

톨루엔 혼합에 따른 대향류 확산화염 내 매연 생성에 대한 수치적 연구

최재혁* · 윤석훈** · 윤두호***†

*, ** 한국해양대학교 기관시스템공학부, *** 한국폴리텍 VII대학 부산캠퍼스 컴퓨터응용금형과

Numerical Study on Soot Formation in Opposed-flow Nonpremixed Flame by Mixing Toluene

Jae-Hyuk Choi* · Seok-Hun Yoon** · Doo-Ho Yoon***†

*, ** Division of Marine System Engineering Korea Maritime University, Dongsam 2-dong, Yeongdo-gu, Busan, Korea

*** Busan Campus of Korea Polytechnics VII, Ki-wagul, Buk-gu, Busan, Korea

요 약 : 매연 생성에 대하여 톨루엔의 영향을 알아보기 위하여 순수에틸렌 대향류 확산화염에 톨루엔을 소량 혼합하여 수치해석을 수행하였다. 톨루엔(C₇H₈)의 혼합 비율은 3%, 5%, 10%, 및 20%로 하였다. 계산에는 CHEMKIN III 기반의 Senkin 코드와 oppdif 코드를 이용하여 0-D 계산과 1-D 계산을 수행하였다. 0-D의 Senkin 계산에서는 톨루엔의 혼합율이 증가할수록 메틸라디칼의 농도는 증가하고 이에 따른 벤젠의 농도도 증가하였다. 이는 순수 에틸렌 화염에 톨루엔을 혼합할 경우 더 많은 매연이 생성될 것이라는 걸 의미한다. oppdif 코드에 의한 1-D 계산에서는 10% 톨루엔 반응식으로부터는 H 라디칼의 생성율이 결정적인 역할을 한다는 것을 알 수 있었다. 위 결과들로부터 확산화염 내 매연 생성에 있어 메틸라디칼, 벤젠과 H 라디칼이 중요한 역할을 한다는 것을 알 수 있었다.

핵심용어 : 매연, 톨루엔, 확산 화염, 벤젠, 메틸

Abstract : A numerical simulation has been performed to investigate effects of toluene mixing on soot formation in pure ethylene opposed-flow nonpremixed flame. Mixture ratios of toluene were 3%, 5%, 10%, and 20%. Senkin code for 0-D simulation and oppdif code for 1-D simulation based on CHEMKINIII were utilized. 0-D results by senkin showed that concentrations of methyl radicals and benzene were increased with increasing toluene mixture ratio. This implied that the mixing of toluene in pure ethylene diffusion flame produces more PAHs and soot than those of pure ethylene flame. 1-D result of 10 % toluene reaction by oppdif code showed that production rate for H radical was a crucial factor for benzene formation. These results imply that methyl radical, benzene and H radical play a important role on soot formation in diffusion flames.

Key Words : Soot, Toluene, Nonpremixed flame, Benzene, Methyl

1. 서 론

최근 지구의 환경오염 방지와 관련한 내용들이 이슈화 되면서 수송의 주역인 자동차 분야에서도 연비저감기술을 위한 친환경 자동차 연구가 많이 이루어지고 있으며(한국자동차공학회, 2010), 이에 따라 가솔린 보다 연비가 훨씬 좋은 디젤엔진이 각광을 받고 있다. 따라서 디젤 엔진에서도 CO₂ 배출이 적은 비석유계 연료를 이용하려는 연구가 진행되고 있다(한국자동차공학회, 2010). 그러나 액체연료를 실린더 내로 직접 분사하는 디젤 기관은 가솔린 기관에 비하여 연소특성 상 매연과 질소산화물(NO_x)가 많이 배출된다. 특히 매연은 폐암의 원인이 될 수

있다는 연구 결과들이 발표되면서 각 나라에서는 디젤 기관의 배기가스에 대한 규제를 매우 엄격하게 실시하고 있다.

특히 최근 연구에 따르면, 상업용 선박이 배출하는 해상에서의 입자상 오염물질의 양은 전 세계의 육상용 차량에서 배출하는 입자상 오염물질의 총량의 50%에 이르는 것으로 나타났다. 이에 육상 및 해상의 교통수단의 연료로서 사용되는 디젤과 가솔린 등의 액체연료에 의한 매연 입자의 생성 특성에 관한 연구는 중요한 연구 분야이다. 디젤과 가솔린 연료는 다양한 탄화수소계(Hydrocarbon species)의 혼합물이다. 이들의 주요 구성 성분은 톨루엔(C₆H₅-CH₃)과 n-헵탄(n-C₇H₁₆)이 될 수 있다. 이 중 톨루엔은 디젤 연료중의 방향족 탄화수소를 대표하는 연료로, 디젤 연료의 방향족 탄화수소는 9~14개의 탄소 원자들로 구성되어 있다. 따라서 분자구조가 복잡한 톨루엔이 디젤 대용 연료(Diesel surrogate fuel)로 적합하다고 알려져 있

* 대표저자 : 종신회원, choi_jh@hhu.ac.kr, 051-410-4257

† 교신저자 : 정희원, ydh@kopo.ac.kr, 051-330-7846

다(Hernandez et al., 2008).

