

## O105

詳細化学反応機構を考慮したベンゼン熱分解による  
すすの核粒子生成に関する数値解析的検討

(東北大院工) ○(学)田中 翔\*(学)渡邊 圭介(正)庄子 正和・  
(正)松下 洋介(正)青木 秀之(正)三浦 隆利

【緒言】すす(浮遊粒子状炭素物質)は燃焼装置における不完全燃焼により生成する環境汚染物質である。すすの抑制のため生成機構の解明が望まれているが、数十 ms の短時間で発生するため実験的検討は困難である。本研究では、ベンゼン熱分解プロセスを対象に粒子成長モデルに詳細化学反応機構を考慮した解析を行い、妥当性を検討した。また、詳細化学反応機構を用いて含酸素化学種存在下におけるすすの核生成挙動を解析した。

## 【解析モデル】

**粒子成長モデル** Ivie and Forney の提案するベンゼン熱分解による C<sub>14</sub> 核生成モデルとアセチレン付加による一次粒子成長モデル[1]を用いた。さらに、一次粒子の凝集には DSM (Discrete Sectional Model) [2]を用いた。

**詳細化学反応機構** Wang and Frenklach の提案した 99 種の化学種、527 本の素反応からなるピレン生成までの詳細化学反応機構[3]を用いた。

【数値解析】山本らが行ったベンゼン熱分解プロセス[2]の実験条件を解析対象とした。原料ガスには窒素で希釈したベンゼンを用い、流通式反応器内において熱分解することで、すすを生成した。原料ガス中におけるベンゼン濃度は 1.0 vol% とした。Fig. 1 にベンゼン熱分解プロセスにおける温度分布の測定結果を示す。上記の実験条件を対象に、粒子成長モデルに詳細化学反応機構を考慮して、一次粒子の成長挙動を解析した。また、すすの核生成に関し、詳細化学反応機構を用いて含酸素化学種を考慮した解析を行った。このとき、酸素 1.0-3.0 vol%、水蒸気 1.0 vol% を添加した条件を対象に、すすの核粒子をピレンと仮定してその生成速度を比較した。

【結果と考察】Fig. 2 に反応器出口におけるすすの一次粒子径分布の解析結果および実験結果を示す。これより、粒子成長モデルに詳細化学反応機構を考慮した場合、解析結果における分布のピークが実験結果に近づくことがわかる。これは、微細粒子の成長が促進されたためであると考えられ、詳細化学反応機構の考慮が妥当である可能性が示唆された。しかしながら、粒径の大きい領域の粒子数を過剰に見積もった。これは DSM において、粒子の衝突によって必ず凝集すると仮定していることが主な原因であると考えられ、粒径依存の衝突効率モデルなどを適用することで、より妥当な解析が可能になると考えられる。また、Fig. 3 に核粒子と仮定したピレンの生成速度を解析した結果を示す。これより、酸素濃度が増加するにつれて核粒子の生成量が増加していることがわかる。これは、酸素存在下においてベンゼン分解に関係す

る反応経路が増加し、PAH (Polycyclic Aromatic Hydrocarbons) 成長に重要なアセチレン濃度が増加したため、核粒子が増加したと考えられる。

【記号】 $d_p$  : 粒子径 [nm],  $X$  : 粒子個数頻度 [%]

## 【参考文献】

- [1] J. J. Ivie and L. J. Forney, *AIChE Journal*, **34**, pp. 1813-1820 (1988)
- [2] 山本ら, *化学工学論文集*, **30**, pp. 36-42 (2004)
- [3] H. Wang and M. Frenklach, *Combustion and Flame*, **110**, pp. 173-221 (1997)

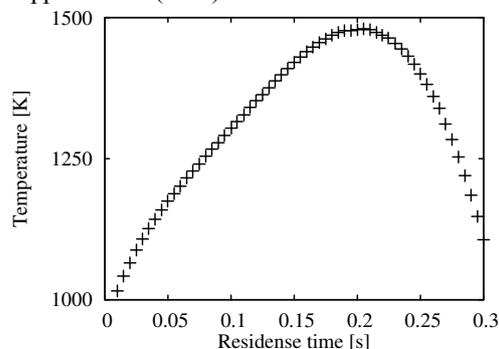


Fig. 1 Temperature profile

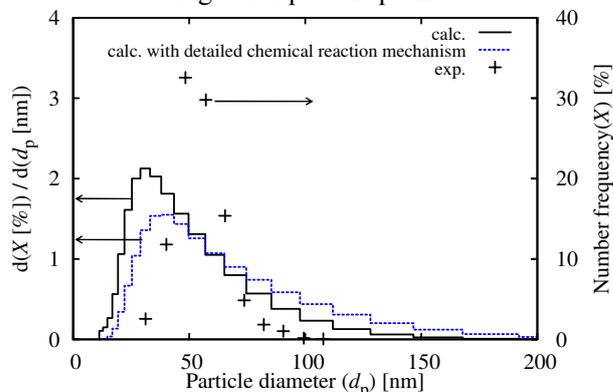


Fig. 2 Calculated and experimental result of primary soot particle number frequency

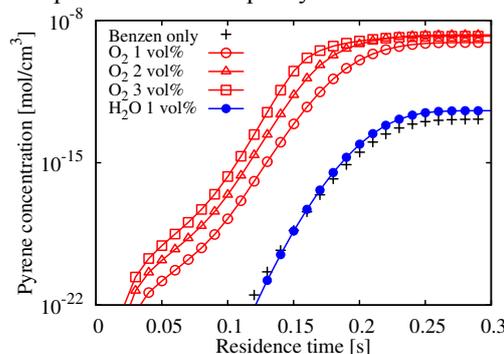


Fig. 3 Calculated result of pyrene concentration with detailed chemical reaction mechanism

\*E-mail: [aoki@tranpo.che.tohoku.ac.jp](mailto:aoki@tranpo.che.tohoku.ac.jp)