

【課題番号】 5RF-2004

【研究課題名】 燃焼における官能基を有した多環芳香族炭化水素の生成機構解明とモデル構築

【研究期間】 令和 2 年度（西暦 2020 年度）～令和 3 年度（西暦 2021 年度）

【研究代表者（所属機関）】 鈴木俊介（国立研究開発法人産業技術総合研究所）

研究の全体概要

内燃機関などの燃焼器内の不完全燃焼が原因となり、粒子状物質の前駆体である多環芳香族炭化水素（Polycyclic Aromatic Hydrocarbon, PAH）が形成される。近年、酸素原子や窒素原子由来の官能基がベンゼン環に結合した含酸素 PAH（Oxygen-containing PAH, OPAH）や含窒素 PAH（Nitrogen-containing PAH, NPAH）が着目されている。粒子状物質はそれ自体が環境汚染の原因になっているが、その構成物質である PAH 類も発癌性や変異原性などの毒性を有しているため、それらの排出抑制や排出量予測の精緻化には燃焼反応中の PAH 類の生成機構の解明や反応モデルの構築が不可欠である。しかし、PAH と比較すると、OPAH および NPAH の生成機構解明研究や反応モデルの開発は非常に限定的である。以上のような背景を受けて、基礎的な燃焼実験による OPAH/NPAH の定量測定と反応モデルの構築を実施することにより、OPAH/NPAH の反応メカニズムを解明することを本研究の目的とする。以下に、本研究で実施する研究内容について記述する。

（１）基礎的な燃焼実験による燃焼中の官能基含有多環芳香族炭化水素の定量実験

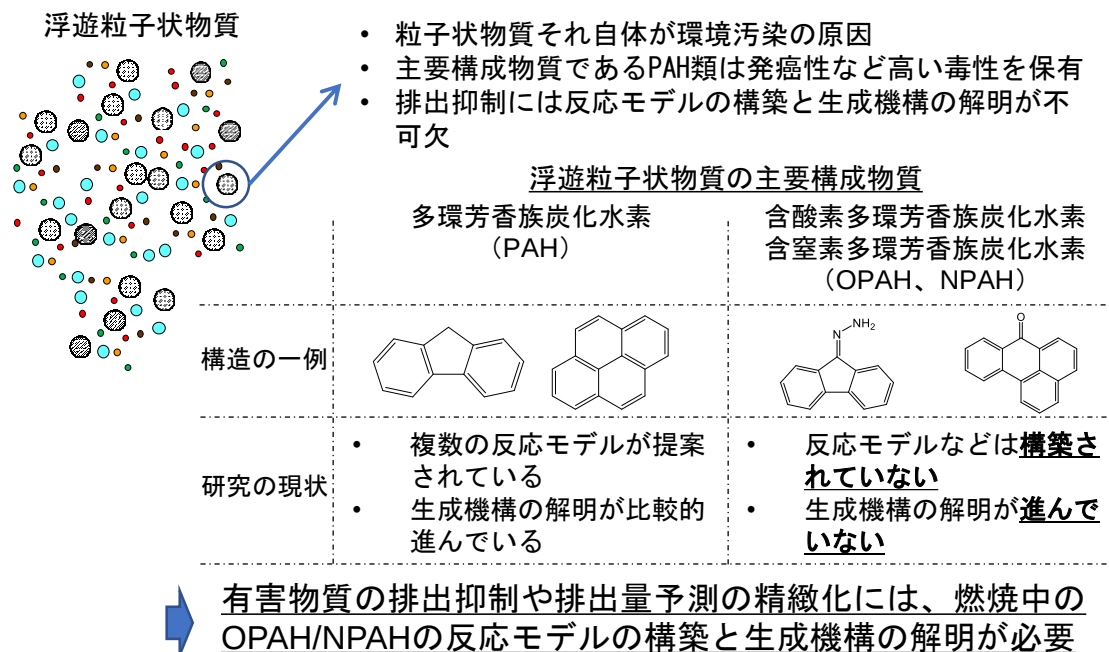
管状電気炉内に管状の反応チューブ管を挿入したフローリアクターを反応器として使用し、燃焼反応を模擬する。管内に炭化水素/酸素/窒素を原料として供給する。反応ガスを分析機器に直接導入し、反応中の OPAH および NPAH の生成挙動を定量的に把握できる評価手法を確立する。炭化水素種、ガス温度、当量比（炭化水素と酸素の実際の比率と化学量論比率の比）、滞留時間（反応時間）を実験パラメータとして変化させる。得られた結果から、OPAH および NPAH の生成機構を定性的観点から見出す。

（２）官能基含有多環芳香族炭化水素の反応モデルの構築

気相の燃焼反応中の化学種の挙動を定量的に記述できる反応モデルの開発を目指す。（１）で得られた定量実験結果を検証用データとして用いることにより、OPAH/NPAH の反応モデルを構築する。既存の PAH 生成反応モデルを出発モデルとして活用し、OPAH や NPAH が関与する素反応を追加する手法により、モデルを開発する。モデルで予想される数値と実験データとの整合性が得られるようにモデルを発展・改良する。（１）と（２）の結果から、燃焼反応中の OPAH/NPAH の主要な生成・消費経路を明らかにするなど、反応メカニズムを提示する。

研究の全体概要図

[背景]



[研究計画]

①燃焼中のOPAH/NPAHの定量実験
②OPAH/NPAHの反応モデルの構築

