

## 分子軌道法を用いた不定形耐火物中でのシリカフェームの挙動の研究

○高野滉一, 内田 希

長岡技術科学大学大学院 (〒940-2188 新潟県長岡市上富岡町 1603-1)

### 【緒言】

製鐵工程における耐火物の役割は、その耐火性・断熱性による炉の保護、工程の省エネルギー化、スラグ制御等の、製鐵工程にとって必要不可欠なものであり、また、その材質が最終製品の品質に与える影響は大きい。

炉材用耐火物は築炉作業の機械化・省力化の観点から、定形(れんが)から、より生産性の高い不定形へと推移している。現在では、定形耐火物でしか対応できない過酷な環境(例えば連続鑄造用浸漬ノズル)で使用されるもの以外、ほぼ全て不定形耐火物に置き換わっており、鐵鋼メーカーにおける不定形耐火物の割合は70%を超える。

不定形耐火物は粉状や練土状の定まった形を持たない耐火物であり、 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{MgO}$ 、 $\text{Cr}_2\text{O}_3$ 、 $\text{ZrSiO}_4$ 等から成る。不定形耐火物は定形のように焼結による緻密化が高温での使用まで利用できないため、結合剤によって緻密化、及び粒子の均一分散、凝集等を行う。結合剤としては、粘土、コロイダルシリカ、シリカフェーム、リン酸アルミ、リン酸ナトリウム、パルプ廃液、フェノール樹脂等が用いられる。この中でもシリカフェームは耐食性・耐熱性に優れる低セメントキャストブル用の結合剤として注目を集めている<sup>1)</sup>。

シリカフェームは直径0.1  $\mu\text{m}$ 以下の非晶質球状微粒子であり、高いポズラン活性を持つ。結合剤として用いた場合には、耐火物の緻密化や硬化時間を短縮させる効果が認められているが、その詳細について分かっていない。

本研究の目的は、分子軌道計算を用いることにより、不定形耐火物中でシリカフェームがどのような挙動をしているか解明することである。

### 【方法】

計算には半経験的分子軌道法 PM7 を使用する。反応に関与するのは不定形耐火物、水、シリカフェームであり、不定形耐火物として $\alpha$ -アルミナ、シリカフェームのモデルとして、Nedelec らの結果<sup>2)</sup>を参考にし、 $\text{Si}_6\text{O}_{18}\text{H}_6$ の12員環(Fig.1)を用いて計算を行う。

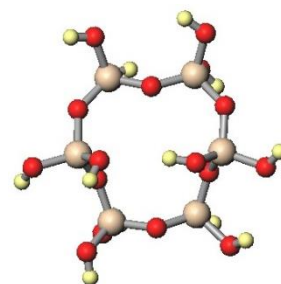


Fig.1 シリカフェームモデル

### 【結果】

計算結果については当日発表する。

### 【参考文献】

- 1) 平櫛敬資, “技術の系統化調査報告 共同研究編 第3集”, 国立科学博物館 (2009)
- 2) J.M.Nedelec, L.L.Hench, Journal of Non-Crystalline **255** 163-170 (1999)