るかを理解することが必要不可欠である。

○ 現在、輸送業界で最も広く用いられている炭化水素系燃料の着火では、燃焼反応途中に現れる中間体(ラジカル)の反応性が大きく影響することが分かっている。このうち、分子内に二重結合も持たない燃料(アルカン)の反応性は十分に調査され理解されているが、分子内に二重結合を持つ分子(アルケン)の反応挙動は未だ解明されていない。

本研究では、アルケンの初期反応生成物やその反応速度に着目し、実験的には追跡することができないスケールでの詳細な調査を、量子化学計算を用いて行う。

○ 金属燃料は炭素を含まないカーボンフリー燃料として、特に宇宙開発やロケット推進剤としての応用可能性が期待されている。現在、アルミニウムやマグネシウムがその最有力候補として挙げられているが、その燃焼特性は炭化水素類とは大きく異なり、燃焼初期から最終生成物形成までの統一した見解は得られていない。これらの議論には、数原子程度の酸化物が、どのように反応し凝集に至るのかを理解する必要がある。また、他種金属ではそれぞれ異なる反応経路をたどる可能性が考えられ、金属燃焼反応には依然として不明な点が多い。

本研究では、燃焼初期段階の気相反応から凝集・凝固に至るまでの過程で起こる化学反応および分子の成長に着目し、量子化学計算や分子動力学計算による解析を行う。



提供可能な設備・機器：

名称・型番(メーカー)	