매연 생성에 관한 연구는 오랜 기간 동안 많은 연구자들에 의해 수행되었다(Randall et al., 1997; Glassman et al., 1988; Frenklach et al., 1984). 그러나 아직까지 매연의 생성 메커니즘에 대해서는 확실히 밝혀지지 않고 있다. 일반적으로 확산화염에서는 벤젠 및 나프탈렌 등의 초기 방향족 고리가 연료의 열분해를 거쳐 형성되고, 이들 초기 방향족 고리가 성장하여 다환방향족 탄화수소(Polycyclic Aromatic Hydrocarbon, PAH)가 된다. 이러한 다환 방향족 탄화수소로부터 화염 내에서 성장과 응집 등을 거치면서 매연이 발생하는 것으로 알려져 있다(Randall et al., 1997; Glassman et al., 1988). 화염 내부에서의 높은 농도를 유지하는 아세틸렌(C_2H_2)이 초기 벤젠고리 생성 및 다환 방향족 탄화수소의 성장 경로로 중요한 역할을 한다는 것이 알려지면서는 화염 내부에서 높은 농도를 유지하는 아세틸렌(C_2H_2)의 역할이 강조되어 왔으며, Frenklach et al.(1984) 등에 의해 PAH의 생성과 성장에 abstraction- C_2H_2 addition (HACA) 반응이 중요한 역할을 한다는 것이 밝혀졌다. 하지만 최근의 연구에서는 메틸(CH_3), 프로파길(C_3H_3)과 등의 C1과 C3 화학종이 초기 벤젠고리 생성 및 다환 방향족 탄화수소의 성장에 있어 HACA 반응과 더불어 그 중요성이 제시되었다(D'Anna et al., 2000; Miller, 1996; Marinov et al., 1998). 또한 최근에는 순수 에틸렌 화염에 에탄, 프로판 및 DME를 혼합했을 때 소량의 혼합 비율에서는 혼합 연료의 경우가 순수 연료보다 더 많은 다환 방향족 탄화수소 및 매연이 생성된다는 것을 증명하였다(McEnally and Pfefferle, 2007; Kang et al., 1997; Yoon et al., 2005; Choi et al., 2011a; Choi et al., 2011b; Song et al., 2003; Yoon et al., 2008).

이에 본 연구에서는 디젤 대용 연료로서 적합하고 메틸 고리를 끼고 있는 톨루엔에 대하여 순수에틸렌 화염에 혼합하여 매연 생성 메커니즘에 대하여 조사하기 위하여 수치해석을 수행하였다. 수치해석은 ChemkinIII 기반을 하고 있는 Senkin 코드(Lutz et al., 1997a)를 활용한 0-D 계산과 oppdif 코드(Lutz et al., 1997b)를 활용한 1-D 계산을 수행하였다. 수치해석 결과로는 매연 생성에 영향을 미치는 아세틸렌(C_2H_2), 메틸(CH_3), H 라디칼 및 벤젠(C_6H_6)의 농도에 대하여 살펴보고 특히 아세틸렌, 메틸계, H 라디칼이 벤젠 고리 생성에 미치는 영향에 대하여 파악하였다.

2. 수치해석 결과

2.1 ChemkinIII 기반 Senkin에 의한 0-D 계산

Senkin(CHEMKINIII-based) 0-D 모델은 최근 HCCI와 같은 자동차 엔진의 운전영역 등의 상황을 조사하기 위해 사용되고 있다. 0-D 모델은 보통 연소실 내의 압력, 온도, 연료의 농도를 균질하다고 가정하므로, 압력, 온도, 열발생율의 최대값은 실제의 값과는 높게 나올 수 있지만, 경향을 파악하는 데는 크게 무리가 없을 것으로 생각한다.

