

C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O とその副生成分子を考慮した CO<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O 混合ガスの粒子組成計算

甲斐 広将・出村 文俊・中野 裕介・田中 康規・石島 達夫 (金沢大学)

## 1. はじめに

ガス遮断器で用いられる SF<sub>6</sub> ガスは、地球温暖化係数が非常に高く、排出削減対象となっている。現在、SF<sub>6</sub> 代替候補ガスの一つとして CO<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O 混合ガスが提案されており、本研究室でもこの混合ガス吹付けアーク特性の数値解析を行ってきた。しかし、C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O 分子が新合成されたものであり、その分子定数などの基礎データが不明で、これまでの高温粒子組成の計算では考慮できていなかった。そこで、C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O とその副生成分子を量子化学計算により明らかにし、CO<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O 混合ガスの粒子組成の計算を行った。

## 2. 粒子組成の計算方法および条件

表 1 に、本計算で考慮した C, O, F 原子で構成される 98 種類の原子、分子、イオンおよび電子を示す。粒子組成計算には NIST-JANAF Table [1] および HSC Chemistry [2] 内のデータに加えて、量子化学計算プログラム Gaussian 16 [3] により計算した新しい粒子をも考慮した。同表で、赤字で示した C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O およびその副生成分子が、量子化学計算により新たに分子定数を求めた粒子である。量子化学計算では、この新規分子に対して構造最適化、振動解析、分子軌道および全電子エネルギーの計算を行い、内部状態和および標準生成エンタルピーを推定した [4]。粒子組成計算では、各温度・圧力条件で系の Gibbs の全自由エネルギー  $G$  を最小化することで、各粒子のモル分率を計算し、数密度を算出した。圧力は 1 気圧とし、温度は 300-30000 K の範囲を 100 K 間隔で計算した。

## 3. 粒子組成の計算結果

図 1 に、温度 300-30000 K における 100% C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O の粒子組成を示す。同図から、15000 K 以上の高温領域では、C<sup>+</sup>, F<sup>+</sup> などのイオンや電子が支配的になった。3000-15000 K の温度領域では、イオンと電子が再結合し C, F, CO となり、C<sub>2</sub>FO が数密度 10<sup>23</sup> m<sup>-3</sup> 以上で存在する。3000 K 以下の低温領域では、CF<sub>4</sub> のほか C<sub>3</sub>F<sub>4</sub>O, C<sub>5</sub>F<sub>8</sub>O, C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O が支配的となった。このことから 100% C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O の条件では C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O は解離した後、原子や分子が再結合して復帰すると考えられる。

図 2 に、75% CO<sub>2</sub>/10% O<sub>2</sub>/15% C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O 混合ガスの粒子組成を示す。同図から、15000 K 以上の温度領域では 100% C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O と同様にイオンや電子が支配的になっている。一方、15000 K 以下の温度領域では、構成原子数が小さい分子や原子が支配的になることがわかる。特に、3000 K 以下の低温領域では、CO<sub>2</sub> や C<sub>3</sub>F<sub>4</sub>O が支配的になった。以上から、CO<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O 混合ガスにおいて電流遮断を行った場合、もとの混合比に復帰できないことが判明した。

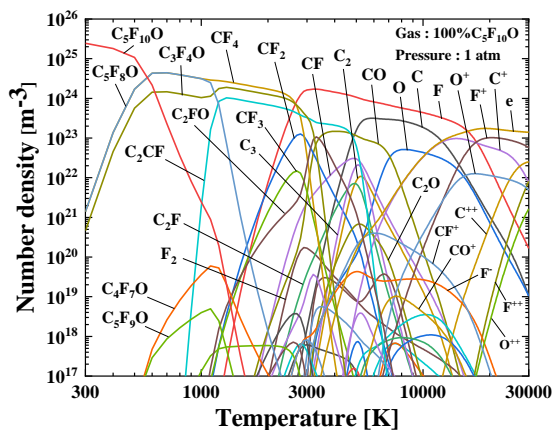
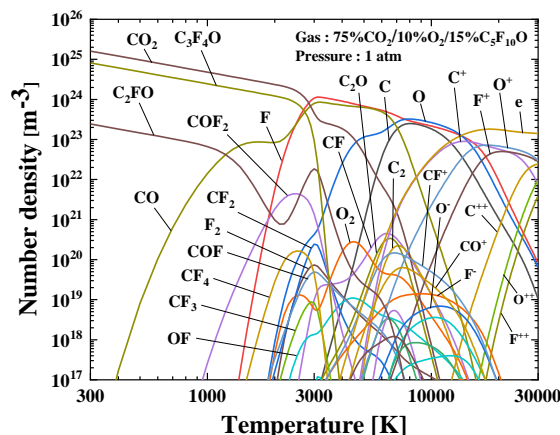
## 参考文献

