

爆発・燃焼を化学する

詳細反応モデリングからリスクアセスメント

横浜国立大学 大学院環境情報研究院

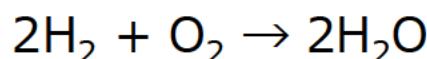
助教

伊里 友一朗

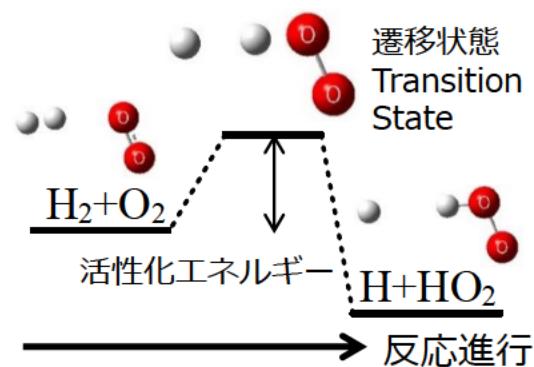
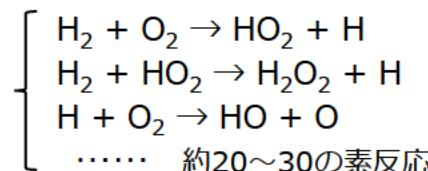
化学反応の最小単位[素反応]

中学校で習った水素の燃焼を思い出してみよう。水素、酸素、マッチでポン！水ができる。化学式では $2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$ だ。しかし、この反応(2つの H_2 分子と1つの O_2 分子が同時に衝突し、2つの H_2O 分子ができる)は、現実にはほとんど起こらない。実際の反応は、 H_2 分子と O_2 分子と出会うと、 H_2 分子のH-H結合が切れて、 O_2 分子との間に新たにH-O₂結合ができるところから始まる(右図、 $\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{H} + \text{HO}_2$)。この様に化学反応の過程を示す、化学結合の組み換え反応の最小単位を素反応(そはんのう)と呼ぶ。水素の燃焼をはじめ、化学反応はこの素反応たちが複雑に絡み合って進行する。この素反応に関する理解が深まれば、たとえ危険な化学反応であっても制御して、利用することができるはずだ。

