

酸素欠陥に関するムライトの構造

○長島啓、内田 希、中嶋義晴

長岡技術科学大学（〒940-2188 新潟県長岡市上富岡町1603-1）

【緒言】

ムライトは、結晶と言いつつランダムな欠陥が存在して不定非化合物であり、完全な結晶と言えない。ムライト (Fig.1) は、シリカとアルミナの相図で唯一安定に存在する物質で、その組成式は $Al_4+2xSi_2-2xO_{10-x}$ (X : 単位格子当たりの欠陥数、 $0.2 < X < 0.5$) である。天然でほとんど存在しないにもかかわらず、優れた熱的・機械的性質のために古くから利用され、現在では、先進セラミック材料として注目されてきている。その結晶構造は、 c 軸に沿って平行に AlO_6 八面体鎖が並んでおり、この八面体同士を四面体 AlO_4 と SiO_4 が架橋している。また、構造的にシリマナイト (Al_2SiO_5) と似通っており、ムライトの論文中で頻繁に見かけるが、ムライトにはシリマナイトにない配列、酸素欠陥がある。この酸素欠陥は、四面体 AlO_4 と SiO_4 同士の結合を架橋している酸素原子を取り除いて、隣接する四面体 AlO_4 と SiO_4 の架橋酸素原子に新たな結合をつくる。Al 原子が増加するに従って、酸素欠陥数が増加していく。その様子を電子顕微鏡で確認すると $3Al_2O_3 \cdot 2SiO_2$ の組成では、比較的規則正しい像が映し出されるが、Al 原子を多く含む $2Al_2O_3 \cdot 2SiO_2$ の組成になってくるとランダムな構造になり、酸素欠陥の影響を受けていることが分かる。このことから、X 線データを基にムライト完全結晶を出発原料としてモデルづくり、そのモデルに酸素欠陥を逐次導入しつつ、半経験的分子軌道法で安定性を検討した。

【方法】

ムライトの構造解析を行うため半経験的分軌道法を用いた。使用するキーワードは EF PM6 である。

【結果】

狙いとしては、MO を用いてムライトの不規則配列構造の詳細を解析することにある。また、将来的に MO と MD によってムライトのモデルを計算し、MO で微視的なモデル計算を行い、MD で巨視的なモデルを計算しようと考えている。

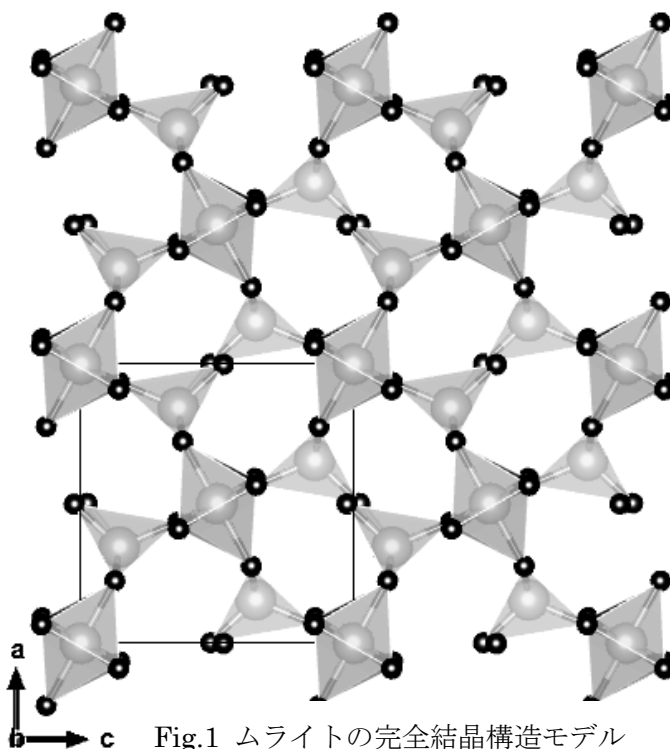


Fig.1 ムライトの完全結晶構造モデル