

課題名：【5RF-2004】 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

実施期間：2020～2021 年度

研究代表者：鈴木俊介

所属：国立研究開発法人産業技術総合研究所

重点課題 主：【重点課題 ⑩】 大気・水・土壌等の環境管理・改善のための対策技術の高度化及び評価・解明に関する研究

副：【重点課題 ④】 環境問題の解決に資する新たな技術シーズの発掘・活用

本研究のキーワード：多環芳香族炭化水素、含酸素多環芳香族炭化水素、詳細化学反応モデル、反応解析、流通式反応器、エチレン、トルエン、n-デカン

■研究の背景と目的

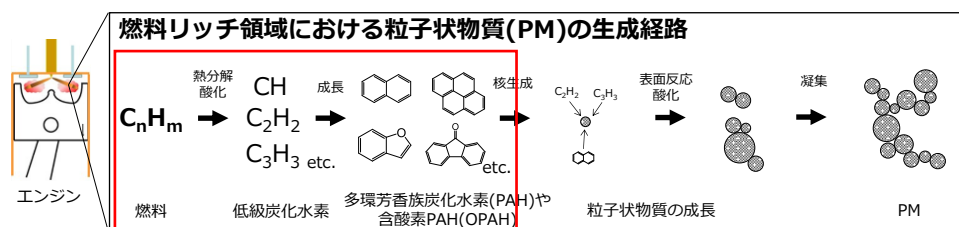
内燃機関などの燃焼機器内の不完全燃焼が原因となり、粒子状物質の前駆体である多環芳香族炭化水素（PAH）が形成されます。近年、PAH の構造の一部が単一あるいは複数の酸素原子や窒素原子によって修飾された含酸素 PAH（OPAH）や含窒素 PAH（NPAH）が、高い毒性や粒子状物質の核生成時の反応性のため着目されています。粒子状物質や PAH 類などの有害物質の排出抑制や排出量予測の精緻化には生成機構の解明や反応モデルの構築が不可欠ですが、OPAH や NPAH に関する研究は PAH と比較して非常に限定的です。そこで本研究では、基礎的な燃焼実験による OPAH/NPAH の定量測定と OPAH/NPAH の反応機構を記述する化学反応モデルを構築し、燃焼反応中の OPAH/NPAH の反応機構の解明を目的とします。

■研究の内容

本研究は実験とモデル構築に分けられます。電気炉で加熱した流通式反応器を反応器として用い、燃料過濃条件における PAH/OPAH/NPAH の生成量をガスクロマトグラフ質量分析計で定量します。得られた実験データを化学反応モデルの検証用データとして使い、実験データを再現できるような理論的化学反応モデルを構築します。構築したモデルを使って、反応経路解析や感度解析などを実施し、OPAH/NPAH の反応機構を解析します。このように、実験と理論の両面から OPAH/NPAH の生成条件・反応機構を見出します。

■研究成果及び環境政策等への貢献

本研究で構築した化学反応モデルは、大気中の有害物質である粒子状物質やその構成物質である PAH/OPAH/NPAH の燃焼機器からの排出量予測の精緻化や、燃焼機器の設計時のシミュレーション精度の向上に貢献できます。自動車の内燃機関以外にも産業用ボイラーなど燃焼機器は幅広く使われていることから、大気環境の改善に向けた本研究成果の影響は大きいと考えられます。また、将来的には従来の燃料から CO₂ 由来燃料などの次世代燃料への転換が必要となりますが、本研究で得られた知見を応用することも可能です。

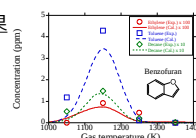


課題 粒子状物質の生成量や排出量の予測の精緻化に向けて、燃焼反応中の含酸素PAH(OPAH)や含窒素PAH(NPAH)の生成機構が解明されなければならない

本研究のアプローチ

- ①基礎的な燃焼実験を通じた、燃焼反応中のOPAHおよびNPAHの検出実験
- ②①で得られた実験データを検証用データとして用い、OPAHおよびNPAHの理論的化学反応モデルの構築
- ③構築したモデルによる反応経路解析

結果



- ・実験結果を良好に再現できるモデルを構築
- ・モデルを使った解析からOPAHの生成機構を解明

