

論文審査の要旨

博士の専攻分野の名称	博 士 (工 学)	氏名	SET NAING
学位授与の要件	学位規則第4条第1・2項該当		
論 文 題 目			
Development of Numerical Model for Washcoated Honeycomb Monolith Catalyst based on Surface and Gaseous Species Measurements (気相・表面化学種計測に基づくウォッシュコートハニカムモノリス触媒の数値モデル開発)			
論文審査担当者			
主 査	准教授	下栗 大右	印
審査委員	教 授	三好 明	印
審査委員	教 授	西田 恵哉	印
審査委員	教 授	市川 貴之	印
審査委員	准教授	尾形 陽一	印
〔論文審査の要旨〕			
<p>自動車に対する排気ガス規制は厳格化の一途をたどり、触媒の利用は不可欠であるといえる。一方で、自動車の運転条件、触媒に流入するガス条件は変化し続けており、環境汚染物質を触媒によって効率的に除去するためには、最適な触媒組成（貴金属量・割合）を探索しなくてはならない。ほぼ無限と言える触媒の組み合わせの中から最適な組み合わせを探索する手法として、数値シミュレーションは強力なツールであると言えるが、現状、自動車用触媒の数値シミュレーションは実用利用に耐え無い。そこで本研究では、実用利用に耐えうる数値計算手法の確立を目的とし、規制対象ガスの中でも浄化が困難とされる未燃炭化水素に注目し、その代表成分である C_2H_4 と C_3H_6 の表面反応機構を構築する事を目的とする。</p> <p>第一章では研究背景が述べられている。近年の排出ガス規制、それに対する触媒の機能を説明している。さらに最近の触媒の数値シミュレーションについて文献を引用しつつ、本研究の独創的な点を述べている。</p> <p>第二章では、本研究で用いた実験装置が記述されている。本研究では、一般的に未燃炭化水素の浄化に優位性のある Pt を対象としており、さらに、実用で用いられるハニカムモノリス状の触媒を使用している。独創的な点として、気相成分と表面化学種の両方を測定し、数値計算結果の検証に利用している。</p> <p>第3章では本研究で構築した表面反応機構が詳細に記述されている。既往の量子科学計算による研究で、C_2H_4 と C_3H_6 では、その熱分解過程において Pt の複数サイトを占有することが数値的に示されていることから、本研究では、表面反応機構において、C_2H_4 および C_3H_6 の中間体が最大で3サイトを占有する反応経路が組み込まれている。さらに、全ての素反応の反応速度定数は Thermally consistent に決定されている。</p>			

第4章では、数値計算モデルが記述されている。実験に用いたハニカムモノリス触媒を再現しつつ、計算負荷の低い1+1Dモデルによってウォッシュコートされたハニカムモノリス触媒がモデル化されており、ウォッシュコート層内での多孔質拡散も考慮されたモデルが使用されている。

第5章では数値計算の検証が記述されている。表面反応機構は C_2H_4 と C_3H_6 それぞれ個別に構築された物であるが、その汎用性を確認するため、 $C_2H_4/C_3H_6/O_2$ 混合ガス、さらには $C_2H_4/C_3H_6/CO/O_2$ 混合ガスについて、数値計算と実験の結果が比較され、今回開発されたモデルによって、4種混合ガスにおいても様々なガス濃度に対し、実験結果を数値計算によって精度良く再現可能であることが示されている。

第6章では結論が記述されている。本研究で開発された詳細反応機構は高精度で実験結果を再現可能で、従来、自動車用触媒に用いられる総括反応機構に比べて計算可能な条件が飛躍的に拡大している。今後、あらゆるガス種・触媒貴金属に対して同様の手段が有効であることが期待される。

本研究は、学術的観点では触媒の高精度数値計算を広範囲に実現した革新的研究であり、実用的にも今後の環境負荷低減に重要な役割を担うと期待される。よって本論文の著者は博士（工学）の学位を授与されるに十分な資格を有する者であると認める。