



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

プロジェクトメンバー: 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

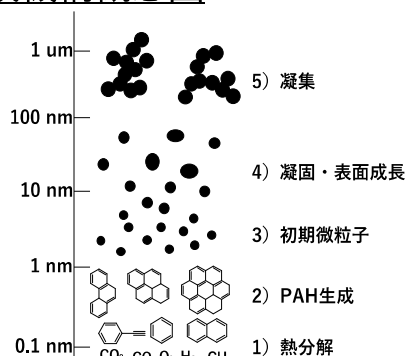
- カーボンブラックの特性を表す要素

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

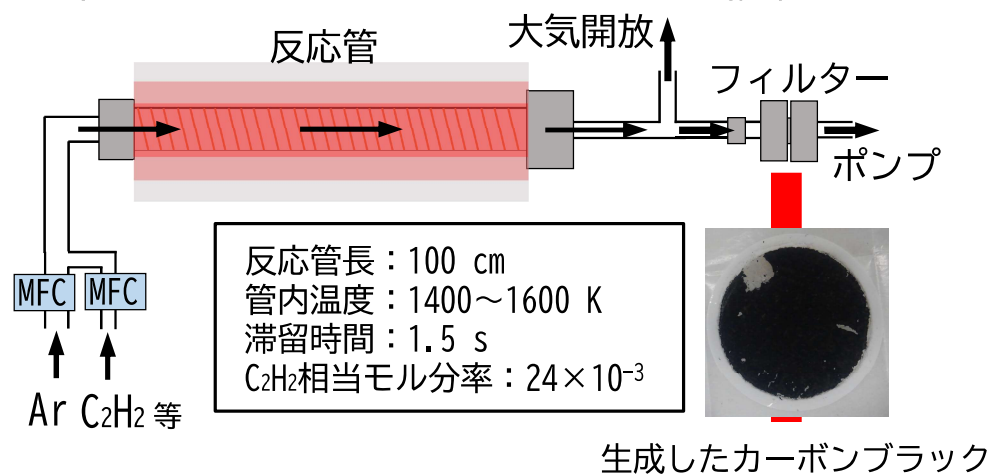
目的

カーボンブラック(CB)の生成メカニズムの解明

新たに原料の混合によるCB生成の加速効果を検討

Experimental

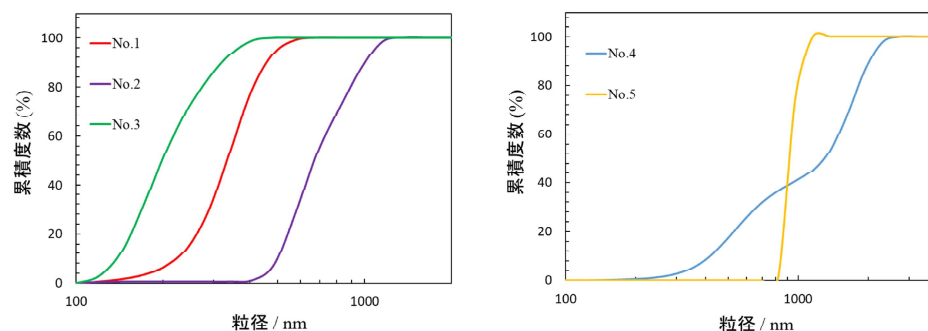
- C₂H₂/C₆H₆/C₆H₅CH₃混合ガス(Ar希釈)を加熱反応管に流す
- 熱分解により反応が進行
- 下流のフィルターでカーボンブラックを捕集



- 残留ガスの主成分をガスクロマトグラフで分析
- 採取したCBの粒径分析のためIRIS²設置の「動的
光散乱式粒子径分布測定装置」(マイクロトラク
・ベル社 Nanotrak)を使用し測定
- 量子化学計算による、多環芳香族炭化水素(PAH)
の生成および酸化に関する反応経路の検討

Results&Discussion

Nanotrakによる粒径分布分析(1400K)

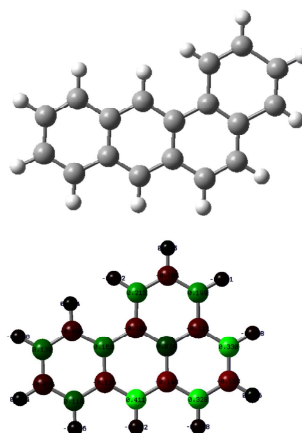
Fig. 3 C₂H₂の混合による粒径分布の変化C₆H₆)

- ベンゼン/トルエンのいずれも、アセチレンと混合すると明らかに粒径が大きくなった→アセチレンによる粒子成長反応の促進効果を確認、特にベンゼンでは促進効果が大きい(低温でも HACA メカニズムが促進される)
- 粒子核成長の主要点がPAHのどの位置になるのか、粒径分布からはわからない

量子化学計算による

多環芳香族炭化水素(PAH)の酸化メカニズムの検討

- 多環化の成長に関わる芳香環一水素の解離・引き抜き反応が多環化に伴って特異性(特異な反応点)をもつようになるか?
- 生成した芳香環ラジカルの酸化・分解過程は芳香環の数や位置により差異はあるか?



例: アントラセンからの環成長

- 従来モデルは外側への成長のみ考慮
- この後、都合良く内側の環が形成されるとは限らない

内側が先に成長するモデル

- 共鳴型の多環芳香族ラジカルが生成
- 内側の炭素が反応しやすい

Outcome&futurework

- Nanotrakを用いて、粒径分布の違いが再現性よく測定できるようになった
- 1400Kという、CB成長にとっては不利な低温においても、効果的に粒子成長をもたらす方法が見えてきた
- 多環化の進行に不可欠な芳香環上の反応点(ラジカル)の生成と酸化に関する系統的な知見を与えることができた
- 対称性の高いピレン・コロネンのような中間体だけでなく、非対称のPAHやラジカルの形成を考慮すべきである

連絡先:
oguchi@tut.jp

技術を究め、技術を創る

国立大学法人 豊橋技術科学大学