

紫外線照射によるフェノール類の分解

山梨大学大学院 学 ○戸田 直樹
 山梨大学大学院 正 平山 けい子
 山梨大学大学院 正 平山 公明

1. 背景

フェノール類とは、ベンゼン環に水酸基が加わった構造を持つ物質の総称である。フェノール類は、医薬品、農薬、染料等の製造原料として利用されている。

我が国では、臭味発生防止の観点から、フェノール類は水道水の水質基準として 0.005mg/L 以下とされている。フェノール類はガス工場、化学工場、洗炭などの排水、アスファルト舗装道路洗浄水及び防錆・防腐剤などから水中に混入することがある。

原水にフェノール類が存在する場合、浄水処理として一般的な急速ろ過方式ではフェノール類を分解・除去することは困難である。

そこで、本研究では紫外線を使用したフェノール類の除去の検討を行なった。

紫外線処理は、有機物の単結合や 2 重結合などの部分にエネルギーを与え、結合を破壊することや O_3 を生成および分解し、分解過程で強力な酸化作用があることで知られている。

2. 目的

本研究の主な検討内容は以下の 2 点である。

- 1) 紫外線照射によってフェノール類が分解できるか調べる。
- 2) 分子構造の違いが分解のしやすさと関係があるか調べる。
 (具体的には、官能基の違いの影響を検討する)

3. 方法

3.1 紫外線照射装置

本研究では冷陰極殺菌ランプ（ハリソン東芝ライティング社製）を使用してフェノール類分解実験を行った。紫外線ランプの特性を表 1 に示す。

表 1 紫外線ランプの特性

ランプ名	冷陰極殺菌ランプ
波長	200 - 400nm (主な波長域は 365nm)
紫外線照度	41.77mW/cm ² (波長域 241 - 271nm) 55.22mW/cm ² (波長域 320 - 390nm)

3.2 対象とするフェノール類

下記の異性体を含めた 22 種類のフェノール類を研究対象とした。

- 1) フェノール
- 2) ブロモフェノール(以下 BP)類 計 7 種類
BP (2- 3- 4-), DBP (2,4- 2,6- 3,5-), 2,4,6-TBP
- 3) クロロフェノール(以下 CP)類 計 7 種類
CP (2- 3- 4-), DCP (2,4- 2,6- 3,5-), 2,4,6-TCP
- 4) ニトロフェノール(以下 NP)類 計 7 種類
NP (2- 3- 4-), DNP (2,4- 2,5- 3,4-), 2,4,6-TNP

3.3 実験方法

0.1mmol/L のフェノール溶液を 300mL 作成し、450rpm で攪拌しながら紫外線を照射する (図 1)。サンプルは経時的に採水し、フェノール類濃度、全有機炭素 (TOC)、陰イオンを測定した。

なお、フェノール類溶液の初期 pH は 7 に調整した。

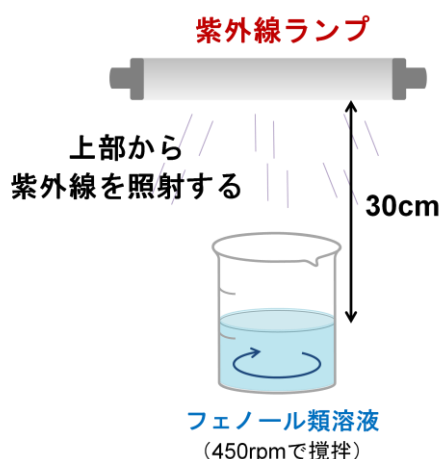


図 1 紫外線照射の概要

キーワード フェノール、紫外線、TOC、分子軌道計算

連絡先 〒400-0017 甲府市武田 4-3-11 山梨大学大学院医学工学総合研究部 Tel 055-220-8595 E-mail keikoh@yamanashi.ac.jp

4. 結果と考察

4.1 フェノール類の除去

図2は紫外線照射によるフェノール類の除去を示している。フェノールは10分、BP類は2分、CP類は5分、NP類は30分で検出限界程度まで除去された。

図3は全有機炭素（TOC）の経時変化を示している。TOCにおいて、フェノールは50分、BP類は30分、CP類は30分で検出限界程度まで除去された。NP類は照射60分でも検出限界まで除去されなかった。