全体でみると



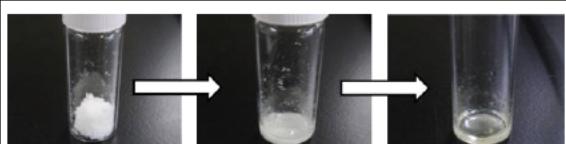
細かく分けてみると



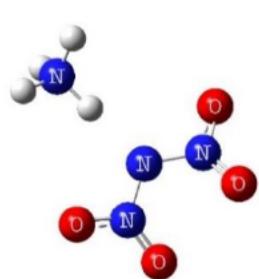
図：水素-酸素の燃焼反応

単純な反応も実は複雑に反応が絡み合っている

爆発・燃焼反応を制御して有効利用/安全化



固体推進剤と適切な固体可燃剤だけを混ぜるだけで(イオン)液体化させる

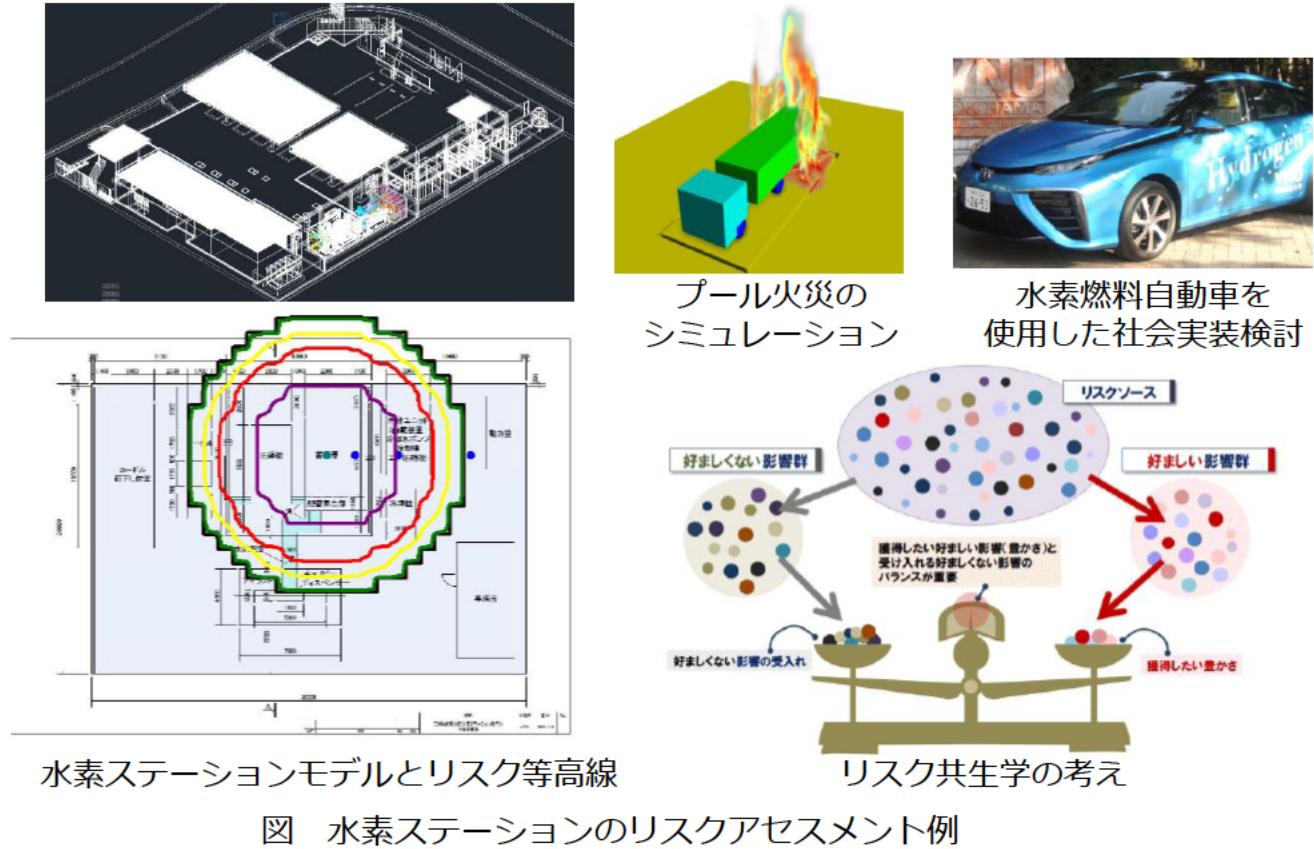


高エネルギー物質例
アンモニウムジントラミドの分子構造



写真：宇宙機推進剤用イオン液体の開発(JAXAとの共同研究)

我々の研究目的の一つは、高エネルギー物質(火薬・爆薬など)の燃焼/爆発現象や有用ではあるが危険を伴う化学反応について、素反応レベルでメカニズムを理解し、制御することである。左は新規宇宙機用推進剤の燃焼制御に関する研究例である。地球から遠く離れた深宇宙の探査など過酷な宇宙ミッション要求に応えるため、より高性能かつ高安全な液体推進剤が必要であった。我々は、固体であった高エネルギー物質に適切な物質を添加することで、高エネルギーを保持したまま安全に取り扱えるイオン液体を作成した。一般的にイオン液体は燃えないと思われているが、我々が作成したイオン液体推進剤は必要なときに着火・燃焼させることができる。



