



燃焼からの多環芳香族および粒子状物質生成機構の解明

目標

- 小目標(9)-1 : 非芳香族燃料の燃焼による単環および二環芳香族炭化水素の生成反応過程の解明
- 小目標(9)-2 : 芳香族燃焼による単環から三・四環芳香族炭化水素への成長反応機構の解明
- 小目標(9)-3 : 単環~四環多環芳香族炭化水素(PAH)の酸化反応と成長機構の相互作用の解明
- 小目標(9)-4 : 脂肪族芳香族混合燃料の燃焼による四環までのPAHの生成・酸化反応機構の開発
- 小目標(9)-最終 : 粒子成長・酸化モデルとの連携によるすすの生成酸化反応モデルの開発

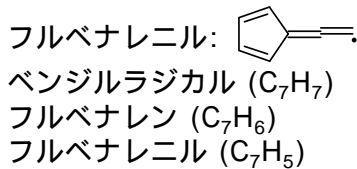
手法

- 量子化学計算と速度論モデリング

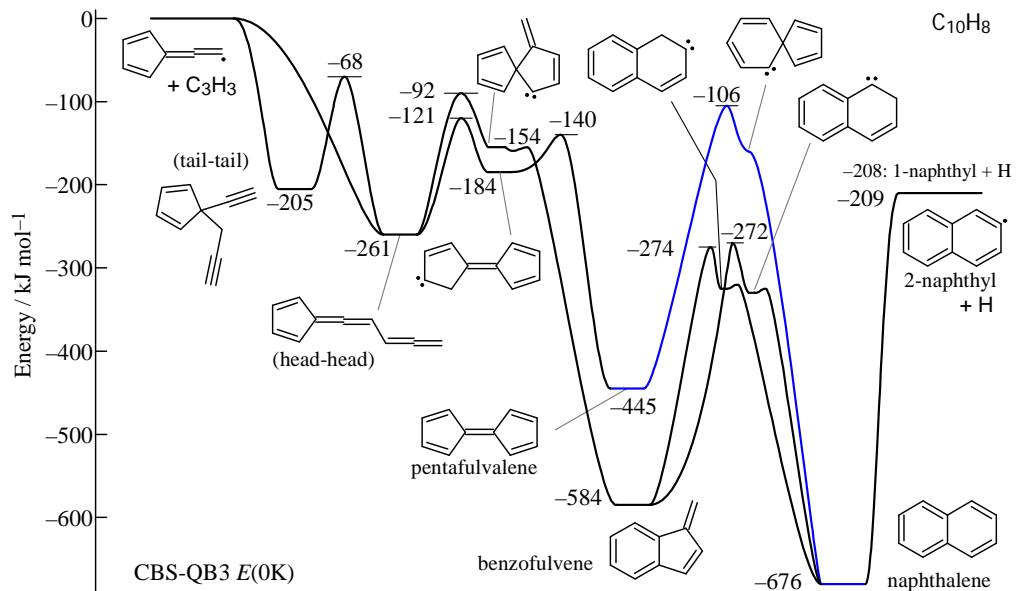
進捗

二環芳香族生成

- フルベナレニル (C_7H_5) + プロパルギル (C_3H_3)
ナフタレン ($C_{10}H_8$)



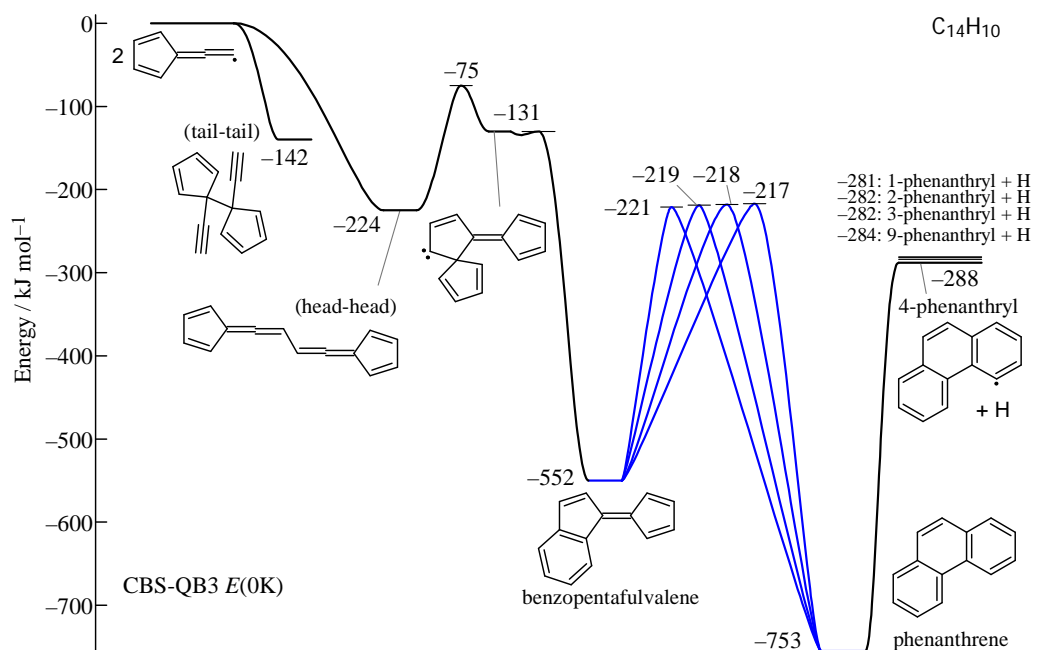
Stone-Wales 転移



三環芳香族生成

- フルベナレニル (C_7H_5) + フルベナレニル (C_7H_5)
フェナントレン ($C_{14}H_{10}$)

Stone-Wales 転移
プロパルギル/フルベナレニル
型PAH成長に共通



今後

- 多環芳香族生成・成長過程の体系化と速度則構築