図4は各フェノール類の分解速度係数を示している。フェノール類の分解のしやすさは、BP類>CP類>フェノール>NP類の順であった。またBP、CP、NPに注目すると、パラ位(4-)に官能基が配置しているフェノール類が分解されやすい傾向にあった。

4.2 分子軌道計算によるフェノール類の分解性評価

表2は分子軌道計算ソフトCache（Fujitsu製）を使い、PM5で計算したフェノール類のHOMO（Highest Occupied Molecular Orbital）エネルギーの絶対値である。

HOMOエネルギーの絶対値は、電子軌道から電子を外部に取り出すために必要なエネルギーである。

表2より、ニトロフェノール類のHOMOエネルギーの絶対値は10.40であり、他のフェノール類よりも大きい。そのためニトロフェノール類は電子が奪われにくく、分解性に乏しかったと推察できる。

5. まとめ

紫外線照射によるフェノール類の分解実験を行った結果、以下の点が指摘できる。

- 1) 0.1mmol/L、300mLのフェノール類は本実験で用いた紫外線照射装置により30分以内にほぼ除去された。TOC濃度の減少も観察された。
- 2) パラ位(4-)にBr, Cl, NO₂が配置しているフェノール類の分解性が高かった。
- 3) ニトロフェノール類は分解されにくかった。
- 4) HOMOエネルギーからニトロフェノール類の分解性の低さが評価できた。

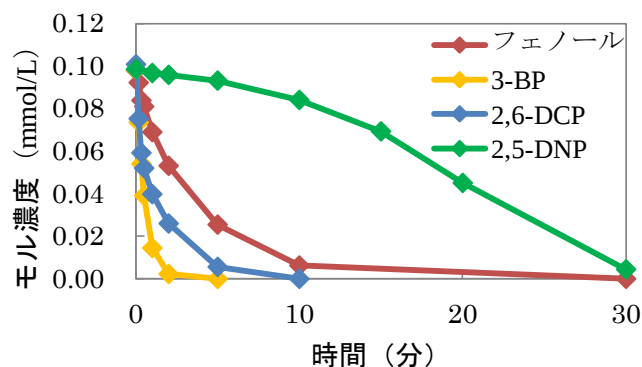


図2 紫外線照射によるフェノール類の除去

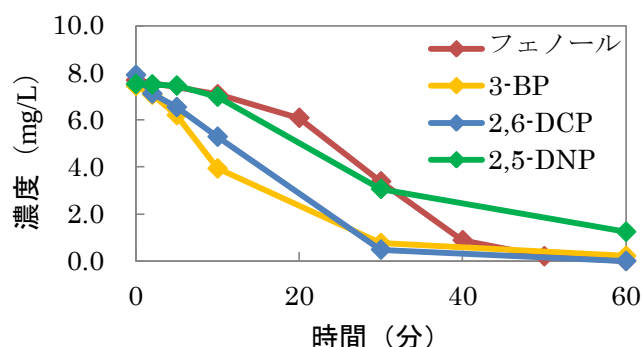


図3 フェノール類の全有機炭素（TOC）の除去

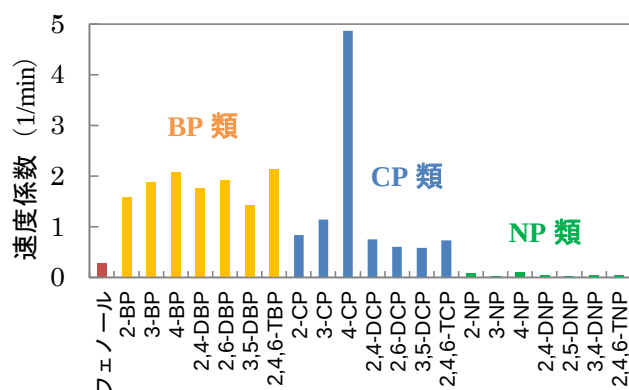


図4 フェノール類の速度係数

表2 フェノール類のHOMOエネルギーの絶対値

フェノール類	HOMOの絶対値(eV)
フェノール	8.95
BP類	9.21
CP類	9.01
NP類	10.40