ミクロの現象理解からマクロの意思決定を支援

我々の研究対象はミクロスケールの化学反応から、マクロスケールにおける工学システムの安全にまで及ぶ。上図は、我々が実施した水素ステーション(水素ST)のリスクアセスメントに関する研究イメージである。水素社会実現に向けて、日本各地に水素燃料自動車用の水素ST設置が加速している。上図は、水素等の可燃性物質の火災・爆発事故による影響が、どのように市街地へ及ぶのかをシミュレーションし、そのリスク(影響とその発生可能性の組合せ)を計算し、安全対策の有効性を議論した例である。このようなアセスメントを実施することで、水素STの設計や規制適正化に貢献してきた。さらにはリスク共生学という新しい(文理融合の)学問体系に基づき、リスクベースで合理的な意思決定や対話を支援する仕組みづくりに関する研究も行っている。

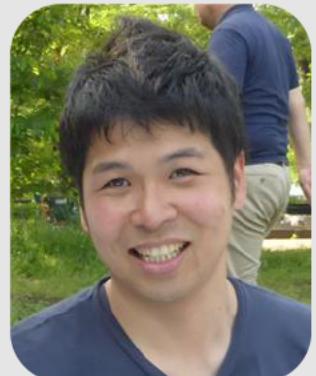
この研究に取り組んでいるのは

伊里 友一朗(いざと ゆういちろう)

横浜国立大学 理工部／大学院 環境情報研究院 助教

横浜国立大学 環境情報研究院 博士後期課程修了。博士（工学）。総合化学メーカーにてエンジニアとして勤務していたが、脱サラして進学し、以降は学究の道へ。

研究室URL : <http://www.miyake-lab.ynu.ac.jp/>

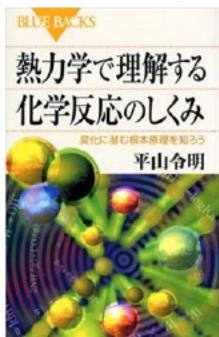


本棚

参考図書のご紹介

高校生向け書籍

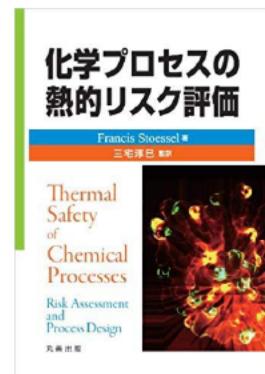
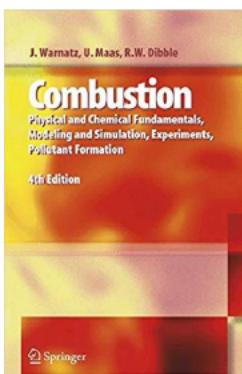
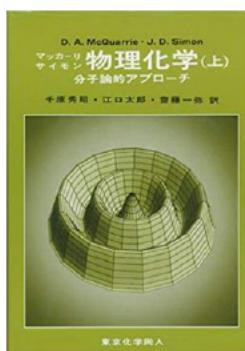
ミクロ ← → マクロ



平山令明, 熱力学で理解する化学反応のしくみ, ブルーバックス
 松永猛裕, 火薬のはなし, ブルーバックス
 村上道夫他, 基準値のからくり, ブルーバックス
 野口和彦, リスク三十六景, 日本規格協会

より詳しく知りたい人は（専門向け）

ミクロ ← → マクロ



千原秀昭他 訳, マッカーリー・サイモン物理化学, 東京化学同人
 J. Warnatz, U. Maas, and R.W. Eibble, Combustion, Springer
 三宅淳巳 監訳, 化学プロセスの熱的リスク評価, 丸善
 横浜国立大学先端科学高等研究院, リスク共生学, 丸善

最近の論文

- 1) Y. Izato and A. Miyake, Detailed kinetic model for ammonium dinitramide decomposition, *Combustion and Flame* 198, 222-229 (2018)
- 2) C. Inoue, Y. Izato, A. Miyake, and E. Villermaux, Direct self-sustained fragmentation cascade of reactive droplets, *Physical review letters* 118 (7), 074502 (2017)