

10. Journal of Ozone: Science & Engineering

Volume 29, 2007 - Issue 1, Pages 55-63

Original Articles

Development of Ozone Self-Decomposition Model for Engineering Design

工学設計のためのオゾン自己分解モデルの開発

Tadao Mizuno , Hiroshi Tsuno & Harumi Yamada

Abstract

Recently, due to the advancement of O_3/H_2O_2 treatment processes, it has been necessary to further develop the ozone self-decomposition radical model, which includes a variety of radical reactions, because the hydroxyl radical concentration as well as the ozone concentration must be taken into consideration. In this study, an ozone self-decomposition model that is meaningful for environmental engineering design under the practically encountered pH condition in the time scale of water treatment is proposed. First, an overall description model of ozone self-decomposition is developed based on the experimental results. The evaluation clarifies that the ozone self-decomposition can be formulated by a second-order reaction and the rate constant is enhanced 5 times and 2.2 times with increase of one pH unit and $5^\circ C$ increase of temperature, respectively. Then a radical reaction model was developed. All of the reaction rate constants included in the model are obtained from the literature review except for the reaction rate constant of ozone with hydroxyl radical, which is obtained as $9.0 \times 10^5 M^{-1}s^{-1}$ based on experimental data. Good agreements of calculated results by the model with experimental results under the pH range from 2.7 to 7.8 over 10 minutes are obtained. This radical model of ozone self-decomposition will be applicable in analyzing other reactions, such as the effect of bicarbonate/carbonate ion on ozone self-decomposition, reaction with organic matter, the fate of micropollutants and by-products with ozone as well as hydroxyl radical.

最近、 O_3/H_2O_2 処理プロセスの進歩により、ヒドロキシルラジカル濃度とオゾン濃度を考慮する必要があるため、さまざまなラジカル反応を含むオゾン自己分解ラジカルモデルをさらに開発する必要がありました。本研究では、水処理の時間スケールにおいて実際に遭遇する pH 条件下での環境工学設計にとって意味のあるオゾン自己分解モデルを提案する。まず、実験結果に基づいてオゾン自己分解の全体記述モデルを開発した。評価は、オゾン自己分解は二次反応によって定式化でき、速度定数は pH の 1 単位の増加と $5^\circ C$ の温度上昇でそれぞれ 5 倍と 2.2 倍に増強されることを明らかにした。次にラジカル反応モデルを開発した。

モデルに含まれるすべての反応速度定数は、実験データに基づいて $9.0 \times 10^5 M^{-1}s^{-1}$ として得られるヒドロキシルラジカルとオゾンの反応速度定数を除いて、文献レビューから得られる。モデルによる計算結果と 2.7 から 7.8 の pH 範囲での 10 分間の実験結果との良い一致が得られた。オゾン自己分解のこのラジカルモデルは、オゾン自己分解に対する重炭酸塩/炭酸イオンの影響、有機物との反応、微量汚染物質の運命、およびオゾンとヒドロキシルラジカルとの副産物のなど、他の反応の分析に適用可能である。

Keywords: Ozone, Self-Decomposition, Model, Hydroxyl Radical, Engineering Design

キーワード：オゾン、自己分解、モデル、ヒドロキシルラジカル、工学設計