

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、結晶と言いながらランダムな欠陥が存在してい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 $Al_{4+2x}Si_{2-2x}O_{10-x}$ (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。

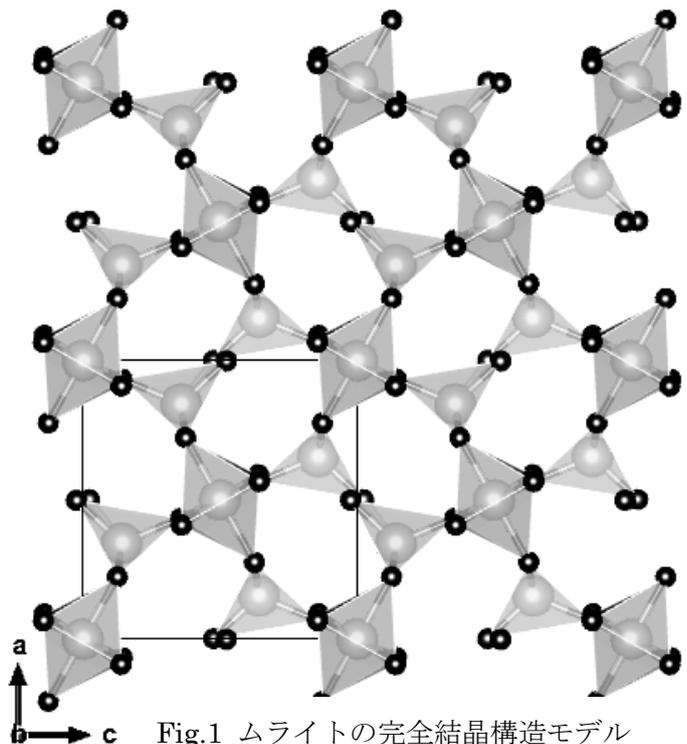


Fig.1 ムライトの完全結晶構造モデル