



Kyushu University
Institute for Materials Chemistry and Engineering

九州大学
先導物質化学研究所

30.11.2009

先導物質化学研究所講演会
『高効率炭素資源変換に向けた反応場設計および触媒反応工学の新展開』

日時: 12月7(月) 15:00~18:00

場所: 九州大学先導物質化学研究所・筑紫地区 先導物質化学研究所 1階 111号室

http://www.cm.kyushu-u.ac.jp/?page_id=1057

主催: 九州大学先導物質化学研究所

協賛: 九州大学 GCOE 新炭素資源学, 持続工学研究会



プログラム

15:00~15:50

佐藤 剛史 先生 (宇都宮大学大学院工学研究科 物質環境化学専攻)

「超臨界水中でのラジカル反応ネットワークシミュレーションの現状」

超臨界水中では、温度と圧力の操作により溶媒物性が変化し、酸化反応や部分酸化反応の速度・生成物分布が変化する。その現象の解析に、CHEMKIN 等を用いたラジカル素反応モデルによるシミュレーションが適用されている。本講演では、超臨界水中での上記シミュレーションの現状を紹介しつつ、気相と超臨界相の反応解析の相違などについての議論を深める。

15:50~16:40

渡邊 賢 先生 (東北大学大学院工学研究科 附属超臨界溶媒工学研究センター)

「イオン反応および表面反応を考慮した素反応モデル構築の必要性」

高温高圧水やイオン液体などの高誘電率・高イオン濃度環境における化学反応は、特にバイオマス資源変換に有用であるとし、実験化学的手法で精力的に研究がなされている。またこれらの反応系では、連続操作を志向した固体触媒の利用も精力的に実施されている。しかしながら、今後、反応を理論的に解明し、さらに未知の反応を予測するためには、マクロ的な実験化学的手法に加え、ミクロな視点から解析する素反応モデルの構築が重要となる。こうした重要性について、実験化学的手法による反応の理解および予測の限界を述べ、今後どのような展開が必要かについて開発要素やその課題などを提起する。

16:40~17:30

小倉 鉄平 先生 (九州大学 稲盛フロンティア研究センター)

「密度汎関数法を用いた網羅的触媒反応機構解析～構造決定から反応シミュレーションまで～」

炭素資源変換の高効率化を目指す上で律速過程、支配的反應経路など反應機構を理解することが重要である。本講演では最も簡単な変換技術であるメタン水蒸気改質を中心に、密度汎関数法に基づく表面反應機構解析及び新規触媒設計に向けた取り組みに関して話題提供する。

17:30~18:00

総合討論

問い合わせ先

林潤一郎・則永行庸 九州大学先導物質化学研究所

〒816-8580 福岡県春日市春日公園 6-1

TEL: 092-583-7793 FAX: 092-583-7796

email: norinaga@cm.kyushu-u.ac.jp