

非経験的分子軌道法による non-chlorinated dibenzo-para-dioxin

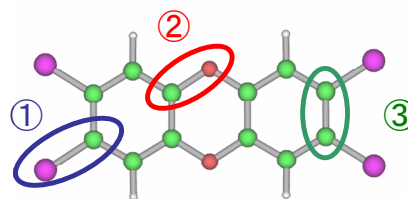
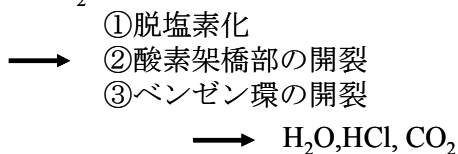
架橋部開裂反応の予測

○青柳裕一 不破章雄

早稲田大学 理工学研究科環境資源及び材料理工学専攻 (〒169-8555 東京都新宿区大久保 3-4-1)

【緒言】

近年、ダイオキシン類はその高い急性・慢性毒性などから、深刻な環境汚染物質の一つとして注目されている。日本においては「ダイオキシン対策推進基本指針」に基づきダイオキシン類に対する規制は年々厳しくおり、更なる生成抑制ならびに分解技術の向上が望まれている。ダイオキシン類の削減方法としては、燃焼状態の改善などによる生成抑制及び活性炭素などの吸着剤による吸着除去ならびに金属酸化物を触媒とする触媒分解法が挙げられる。しかしながら、触媒分解法の効率上昇に必要なダイオキシン分解反応の詳細なメカニズムに対する知見は未だ少なく、その反応経路など未だよくわかっていないのが現状である。ダイオキシン類の分解過程は以下の3つのプロセスによって起こる。



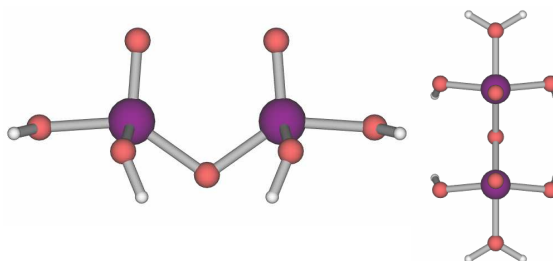
PCDDs(2,3,7,8-TCDD)

【方法】

本研究の計算は全て非経験的分子軌道プログラム Gaussian98 によって行った。計算レベルは Hartree-Fock 法と密度汎関数法(DFT)の混成 Functional である B3LYP を使い、基底関数には 3-21g*とした。

【結果】

本研究ではまず、気相均一相での反応経路を特定し、その知見から触媒上での反応経路の予測を行った。触媒は五酸化バナジウムを用いた。また計算コストの問題からクラスターは最小モデルとした。



【参考文献】

1. K. Olie and O. Hutzinger: *Proceedings of the 4th International Symposium*, 1(1978), pp.555-562.
2. B. Schatzwitz, G. Bramdt, F.Gafner, R.Buhler, P. Hasler and T.Nussbaumer: *Chemosphere* 29(1994), pp.2005-2013.

おわり