

IRES²プロジェクト研究
**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

7 エネルギーをみんなに
そしてクリーンに

9 産業と技術革新の
基盤をつくろう

13 気候変動に
具体的な対策を

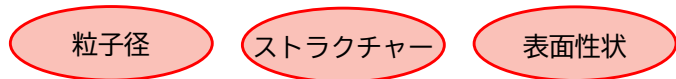
Backgrounds

カーボンブラックとは

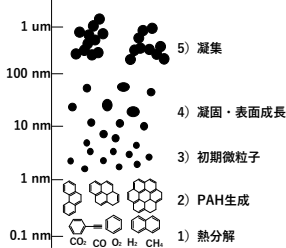
- 炭化水素の熱分解によって生成される炭素微粒子
- 着色、補強、導電性付与としての用途

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



すす粒子生成機構概念図



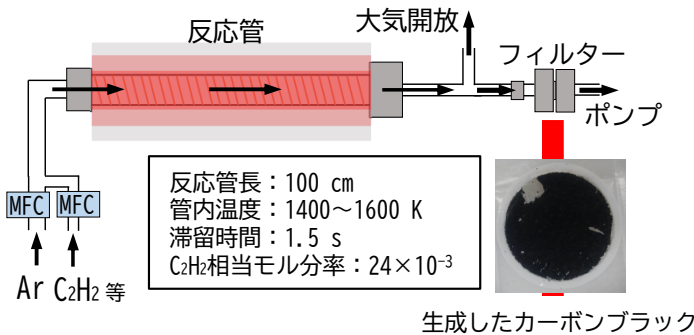
- 用途の高精度化に伴う高精度なカーボンブラックの需要が増加
- 目的

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)

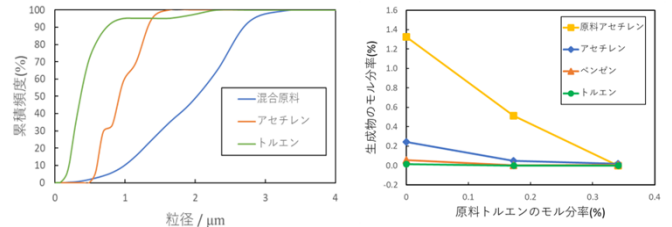


Fig. 3 アセチレンとトルエン混合による粒径分布の変化

- トルエンとアセチレンを混合すると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

反応シミュレーションによる
多環芳香族炭化水素(PAH)の生成メカニズムの検討

- 既往の詳細反応モデル(Yu et al, 2013 & 2015) を
ベースとしてPAH形成をシミュレーション
- 実験値に近づくよう、一部の係数を最適化
- 残存するアセチレンの量を概ね再現できるのはアセチレン
を原料とした場合のみ
- ベンゼン、トルエン等を原料とした場合のメカニズムは
要検討

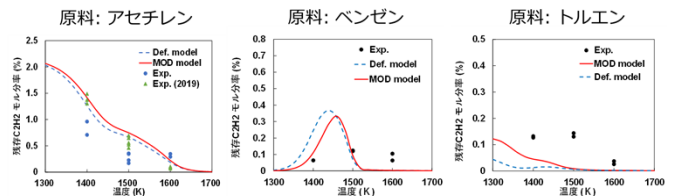


Fig. 4 原料別のアセチレン残存量(GC)とシミュレーション結果の比較

- トルエン由来のラジカル中間体によるアセチレンの消費
反応を低速にすることで実験結果に近づいた
- アセチレン以外の中間生成物の観測を行って確認する
必要がある

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
- 粒径の制御には、反応物の混合条件だけでなく、
温度や滞留時間などさまざまな要素を考慮する必
要がある
- 生成物の粒径のみならず、粒子を構成する一次粒子
の生成と凝集の過程の理解が重要である

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

