

自己評価報告書

平成 23 年 4 月 25 日現在

機関番号：32621

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2008～2011

課題番号：20560201

研究課題名（和文） 高圧衝撃波管を用いた HCCI 燃焼反応機構の構築

研究課題名（英文） CONSTRUCTION OF REACTION MECHANISM FOR HCCI COMBUSTION USING HIGH-PRESSURE SHOCK TUBE

研究代表者

高橋 和夫 (TAKAHASHI KAZUO)

上智大学・理工学部・准教授

研究者番号：10241019

研究分野：燃焼化学，反応化学，物理化学，計算化学

科研費の分科・細目：機械工学・熱工学

キーワード：HCCI 燃焼，衝撃波管，着火特性，着火誘導期，燃焼反応機構，
ヘプタン，イソオクタン，トルエン

1. 研究計画の概要

(1) 低燃費と低公害を両立させた環境調和型の次世代自動車エンジンとして，予混合圧縮着火（HCCI）燃焼が注目されている．しかし，HCCI エンジンでは自着火現象を利用するため，着火時期の制御が困難であることが，実用化を妨げる最大の課題となっている．この課題を克服するためには，エンジン内の着火時期を広い温度・圧力・濃度範囲で予測できる反応モデルの構築が不可欠である．

(2) あらゆる HCCI 運転条件で着火を予測できる包括的な反応モデルを構築するには，高圧での炭化水素燃料の自着火特性を調べる必要がある．そのための装置として，急速圧縮機（Rapid Compression Machine, RCM）が古くから存在するが，反応部の温度は空間的・時間的に均一ではないため，正確なデータは得られない．

(3) そこで本研究では，瞬時に加熱・冷却が可能で，温度が均一で見積もりが極めて正確な衝撃波管を用いる．しかし，通常の化学衝撃波管は大気圧付近を対象実験条件としているが，本研究では HCCI 燃焼条件に合わせて耐圧 100 気圧の高圧衝撃波管を新たに製作する．また，高圧部の長さを延長することにより，長い加熱持続時間の獲得を目指す．

(4) 以上の高圧衝撃波管を用いて，ガソリン燃料成分である炭化水素の高圧における着火特性を評価する．定量的尺度として着火誘導期を測定し，提唱した詳細反応モデルを用いて着火誘導期のシミュレーション計算を行い，実験結果と比較・検討する．

(5) 幅広い温度，圧力，濃度範囲において，実験と計算の比較・検討を繰り返し行うことにより，反応モデルの最適化を図る．反応モ

デルにおいて，鍵を握る反応経路および速度データに関しては，時間分解分光法あるいは生成物分析によって実験的に解明・決定する．また，現在の実験技術では追跡することのできない反応経路および速度データは，非経験的分子軌道法を用いた量子化学計算により，理論的に研究・解明する．

(6) 以上のようにして，ガソリン成分である代表的な炭化水素の着火について，15～60 気圧の HCCI 燃焼条件下で適用可能な包括的な燃焼反応モデルの構築を目指す．

2. 研究の進捗状況

(1) 高圧化学衝撃波管の製作

まず最初に，耐圧 100 気圧の高圧衝撃波管を新たに製作した．1000K 以下の低温で起こる HCCI 着火反応を追跡するために，衝撃波の全長を長くして 5ms 程度の加熱持続時間を確保することに成功した．

(2) 炭化水素燃料の高圧着火特性の

実験的評価と反応モデルの構築

高圧衝撃波管を用いて，ガソリンの主成分であるヘプタン，イソオクタン及びトルエンの着火誘導期を測定した．さらに，既存の反応モデルを用いてシミュレーション計算を行い，実験結果と比較・検討した．その結果，既存の反応モデルは低圧では実験結果をよく再現できたものの，高圧では実測の着火時期を過大評価してしまった．その後，各種反応モデルの改良を行った結果，ヘプタンおよびイソオクタンについては広い温度・圧力・濃度範囲で実測値を再現することに成功したものの，トルエン着火については実測を十分に再現するには至らなかった．そこで，現在トルエン着火を支配する重要な素反応速度