계산 조건으로 연료는 순수 에틸렌에 각 액체연료를 3%, 5%, 10% 및 20% 씩 혼합하였고, 이론 당량비 조건의 연료산화제 혼합기체에서 초기 온도를 1000 K로 하여 계산을 수행하였다. 혼합비율은 사용한 연료의 질량유량과 전체 혼합연료의 질량 유량의 비로 정의하였다. 그 각각의 조건에 대하여 시간에 따른 온도, CH_3 및 C_6H_6 의 농도를 나타냈다.

Fig. 1은 순수에틸렌 화염과 톨루엔을 3%, 5%, 10% 및 20% 혼합하였을 때의 시간에 따른 온도분포를 나타낸다. 그림에서 알 수 있듯이 시간에 따른 온도 변화는 혼합율이 증가할수록 온도의 상승이 늦어지고 있다는 것을 알 수 있다. 이것은 톨루엔의 증가에 따른 착화 지연이 이루어지면서 이로 인한 매연 생성의 시간이 길어진다는 것을 의미한다.

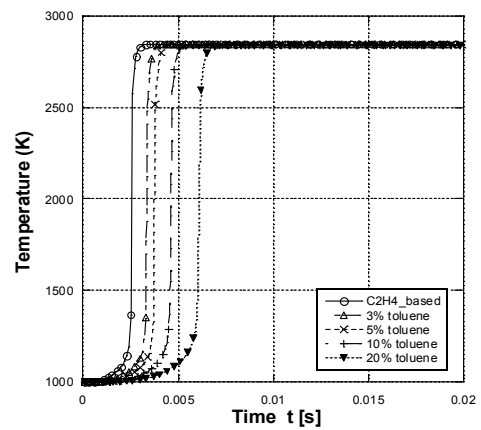


Fig. 1. Temperature distributions for the toluene mixture ratios of 0%, 3%, 5%, 10%, and 20% in the counterflow diffusion flames as a function of time.

Fig. 2는 순수에틸렌 화염과 톨루엔을 3%, 5%, 10% 및 20% 혼합화염에 대하여 시간에 따른 CH_3 농도를 나타낸다. CH_3 의 농도는 톨루엔이 10%, 20% 혼합했을 때 순수 에틸렌보다 증가하는 것을 알 수 있으며 그 생성량은 3% 및 5% 혼합 화염보다 높은 값을 가진다는 것을 알 수 있다. 즉 톨루엔의 적절한 혼합은 순수 에틸렌 화염보다 많은 초기 벤젠 고리 생성이 이루어질 수 있으면 이에 따라 매연 발생이 증가할 수 있다는 것을 의미한다.

Fig. 3은 순수에틸렌 화염과 톨루엔을 3%, 5%, 10% 및 20% 혼합화염에 대하여 시간에 따른 C_6H_6 농도를 나타낸다. 톨루엔의 혼합비율이 증가할수록 시간에 따른 C_6H_6 의 농도가 증가하는 것을 알 수 있다. 이것은 한 점에 대한 국부적인 결과이지만 톨루엔이 증가할수록 벤젠의 농도가 증가하여 벤젠고리 생성의 증가로 PAH가 증가해 매연 생성이 증가한다는 것을 의미한다.

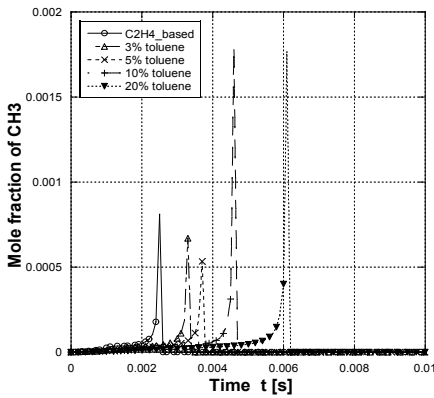


Fig. 2. CH_3 concentrations for ethylene-based flame and toluene mixture ratios of 0%, 3%, 5%, 10% and 20% in the counterflow diffusion flames as a function of time.

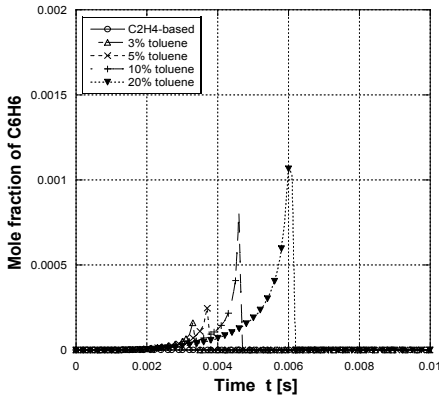


Fig. 3. C_6H_6 concentrations for the toluene mixture ratios of 0%, 3%, 5%, 10%, and 20% in the counterflow diffusion flames as a function of time.

