

# 炭素微粒子形成過程に与える化学反応の解明と反応モデルの改良

(応用化学・生命工学系) 小口 達夫

## Backgrounds

### カーボンブラックとは

- 炭化水素の熱分解によって生成される炭素微粒子
- 着色、補強、導電性付与としての用途

### カーボンブラックの特性・課題

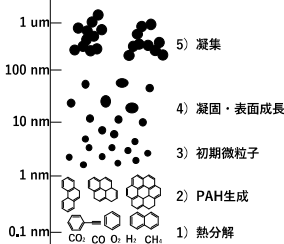
- カーボンブラックの特性を表す要素

粒子径

ストラクチャー

表面性状

### すす粒子生成機構概念図



- 用途の高精度化に伴う高精度なカーボンブラックの需要が増加

### 目的

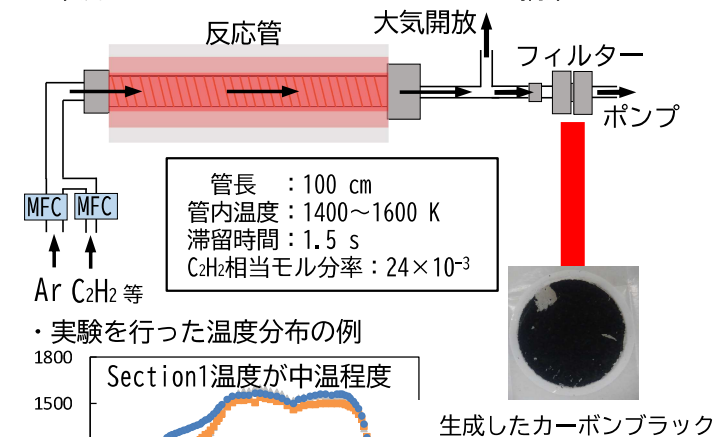
カーボンブラックの生成メカニズムの解明

### 温度勾配によるカーボンブラックの構造関係に注目

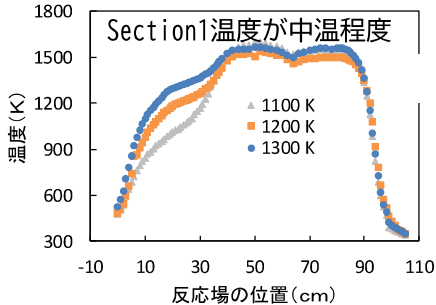
## Experimental

### 実験装置概要

- Ar+C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>ガスを電熱線を巻いた反応管に流し反応が進行
- 下流のフィルターでカーボンブラックを捕集



### 実験を行った温度分布の例



- 残留ガスや生成した粒子を様々な方法で分析
- 粒子分析の一部にEIIRIS設置の「動的光散乱式粒子径分布測定装置」(マイクロトラック・バル社 Nanotrak) を使用し測定

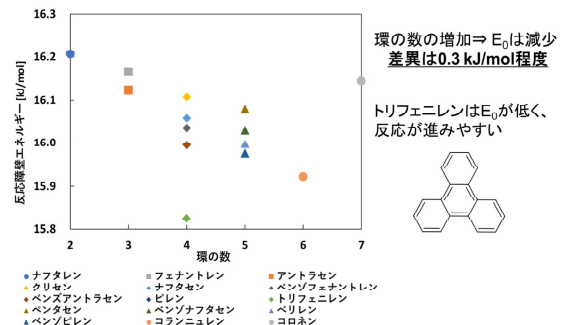
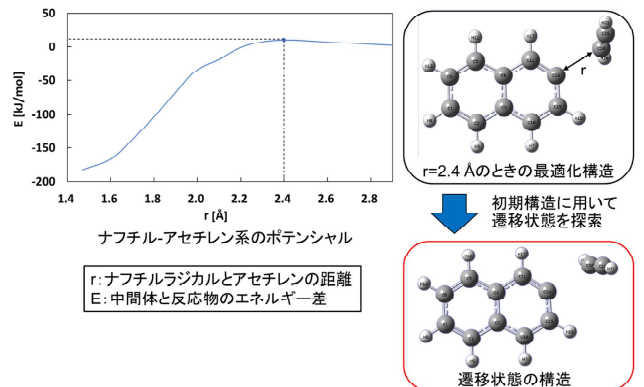
## 理論計算概要

- 原料化学種から生成する中間体の理論的予測と粒径分布への影響に関する調査
- 量子化学計算により、多環化の過程で生成する芳香族類のエネルギーを推定、環化付加反応の進みややすさを検討

### 計算の対象とした分子

環の数	2	3	4	5	6	7
直線	ナフタレン	アントラセン	ナフタセン(チトラセン)	ペンタセン		
折れ曲がり		フェナントレン	ペンズアントラセン	ペンゾナフタセン		
			クリセン			
クラスター			ベンゾフェントレン			
			ピレン	ペリレン		
			トリフェニレン	ペンゾピレン	コランニウレン	コロネン

## Results&Discussion



## Outcome&futurework

- ナノ粒子マルチアナライザーを用いて、より実態に近いと思われるストラクチャーサイズの分布が得られるようになった
- ストラクチャーサイズの成長度合いは反応立ち上がり時の温度および勾配で決まる気相での反応進行度の影響を受ける
- 理論計算により、芳香環の数が増えるほど環化付加反応が進みやすくなることが示唆