


平成 17 年 3 月 日

氏名 林 瑠美子 

21世紀COEプログラム

拠点：大学院工学系研究科
応用化学専攻、化学システム工学専攻、
化学生命工学専攻、マテリアル工学専攻

“化学を基盤とするヒューマンマテリアル創成”

平成16年度リサーチ・アシスタント報告書

ふりがな 氏名	はやし るみこ 林 瑠美子	生 年 月 日
所属機関名	東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻	
所在地	東京都文京区本郷 7-3-1 環境安全研究センター大島研究室	
申請時点での 学 年	博士課程 2 年	
研 究 題 目	超臨界流体を用いた物質・エネルギー変換による環境調和型技術の開発	
指導教官の所属・氏名	東京大学環境安全研究センター・大島 義人 教授	

I 研究の成果 (1000字程度)

本研究では、環境修復技術として、超臨界水酸化反応を利用した有害化学物質の完全無害化技術について研究を行ってきた。特に、超臨界水酸化法の実排水処理への適応を念頭におき、処理対象となる排水中の成分が分解過程で相互に及ぼす影響について、素反応モデルシミュレーションにより解析を行い、実験結果と比較検討を行った。素反応モデルシミュレーションを使うことにより、実験的に観測できないラジカル等の中間体の挙動を含めた解析が可能であるとともに、実験を行うことなく幅広い条件範囲で反応予測を行うことができる。

一例として、ベンゼンとメタノールの共存系の分解率についてのシミュレーション結果を Fig. 1 に示す。ベンゼンは、単独ではまったく分解しない 450 °C、25 MPa の条件においても、メタノールを添加することにより分解が起こる結果になった。一方メタノールの転化率はほとんど影響を受けない。以上のように、水中に二種以上の化合物が存在する場合、その分解速度は各々を単独で分解した場合と異なる場合があることがわかった。その他の二成分系についてのシミュレーション結果を Table 1 にまとめる。

また、分解速度だけでなく、生成物の分布にも影響があることが示唆された。これらの影響は、それぞれの分解過程で生成する OH ラジカル等を両分解過程で共有することが原因であると考えられる。また、これらの分解促進・抑制の傾向は、実験的にもほぼ同様の結果が得られており、排水のような多成分系の反応予測及び機構解析にも素反応モデルシ

ミュレーションがある程度適用可能であることが示された。

現在は、超臨界水酸化反応の特徴を定量的にモデル内で表現することにより、より現実を精確に反映するよう素反応モデルを改良している。

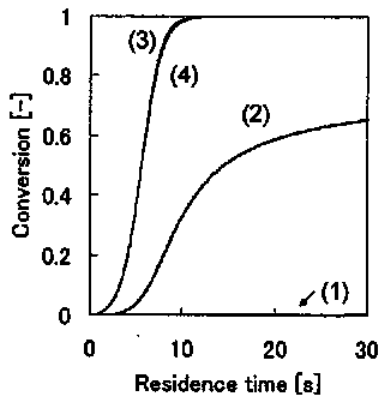


Fig.1 ベンゼン/メタノール系における
転化率の比較 (450 °C, 25 MPa)

- (1) ベンゼン転化率 (単独)
(2) ベンゼン転化率 (+メタノール)
(3) メタノール転化率 (単独)

Table 1 メタノール及びメタンを添加した場合の分解速度への影響

反応物	メタノール添加	メタン添加
メタノール	-	多少抑制
メタン	促進	-
ベンゼン	促進	抑制
フェノール	促進	変化なし

氏 名 林 瑠美子

- Ⅱ (1) 学術雑誌等に発表した論文A (掲載を決定されたものを含む.)
共著の場合、申請者の役割を記載すること。
(著者、題名、掲載誌名、年月、巻号、頁を記入)

氏 名 林 瑠美子

II (2) 学会において申請者が口頭発表もしくはポスター発表した論文
(共同研究者 (全員の氏名)、題名、発表した学会名、場所、年月を記載)

林 瑠美子, 大島 義人, 超臨界水酸化反応の反応機構と素反応モデルシミュレーション, 第20回化学反応討論会, 東京, 2004年6月