2.2 ChemkinIII 기반 oppdif 코드에 의한 1-D 계산

본 연구에서 0-D 계산과 함께 1-D 계산을 수행하였다. 1-D 계산에 있어서는 ChemkinIII 기반의 Oppdif 코드(Lutz et al., 1997b)를 활용하여 계산을 수행하였다. 여기서는 온도분포, C_6H_6 를 비롯해 매연 생성을 영향을 미친다고 알려진 C_2H_2 , CH_3 등의 화학종에 대한 농도 분포에 대하여 계산을 수행하였다.

Fig. 4는 순수에틸렌 화염과 톨루엔을 3%, 5%, 10%, 및 20% 혼합한 혼합화염에 대하여 연료측 노즐로부터의 거리에 따른 온도분포를 나타낸다. Fig. 1에서 나타낸 것과 같이 톨루엔의 혼합비율이 낮아 에틸렌에 의한 의존성이 강해 혼합비에 따른 최고온도는 거의 동일하다는 것을 알 수 있다. 그에 반해 본 매연의 생성이 이루어지는 $2.5\text{ mm} < Z < 3.5\text{ mm}$ 에서는 순수 에틸렌 화염과 20% 톨루엔 혼합화염과의 비교에서 280 K 이상의 온도차이가 나는 것을 알 수 있다. 이러한 화염의 온도는 매연 생성에 영향을 미치는 아세틸렌의 생성에도 크게 영향을 미친

다. 여기서 매연 생성 영역으로의 $2.5\text{ mm} < Z < 3.5\text{ mm}$ 지정은 본 저자들에 의해 수행된 실험(최 등, 2009)으로부터의 결과이다.

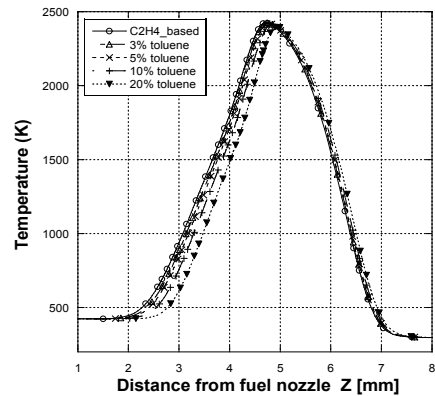


Fig. 4. Temperature distribution for ethylene-based flame and toluene mixture ratios of 0%, 3%, 5%, 10%, and 20% in the counterflow diffusion flames as a function of distance from the fuel nozzle.

Fig. 5는 순수에틸렌 화염과 톨루엔을 3%, 5%, 10% 및 20% 혼합한 혼합화염에 대하여 아세틸렌의 농도분포를 나타낸다. 순수에틸렌 화염의 경우가 매연 생성지역인 $2.5\text{ mm} < Z < 3.5\text{ mm}$ 에서 가장 높은 농도값을 나타낸다. 아세틸렌은 일반적으로 초기 매연 생성의 입자의 크기에 영향을 미치는데 이 결과만으로는 본다면 순수 에틸렌 화염의 경우에 가장 높은 매연 생성을 나타내야 할 것이다. 그러나 일반적인 톨루엔 혼합 실험결과에서는(Miller, 1996) 일반적으로 어느 일정이상 톨루엔의 혼합율이 증가할수록 매연 생성량은 증가한다고 하였다. 따라서 아세틸렌이 초기에는 영향을 미치지 않지만 전 과정에 대해서는 큰 영향을 미치지 않는다고 할 수 있겠다.

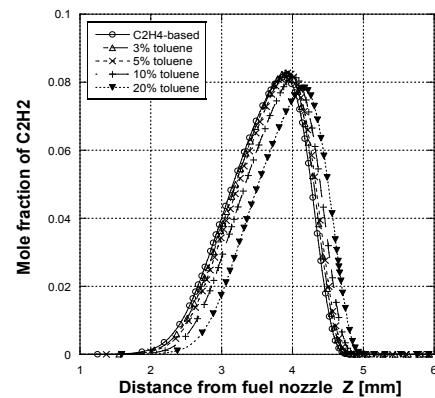


Fig. 5. C_2H_2 concentrations for ethylene-based flame and toluene mixture ratios of 0%, 3%, 5%, 10% and 20% in the counterflow diffusion flames as a function of distance from the fuel nozzle.

다음으로 초기 매연 생성에 영향을 미치는 메틸의 농도에 대하여 살펴보았다.