- [1] M. W. Chase: NIST-JANAF Thermochemical Tables, Fourth Edition. The American Chemical Society and the American Institute of Physics (1998)
- [2] HSC Chemistry for Windows Ver.9
- [3] Gaussian 16, Revision B.01, M. J. Frisch, et al., Gaussian, Inc., Wallingford CT (2016)

[4] 甲斐, 他, 電学研資 EPP-21-077, SA-21-046, SP-21-018 (2021)

表 1: CO<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O 混合ガスの考慮粒子

単原子分子	C, F, O
二原子分子	CF, C <sub>2</sub> , FO, F <sub>2</sub> , CO, O <sub>2</sub>
三原子分子	CF <sub>2</sub> , C <sub>2</sub> F, C <sub>3</sub> , CFO, F <sub>2</sub> O, FO <sub>2</sub> , CO <sub>2</sub> , C <sub>2</sub> O, O <sub>3</sub>
四原子分子	CF <sub>3</sub> , C <sub>4</sub> , CF <sub>2</sub> O, C <sub>2</sub> F <sub>2</sub> , F <sub>2</sub> O <sub>2</sub> , COF <sub>2</sub> , C <sub>2</sub> CF, C <sub>3</sub> F, C <sub>2</sub> FO
五原子分子	CF <sub>4</sub> , C <sub>2</sub> F <sub>3</sub> , C <sub>5</sub> , C <sub>3</sub> O <sub>2</sub> , CF <sub>3</sub> O
六原子分子	C <sub>6</sub> , C <sub>6</sub> (Sg), C <sub>2</sub> F <sub>4</sub> , C <sub>3</sub> F <sub>3</sub> (1g), C <sub>3</sub> F <sub>3</sub> (2g), C <sub>4</sub> F <sub>2</sub> , CF <sub>3</sub> O <sub>2</sub> , CF <sub>3</sub> OF
七原子分子	C <sub>7</sub> , C <sub>2</sub> F <sub>5</sub> , C <sub>3</sub> F <sub>4</sub>
八原子分子	C <sub>8</sub> , C <sub>8</sub> (Tg), C <sub>2</sub> F <sub>6</sub> , C <sub>3</sub> F <sub>4</sub> O
九原子分子以上	C <sub>9</sub> , C <sub>3</sub> F <sub>6</sub> , C <sub>3</sub> F <sub>7</sub> , C <sub>4</sub> F <sub>6</sub> , C <sub>4</sub> F <sub>6</sub> (HFCBg), C <sub>2</sub> F <sub>6</sub> O <sub>2</sub> , C <sub>3</sub> F <sub>6</sub> , C <sub>4</sub> F <sub>8</sub> (OFBg), C <sub>4</sub> F <sub>8</sub> (OFCg), C <sub>6</sub> F <sub>6</sub> , C <sub>4</sub> F <sub>10</sub> , C <sub>4</sub> F <sub>10</sub> (DFBg), C <sub>7</sub> F <sub>8</sub> , C <sub>5</sub> F <sub>12</sub> , C <sub>6</sub> F <sub>14</sub> , C <sub>7</sub> F <sub>16</sub> , C <sub>4</sub> F <sub>7</sub> O, C <sub>5</sub> F <sub>8</sub> O, C <sub>5</sub> F <sub>9</sub> O, C <sub>5</sub> F <sub>10</sub> , C <sub>5</sub> F <sub>10</sub> O
単原子イオン	C <sup>+</sup> , C <sup>2+</sup> , C <sup>-</sup> , F <sup>+</sup> , F <sup>2+</sup> , F <sup>-</sup> , O <sup>+</sup> , O <sup>2+</sup> , O <sup>-</sup>
二原子イオン	C <sub>2</sub> <sup>+</sup> , C <sub>2</sub> <sup>-</sup> , CO <sup>+</sup> , O <sub>2</sub> <sup>+</sup> , O <sub>2</sub> <sup>-</sup> , O <sub>2</sub> <sup>2+</sup> , F <sub>2</sub> <sup>+</sup> , CF <sup>+</sup> , CF <sup>-</sup>
多原子イオン	CF <sub>2</sub> <sup>+</sup> , CF <sub>2</sub> <sup>-</sup> , CO <sub>2</sub> <sup>+</sup> , CO <sub>2</sub> <sup>-</sup> , FCO <sup>-</sup> , CF <sub>3</sub> <sup>+</sup> , CF <sub>3</sub> <sup>-</sup> , COF <sub>2</sub> <sup>+</sup> , COF <sub>2</sub> <sup>-</sup> , C <sub>3</sub> O <sub>2</sub> <sup>+</sup>
電子	e

図 1: 100% C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O ガスの粒子組成図 2: 75% CO<sub>2</sub>/10% O<sub>2</sub>/15% C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O 混合ガスの粒子組成