データの妥当性を実験的・理論的に検討し、ミクロな観点より反応モデルの改良を行っている最中である。

3. 現在までの達成度

②当初の計画どおり、順調に進んでいる。

(理由) ガソリンの代表的成分であるヘプタン、イソオクタン、トルエンのうち、ヘプタンおよびオクタンの包括的反応モデルの構築はほぼ達成できたため。

4. 今後の研究の推進方策

『研究の進捗状況』で述べたように、トルエン着火を再現できる包括反応モデル構築のため、現在重要な素反応速度データの妥当性を実験的・理論的に検討し、ミクロな観点より反応モデルの改良を行っている。具体的には、トルエン燃焼の初期過程で重要なH原子やO原子と素反応について、レーザー光分解-原子共鳴吸収-衝撃波管法を用いて追跡し、その速度定数を決定するとともに、分子軌道計算を行って妥当性を評価する。また、トルエンが開環する反応過程についても不確定部分が多いので、この経路について素反応の観点から実験的・理論的検討を行い、最終的にトルエン着火の解明を目指す。

5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計6件)

- ① Nobuhiko Kuze et al., Molecular structure of (E)-benzaldehyde oxime from gas-phase electron diffraction, quantum-chemical calculations and microwave spectroscopy., *Journal of Molecular Structure*, 987, 195-200 (2010) 査読有
- ② Nobuhiko Kuze et al., Microwave spectra, inversion splittings and quadrupole coupling constants of NHDCl and ND_2Cl ., *Journal of Molecular Spectroscopy*, 253, 77-87 (2009) 査読有
- ③ Nobuhiko Kuze et al., Microwave spectra, molecular structure and theoretical calculation of two isotopic species of acetyl isocyanate $\text{CD}_3\text{C}(\text{O})\text{NCO}$ and $^{13}\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{NCO}$., *Journal of Molecular Spectroscopy*, 256, 163-168 (2009) 査読有
- ④ Nobuhiko Kuze et al., Microwave spectra, molecular structures, and theoretical

calculations of (E)-sp and (E)-ac isomers of 2-methylpropanal oxime., *Journal of Molecular Structure*, 876, 186-193 (2008) 査読有

- ⑤ Nobuhiko Kuze et al., Laboratory detection of a linear carbon chain alcohol: HC_4OH and its deuterated species., *Astrophysical Journal*, 680, L93-L96 (2008) 査読有

[学会発表] (計16件)

- ① 高橋和夫 他, 衝撃波管を用いた芳香族炭化水素燃焼の速度論的研究-キシレンと酸素原子との高温反応-, 平成22年度衝撃波シンポジウム, 2011年3月17日, 青山学院大学(相模原)
- ② 高橋和夫 他, 高圧衝撃波管を用いたガソリン燃料成分の着火研究-着火誘導期の圧力依存性-, 第48回燃焼シンポジウム, 2010年12月1日, 福岡ガーデンパレス&都久志会館(福岡)
- ③ 高橋和夫 他, 高圧衝撃波管を用いたガソリン燃料成分の着火特性-着火誘導期と着火反応機構の当量比依存性-, 第47回燃焼シンポジウム, 2009年12月4日, 札幌コンベンションセンター(札幌)
- ④ Kazuo Takahashi et al., Shock-tube studies on the reactions of some aromatic compounds with chain carriers in combustion., 27th International Symposium on Shock Waves, July 21, 2009, St. Petersburg, Russia
- ⑤ 高橋和夫 他, 高圧衝撃波管を用いたガソリンサロゲート燃料の着火研究-着火遅れと着火反応機構の圧力依存性-, 平成20年度衝撃波シンポジウム, 2009年3月19日, 名古屋大学(名古屋)
- ⑥ 高橋和夫 他, 高圧におけるガソリン燃料成分の着火特性と反応モデル解析, 第46回燃焼シンポジウム, 2008年12月4日, 京都テルサ(京都)

[その他]

なし