Fig. 6은 2.4 mm <math>Z < 3.6 \text{ mm}</math>의 온도가 낮은 지역에서의 순수 에틸렌 화염과 톨루엔을 3%, 5%, 10% 및 20% 혼합한 혼합 화염에 대하여 메틸의 농도분포를 나타낸다. Fig. 2의 0-D계산에서는 톨루엔이 10%와 20%로 혼합되었을 경우 순수 에틸렌보다 메틸의 농도가 증가하였다. 따라서 초기링 생성 및 매연의 생성에 메틸이 어느 정도 역할을 할 것이라 예상이 되었다. 그러나 1-D의 계산에서는 낮은 온도 지역인 $Z \leq 3.4 \text{ mm}$ 근방에서는 3%, 5% 톨루엔 혼합 화염의 경우에는 더 높은 메틸 농도 값을 가지고 있는 반면 10%, 20% 톨루엔 혼합 화염의 경우에는 더 낮은 메틸 농도 값을 가지고 있다. 즉, 이 결과는 일정한 소량 혼합율에서는 메틸 생성이 증가하여 매연의 초기 생성 고리에 영향을 미치나 일정 이상의 혼합율에서는 그 영향이 적다고 할 수 있다. 즉 톨루엔 혼합 화염의 경우 모든 경우에 대하여 매연 생성 증가에 영향을 미친다고는 할 수 없겠다.

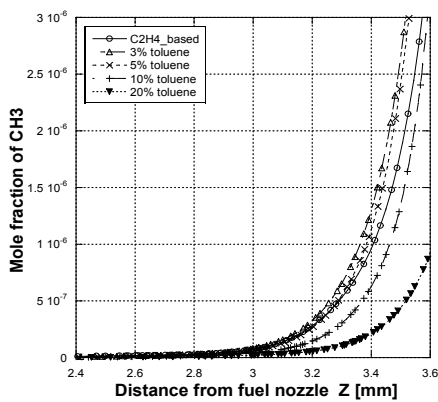


Fig. 6. CH_3 concentrations for ethylene-based flame and toluene mixture ratios of 0%, 3%, 5%, 10% and 20% in the counterflow diffusion flames as a function of distance from the fuel nozzle.

Fig. 7은 순수 에틸렌 화염과 톨루엔을 3%, 5%, 10% 및 20% 혼합한 혼합 화염에 대하여 벤젠의 농도분포를 나타낸다. 톨루엔의 혼합율이 증가함에 따라 벤젠의 농도가 증가하고 있다. 톨루엔이 증가할수록 초기 벤젠 고리 생성이 활성화 되고 이에 따라 PAH의 생성도 증가해 매연의 생성도 증가할 것으로 예상된다. 그러나 지금까지 벤젠의 생성에는 메틸 의한 영향이 크다고 알려져 왔는데 앞선 수치해석 결과들과 완전히 일치하는 결과를 보이지 않는다는 것을 알 수 있다.

이에 좀 더 자세하게 톨루엔 혼합 화염의 화학 반응에 대하여 알아보기 위하여 순수 에틸렌 화염과 톨루엔의 10% 혼합한 화염에 대한 반응식 및 각 반응식의 반응율(Reaction rate, Q)에 대하여 살펴보았다.

Table 1과 2는 순수 에틸렌 화염과 10% 톨루엔 혼합 화염에 대하여 주요 반응들에 대한 반응율을 나타낸 것이다. 여기서 사용된 반응 메커니즘은 Andrae and Head(2009)에 의해 제안된 것을 사용하였다. 이 메커니즘은 143 화학종과 672 반응을 다루

고 있다. 표에서 알 수 있듯이 순수 에틸렌 화염의 경우 $\text{C}_6\text{H}_5 + \text{H}_2 \leftrightarrow \text{C}_6\text{H}_6 + \text{H}$ (R75)의 반응이 벤젠 생성에 있어 전체의 92.71%로 지배적이고, 10% 톨루엔 혼합 화염의 경우 벤젠 생성을 위한 주반응은 $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 + \text{H} \leftrightarrow \text{C}_6\text{H}_6 + \text{CH}_3$ (R8)와 $\text{C}_6\text{H}_5 + \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 \leftrightarrow \text{C}_6\text{H}_6 + \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2$ (R11)이다. 이 결과로부터 지금까지 알려져 왔던 메틸(CH_3)에 의한 반응도 어느 정도 영향을 미치나 톨루엔 혼합 화염의 경우에는 H 라디칼에 의한 반응율의 영향을 많이 받는다는 것을 알 수 있다. 따라서 본 연구의 대상인 톨루엔 혼합 화염의 경우 벤젠 생성 고리를 통한 PAH 생성과 매연 생성에 있어 아세틸렌, 메틸 등도 중요한 역할을 하나 H 라디칼의 반응율이 크게 영향을 미친다는 것을 알 수 있다.

