

アルミナ - カーボン系レンガにおける アルミナと炭素の結合性の理論的研究

○本泉 光、片岡 洋右

法政大学大学院工学研究科物質化学専攻(〒184-8584 小金井市梶野町 3-7-2)

【緒言】

近年、鉄鋼業の技術革新が進み、連続鋳造法など粘土系の耐火物では対応できなくなり、これまで様々なカーボンボンド系の耐火物が開発されている。その一つに、アルミナ - カーボン系レンガという物質がある。これはアルミナと炭素を主原料とし、フェノール樹脂等の熱硬化性樹脂や金属粉を添加して製造することができる。添加された樹脂は数千何百度で焼成されることにより、炭素以外の元素、すなわち水素や酸素等がまわりの炭素と化合して二酸化炭素、メタン等の分解ガスとなり放出される。よって、最後に炭素の網目骨格だけが残り、アモルファスカーボンとなって、それがアルミナと化学結合しカーボンボンドを形成しているのではないかと考えられているが、これまでにその化学結合を示唆するデータは提示されていない。しかし、透過電子顕微鏡の観察結果からアルミナの c 軸に直交な面と炭素が結合していることが分かっている。そこで本研究では分子軌道法を用いて、アルミナと炭素の相互作用エネルギーを計算し、その結果からアルミナと炭素がどのように結合しているのかについて考察した。

【方法】

アルミナは c 軸方向にアルミニウム原子と酸素原子の層が交互に重なった周期的な構造をしているので、そのいずれかが炭素との結合を形成しているものと考えられる。よって、アルミナの c 軸に直交な面においてアルミニウム原子と酸素原子それぞれの層が露出する面を作り、それぞれの面に炭素を 0.1Å ずつ近づけて各構造でのポテンシャルエネルギーを計算し、その計算結果から次式でアルミナと炭素の相互作用エネルギー E_i を求めた。

$$E_i = E_{Al_{16}O_{24} + nC} - (E_{Al_{16}O_{24}} + E_{nC})$$

使用ソフトは Gaussian03、また、アルミナはイオン結晶であることから、HF/6-31G(d)で計算を行った。

【結果と考察】

これまで、炭素 1 個をそれぞれの面に近づけた時、酸素面に炭素を配置した方がエネルギー的に安定であることが分かっている。そこで同じように面の中心に炭素 3 個を正三角形の形で置いた時の相互作用エネルギーを計算したところ、やはり酸素面に置いた方がエネルギー的に安定であった。しかし、これは面の中心にだけ炭素を配置したことで、面と面の相互作用エネルギーというよりは面と点の相互作用エネルギーという意味合いが強くなっていると思われるので、発表当日には炭素を 1 2 個まで増やした時の結果も報告したいと思っている。

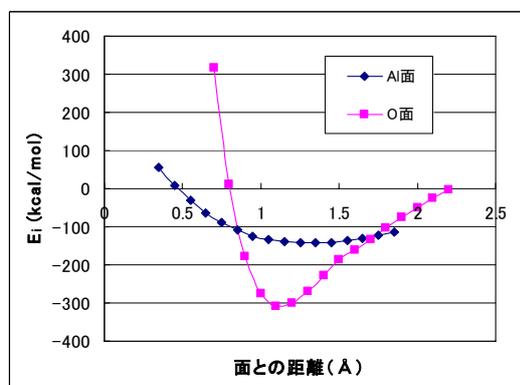


図.それぞれの面と炭素 3 個の相互作用エネルギー