

反応生成物の分析とシミュレーションに基づいた HFO-1123 の不均化反応の反応機構の提案

(東京学芸大学¹・パナソニック株式会社²) ○藤田 紗江¹、村上 光²、北川 浩崇²、橋元 任彦²、中野 幸夫¹

Suggestion of the reaction mechanism of HFO-1123 disproportionation reaction based on the reaction products analysis and the model simulation (Tokyo Gakugei University¹, Panasonic Corporation²) ○Sae Fujita¹, Hikaru Murakami², Hirotaka Kitagawa², Takahiko Hashimoto², Yukio Nakano¹

Some laws in Japan will restrict the use of some F-gases (fluorinated greenhouse gases) currently used. HFO-1123 (CF₂CFH) with very low GWP is one of the most promising candidates for alternative of F-gases currently used. However, external factors such as electric discharge for HFO-1123 under conditions of high temperature and pressure are known to be triggered the explosive decomposition with rapid and large increase of temperature and pressure which is commonly called disproportionation. Therefore, to practical use of HFO-1123 as refrigerant, it is necessary to understand the disproportionation reaction and then suppress it. The results of GC/MS measurements of the gaseous components after the disproportionation reaction of HFO-1123 show that some products are formed by F and CF₂. In addition, the results of FTIR measurements show the molar ratios of HFO-1123 and some products formed by F in the gaseous components after the reaction. In this study, by combining these results and the changes in Gibbs free energies of the reactions predicted be occurred, the reaction mechanism of the disproportionation of HFO-1123 was constructed. For compounds of which thermal parameters have not reported, those thermal parameters were calculated using *ab initio* calculations. Then the constructed reaction mechanism was verified by results of chemical kinetics simulation using Chemkin. Due to space limitations, details will be explained in this presentation.

Keywords : *Refrigerant, HFO-1123, Disproportionation reaction, Reaction Mechanism, Simulation*

空調機器等で使用される冷媒は、法律によって環境への負担が少ないものへと移行されている。HFO-1123 (CF₂CFH) は GWP が非常に低いため、新規冷媒の有力な候補であるが、高温・高圧条件下において放電などの外部因子により、温度・圧力が急激に上昇する不均化反応と呼ばれる爆発的な自己分解反応を起こす。よって冷媒として実用化するには、この反応を理解し、抑制する必要がある。現在、不均化反応後の気体成分の GC/MS による測定の結果から、反応中に F 原子や CF₂ ラジカルにより生成する化合物があることがわかった。また、FTIR による測定結果から反応後の気体成分の HFO-1123 や F 原子によって生成される化合物の物質質量比がわかっている。本研究では、これらの実験結果から考えられる素反応と、その反応の反応前後のギブス自由エネルギーを用いることで、HFO-1123 の不均化反応の反応機構を構築した。この時、エンタルピーなどの文献値がないものは分子軌道計算を用いて計算を行った。その後、構築した反応機構の妥当性を Chemkin で化学反応シミュレーションを行い、検証を行った。紙面の都合上、詳細は本発表で説明する。