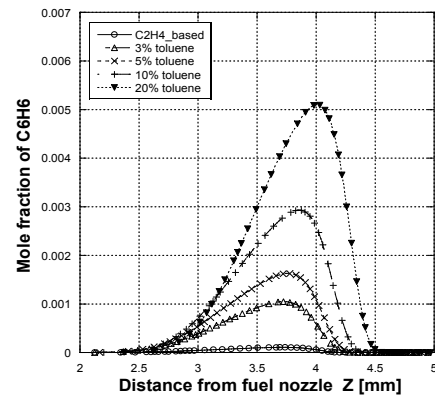


Fig. 7. C_6H_6 concentrations for ethylene-based flame and toluene mixture ratios of 0%, 3%, 5%, 10% and 20% in the counterflow diffusion flames as a function of distance from the fuel nozzle.

4. 결론

순수 에틸렌 대향류 확산 화염에 톨루엔의 혼합에 따른 매연 생성 특성을 조사하기 위하여 CHEMKINIII 기반의 Senkin과 oppdif 코드를 이용해 각각 0-D 계산과 1-D 계산을 수행하였다.

Senkin에 의한 수치 결과에서는 지금까지 벤젠 생성 고리에 영향을 미치는 메틸의 농도가 톨루엔의 증가함 함께 증가하여 메틸의 영향이 어느 정도 중요한 역할을 한다는 것을 알 수 있었다. 또한 oppdif 코드를 활용한 1-D 계산에서는 화염 온도의 경우 순수 에틸렌 화염이 가장 높았으며, 이에 따른 아세틸렌의 농도도 순수 에틸렌 화염의 경우가 가장 높았다. 그러나 메틸 농도의 경우 0-D 계산의 결과와는 달리 낮은 온도 지역에서 3%와 5% 톨루엔 혼합 화염의 경우에는 순수 에틸렌 화염의 메틸 농도보다 높았으나 10% 및 20% 톨루엔의 혼합 화염의 경우에는 낮았다. 이 결과는 메틸이 소량의 혼합에서는 벤젠 고리 생성에 대하여 영향을 미치나 일정 이상의 혼합율에 대해서는 그 영향이 적을 것이라는 것을 의미한다. 이에 순수 에틸렌 화염과 10% 톨루엔 혼합 화염에 대하여 벤젠 생성에 대한 전체적인 화학 반응 및 반응율을 살펴 본 결과 순수 에틸렌 화염의 경

톨루엔 혼합에 따른 대항류 확산화염 내 매연 생성에 대한 수치적 연구

우 $C_6H_5 + H_2 \leftrightarrow C_6H_6 + H$ (R75)에 의한 벤젠 생성이 지배적이었고, 10% 톨루엔 혼합 화염의 경우 $C_6H_5CH_3 + H \leftrightarrow C_6H_6 + CH_3$ (R8)와 $C_6H_5 + C_6H_5CH_3 \leftrightarrow C_6H_6 + C_6H_5CH_2$ (R11)인 것을 알 수 있었다. 이 결과로부터 톨루엔 혼합화염의 경우 벤젠 생성 고리에 있어 메틸도 어느 정도 중요한 역할을 하나 H 라디칼에 의한 영향도 매우 크게 작용한다는 알 수 있었다.

