

審査の結果の要旨

氏名 酒井 康行

本論文は「ガソリンサロゲート燃料の燃焼反応モデル構築と応用」と題し、オクタン価決定の際の標準燃料でモデル燃料でもある PRF (Primary Reference Fuel: ノルマルヘプタンとイソオクタンの混合燃料) /トルエンの混合燃料の反応機構の理解と実際のエンジン内の現象への応用を目的として、6章より構成されている。

第1章は序論であり、自動車エンジン内における燃料の燃焼反応化学の重要性と、新規燃料設計のための燃焼反応モデル構築の必要性を述べている。またガソリンのような実燃料の反応を理解する上で重要なサロゲート燃料(実燃料を模擬するモデル燃料)の概念を説明し、サロゲート燃料の反応機構について既往の研究をまとめ、本論文の位置づけと目的を記述している。

第2章は本論文で用いている方法論の説明の章である。まず反応モデル構築の方法論を概説している。構築した反応モデルは衝撃波管や流通式反応管等の燃焼実験結果を用いて検証する必要があるが、これらの実験装置に対する燃焼シミュレーションの方法について述べている。また燃焼反応機構を理解する際に必要な反応経路解析、感度解析の方法についてまとめている。

第3章ではガソリンサロゲート燃料の構成成分であるトルエンの反応機構構築について述べている。トルエン、ベンジルラジカルの重要ないくつかの素反応の速度定数について量子化学計算および単分子反応理論・遷移状態理論を基に詳細な検討を行い、トルエン燃焼の大規模詳細素反応機構を構築している。衝撃波管で測定された着火誘導時間、流通式反応管により測定された反応物および中間生成物のプロファイルと構築した反応機構によるシミュレーション結果とを比較し妥当性を検討している。この反応機構は温度 800–2000 K、圧力 1–50 atm の範囲で実験値を再現することができ、エンジン内燃焼に適用可能な反応機構であることを確認し、反応経路解析、感度解析を行いトルエンの着火反応機構について考察している。特にエンジン内着火で重要な温度圧力領域ではベンジルラジカルと酸素分子の反応が着火を決める重要な素反応であることを明らかにし、従来の研究では解明されていなかったトルエンの低温領域(1000K以下)での反応性について新たな知見を得ている。

第4章では PRF とトルエンの三成分混合燃料の反応機構を構築している。PRF/トルエンの混合燃料はガソリンのサロゲート燃料として重要である。前章で構築したトルエンの反応機構と既存の PRF 反応機構を組み合わせ、PRF/トルエン混合燃料の反応モデルを構築し、衝撃波管を用いて測定した着火誘導時間との比較から反応機構の検証を行っている。また衝撃波管実験からイソオクタンにトルエンを添加することにより着火が促進される領域があることを示し、この原因として PRF から生成するアルケンとトル

エンから生成するベンジルラジカルとの交差反応が考えられるとしている。このような燃料成分間の交差反応については様々な議論がなされているところであるが、本論文によって実験的に具体的な交差反応が示された意義は大きく、今後ガソリンサロゲートなどの混合燃料の燃焼反応機構を理解する上で重要である。

第 5 章では反応機構を用いた解析のエンジン内現象への応用が述べられている。ガソリンエンジンで重要なオクタン価、噴霧燃焼の着火誘導時間について、実測と詳細反応機構を用いたシミュレーションの結果を比較している。エンジン燃焼の自着火における限界圧縮比を熱損失等の物理現象を考慮した反応シミュレーションにより求め、これを用いてオクタン価を推定する方法を提案している。実験により PRF 燃料にトルエン添加を添加するとオクタン価が向上することが知られているが、このオクタン価向上効果はここで開発した方法により予測できることを示している。さらに PRF/トルエンのベース燃料に ETBE(Ethyl-*tert*-Butyl-Ether)とエタノールを混合した燃料の着火特性についても検討し、実験的に見出されている ETBE およびエタノールのオクタン価向上効果を反応論の立場から説明することに成功している。

第 6 章は結論の章であり、構築したガソリンサロゲート燃料の反応機構に関して主要反応経路を総括している。また詳細反応機構に基づく解析が新規自動車燃料や新しいコンセプトのエンジンの開発の手段として有効であると論じている。

以上、本論文では PRF/トルエンのガソリンサロゲート燃料の燃焼反応機構を構築し、オクタン価や着火誘導時間のシミュレーションへの応用を試み、エンジン内の燃焼を反応論的な観点から考察して新しい知見を得ていて、燃焼化学および化学システム工学の発展に資するところ大である。

よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。