

(38) 気相中のタール重質化機構のモデル化と速度論的検討

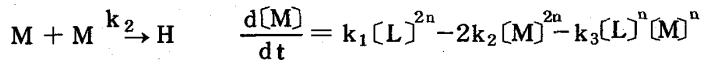
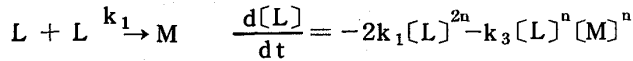
川崎製鉄 技術研究本部 ○杉辺英孝, 檜木義夫

1. 緒言

コークス炉で得られるタールの特性はその重質化の程度に依存する。重質化に対する炉操業要因の影響については経験的に整理されているが、理論的な報告は見当たらない。今回、速度論により重質化機構をモデル化した。

2. 速度論モデル

タールを軽質分 L (1量体), 中質分 M (2量体), 重質分 H' (3量体), H (4量体) に分割すると, 多量化の径路は下記の3種であり, 各成分の気相モル濃度について微分方程式を得る。L, M の濃度についてのみ記した。



ベンゼン不溶キノリン可溶分 (BI-QS) の分子量はベンゼン可溶分 (BS) の約2倍であり<sup>1)</sup>, 前者を M, 後者を L とした。3量体以上はキノリン不溶分 (QI) とした。

3. 実験と解析

豪州 Goonyella 炭を小型炉で乾留し, ガス通過部の温度を 700℃ から 900℃ まで 50℃ 毎に変化させ, 生成タールの溶剤分割を行った。前記の微分方程式を重量濃度に換算し, 700℃ の時の溶剤分割値を初期値として解析を行った。k<sub>3</sub> ≪ k<sub>1</sub>, k<sub>2</sub>, n = 0.5 の場合のアレニウスプロットを Fig. 1 に示す。活性エネルギーは, 2ケの反応径路についてはほぼ同一値であり, 多量化反応として合理的である。k<sub>2</sub> ≪ k<sub>1</sub>, k<sub>3</sub>, n = 1 の場合のアレニウスプロットを Fig. 2 に示す。この場合も反応径路によらず活性化エネルギーは同一値となる。解析で得たパラメータを用い, モデル計算を行なった。一例 (n = 0.5, k<sub>3</sub> ≪ k<sub>1</sub>, k<sub>2</sub>, 850℃) を Fig. 3 に示す。この場合, 重質分は滞留時間に対して直線的に増加する。

4. 結言

タールの気相重質化機構は, 多量化反応として速度論的に表現できる。

文献 1) Chemistry of Coal Utilization, p1036-38,

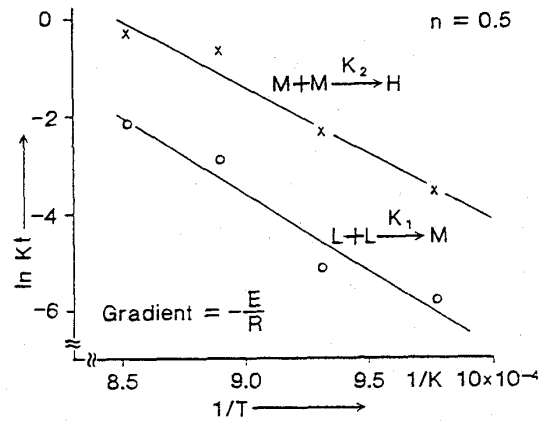


Fig. 1 Dependence of Rate Constants on the Reaction Temperature

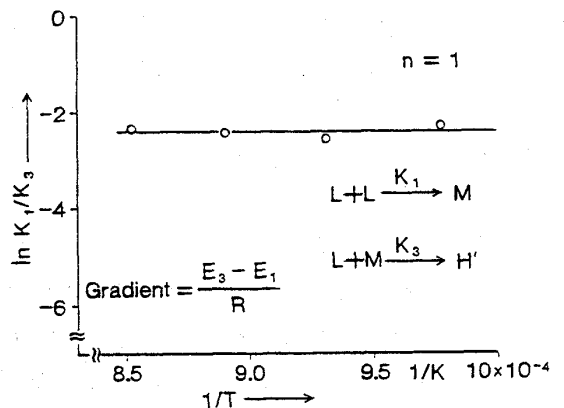


Fig. 2 Temperature Dependence of the Ratio of Rate Constants k<sub>1</sub>/k<sub>3</sub>

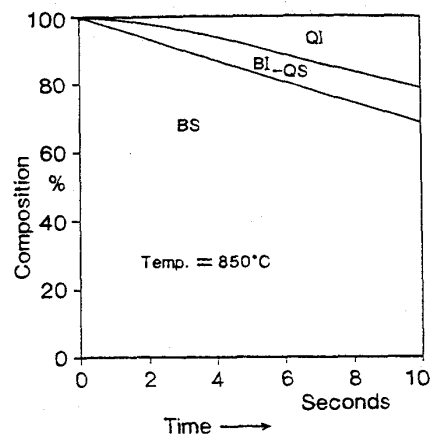


Fig. 3 An Example of Calculations for the Change of Coal tar Compositions.

John Wiley & Sons, 1981