Table 1. Reactions for pure ethylene flame

Step (Num.)	Reaction	Reaction rate, Q (moles/cm ³ s)	Q_percentage(%)
75	$C_6H_5 + H_2 = C_6H_6 + H$	9.317E-07	92.71
69	$C_6H_5 + H = C_6H_6$	8.070E-08	8.03
66	$C_6H_6 + OH = C_6H_5 + H_2O$	-2.759E-08	-2.74
8	$C_6H_5CH_3 + H = C_6H_6 + CH_3$	2.632E-08	2.62
85	$C_6H_5OH + H = C_6H_6 + O H$	-4.510E-09	-0.45
56	$C_6H_5CHCH_2 = C_6H_6 + C_2H_2$	-2.590E-09	-0.26
11	$C_6H_5 + C_6H_5CH_3 = C_6H_6 + C_6H_5CH_2$	7.761E-10	0.08
118	$C_5H_6 + C_2H_3 = C_6H_6 + CH_3$	1.072E-10	0.01
120	$C_5H_6 + C_6H_5 = C_6H_6 + C_5H_5$	3.528E-11	0.00
48	$C_6H_5CH_2OH + H = C_6H_6 + CH_2OH$	1.838E-11	0.00
39	$C_6H_5CHO + H = C_6H_6 + HCO$	1.153E-11	0.00
58	$OC_6H_4CH_3 = C_6H_6 + H + CO$	1.104E-11	0.00
64	$C_6H_6 + O = C_6H_5O + H$	5.443E-12	0.00
92	$C_6H_5OH + C_6H_5 = C_6H_5O + C_6H_6$	3.520E-12	0.00
50	$C_6H_5CH_2OH + C_6H_5 = C_6H_5CHO + C_6H_6 + H$	1.510E-13	0.00
43	$C_6H_5 + C_6H_5CHO = C_6H_6 + C_6H_5CO$	4.792E-14	0.00
67	$C_6H_6 + O_2 = C_6H_5 + HO_2$	-6.608E-15	0.00
65	$C_6H_6 + O = C_6H_5 + OH$	-4.536E-15	0.00
623	$C_6H_5 + C_8H_{18} = AC_8H_{17} + C_6H_6$	-1.307E-30	0.00
618	$C_6H_5 + C_7H_{16} = C_7H_{15-2} + C_6H_6$	-7.942E-31	0.00
617	$C_6H_5 + C_7H_{16} = C_7H_{15-1} + C_6H_6$	-5.108E-32	0.00
		1.005E-06	100.00

Table 2. Reactions for 10% toluene mixture flame

Step (Num.)	Reaction	Reaction rate (moles/cm ³ s)	Q_percentage(%)
8	$C_6H_5CH_3 + H = C_6H_6 + CH_3$	1.277E-05	46.01
11	$C_6H_5 + C_6H_5CH_3 = C_6H_6 + C_6H_5CH_2$	7.098E-06	25.57
75	$C_6H_5 + H_2 = C_6H_6 + H$	7.038E-06	25.35
69	$C_6H_5 + H = C_6H_6$	1.231E-06	4.43
66	$C_6H_6 + OH = C_6H_5 + H_2O$	-2.700E-07	-0.97
85	$C_6H_5OH + H = C_6H_6 + OH$	-8.649E-08	-0.31
56	$C_6H_5CHCH_2 = C_6H_6 + C_2H_2$	-5.583E-08	-0.20
120	$C_5H_6 + C_6H_5 = C_6H_6 + C_5H_5$	1.951E-08	0.07
118	$C_5H_6 + C_2H_3 = C_6H_6 + CH_3$	4.243E-09	0.02
48	$C_6H_5CH_2OH + H = C_6H_6 + CH_2OH$	4.194E-09	0.02
58	$OC_6H_4CH_3 = C_6H_6 + H + CO$	2.362E-09	0.01
92	$C_6H_5OH + C_6H_5 = C_6H_5O + C_6H_6$	1.848E-09	0.01
39	$C_6H_5CHO + H = C_6H_6 + HCO$	6.082E-10	0.00
50	$C_6H_5CH_2OH + C_6H_5 = C_6H_5CHO + C_6H_6 + H$	5.741E-10	0.00
64	$C_6H_6 + O = C_6H_5O + H$	5.322E-11	0.00
43	$C_6H_5 + C_6H_5CHO = C_6H_6 + C_6H_5CO$	4.188E-11	0.00
65	$C_6H_6 + O = C_6H_5 + OH$	-4.156E-13	0.00
67	$C_6H_6 + O_2 = C_6H_5 + HO_2$	-2.497E-14	0.00
623	$C_6H_5 + C_8H_{18} = AC_8H_{17} + C_6H_6$	-6.643E-28	0.00
618	$C_6H_5 + C_7H_{16} = C_7H_{15-2} + C_6H_6$	-3.344E-29	0.00
617	$C_6H_5 + C_7H_{16} = C_7H_{15-1} + C_6H_6$	-1.067E-29	0.00
		2.776E-05	100.00

후 기

이 연구는 2009년도 한국해양대학교 신진교수정착연구비 지원으로 이루어졌으며, 이에 감사드립니다.

참 고 문 헌

- [1] 최재혁, 이경우, 김만웅, 최병철, 임인규(2009), 액체연료의 매연 및 PAH 생성특성에 관한 연구, 한국마린엔지니어링 학회 전기학술대회, pp. 145-147.
- [2] 한국자동차공학회(2010), 2030 자동차 기술 전망, 사단법인 한국자동차공학회, pp. 90-156.
- [3] Andrae, J. C. G. and R. A. Head(2009), HCCI experiments with gasoline surrogate fuels modeled by a semi detailed chemical kinetic model Original, Combustion and Flame 156, pp. 842-851.
- [4] Choi, B. C., S. K. Choi and S. H. Chung(2011a), Soot formation characteristics of gasoline surrogate fuels in counterflow diffusion flames, Proceedings of the combustion institute 33, pp. 606-616.
- [5] Choi, B. C., S. K. Choi, S. H. Chung, J. S. Kim and J. H. Choi(2011b), Experimental and numerical investigation of fuel mixing effects on soot structure in counterflow diffusion flames, International Journal of Automotive Technology, Vol. 12, No. 2, pp. 183-191.
- [6] D'Anna, A., A. Violi and A. D'Alessio(2000), Modeling the rich combustion of aliphatic hydrocarbons, Combust. Flame, Vol. 121, pp. 418-429.
- [7] Frenklach, M., D. W. Clary, C. William, J. R. Gardiner and E. S. Stephen(1984) Detailed Kinetic Modeling of Soot Formation in Shock-Tube Pyrolysis of Acetylene, 20th Proc. Combust. Inst., pp. 887-901.
- [8] Glassman, I.(1988), Soot Formation in Combustion Process, 22th Proc. Combust. Inst., pp. 295-311.
- [9] Hernandez, J. J., J. Sanz-Argent, J. Benajes and S. Molina(2008), Selection of a Diesel Fuel Surrogate for the Prediction of Auto-ignition under HCCI Engine Conditions, Fuel, Vol. 87, No. 6, pp. 655-665.
- [10] Kang, K. T., J. Y. Hwang, S. H. Chung and W. Lee(1997), Soot zone structure and sooting limit in diffusion flames: comparison of counterflow and co-flow flames, Combust. Flame, Vol. 109, pp. 266-281.
- [11] Marinov, N. M., W. J. Pitz, C. K. Westbrook, A. E. Lutz, A. M. Vincitore and S. M. Senkan(1998), Chemical Kinetic Modeling of a Methane Opposed-Flow Diffusion Flame and Comparison to Experiments, Symposium International on Combustion, Vol. 27, Issue 1, pp. 605 - 613.
- [12] McEnally, C. S. and L. D. Pfefferle(2007), The effects of dimethyl ether and ethanol on benzene and soot formation in ethylene nonpremixed flames, Proc. Combust. Inst., Vol. 31, pp. 603-610.
- [13] Miller, J. A.(1996), Theory and Modeling in Combustion Chemistry, 26th Proc. Combust. Inst., pp. 461-480.
- [14] Lutz, A. E., R. J. Kee and J. A. Miller(1997a), SENKIN: A Fortran Program for Predicting Homogeneous Gas Phase Chemical Kinetics with Sensitivity Analysis, Report No. SAND87-8248, Sandia National Laboratories, pp. 4-30.
- [15] Lutz, A. E., R. J. Kee, J. F. Grcar and F. M. Rupley (1997b), OPPDIF: A Fortran Program for Computing Opposed - Flow Diffusion Flames, Report No. SAND96-8243, Sandia National Laboratories, pp. 3-33.
- [16] Randall L. Vander Wal., K. A. Jensen and M. Y. Choi(1997), Simultaneous Laser-Induced Emission of Soot and Polycyclic Aromatic Hydrocarbons Within a Gas-Jet Diffusion Flame, Combust. Flame Vol. 109, pp. 399-414.
- [17] Song, K. H., P. Nag, T. A. Lizinger and D. C. Haworth (2003), Effects of oxygenated additives on aromatic species in fuel-rich, premixed ethane combustion: a modeling study, Comb. Flame., Vol. 135, pp. 341-349.
- [18] Yoon, S. S., S. M. Lee and S. H. Chung(2005), Effect of mixing methane, ethane, propane, and propene on the synergistic effect of PAH and soot formation in ethylene-base counterflow diffusion flames, Proc. Combust. Inst., Vol. 30, pp. 1417-1424.
- [19] Yoon, S. S., D. H. Ahn and S. H. Chung(2008), Synergistic effect of mixing dimethyl ether with methane, ethane, propane, and ethylene fuels on polycyclic aromatic hydrocarbon and soot formation , Comb. Flame., Vol. 154, pp. 368-377.

원고접수일 : 2012년 01월 26일

원고수정일 : 2012년 03월 13일 (1차)

2012년 04월 10일 (2차)

게재확정일 : 2012년 04월 23일