

コンピュータ利用によるセラミックスの材料設計

- ダイオキシンの除去を例として - No.98030

キーワード：材料設計、コンピュータシミュレーション、ゼオライト、ダイオキシン

概要 コンピュータを利用したセラミックスの材料設計について、有毒なダイオキシンを除去するゼオライトの探索を行った。その結果、FAUタイプの可能性が高いことが判った。

材料設計におけるコンピュータ

工業製品の設計においてコンピュータの利用が普及してきた。部品の材料設計においても分野によってはコンピュータを利用するケースがある。実験室では、材料を開発する過程で数多くの試行錯誤を繰り返すプロセスがあり、多大の労力と時間を使う。しかし一方では、開発効率を上げるため試行錯誤実験を少しでも減らせるよう、ある程度絞り込んだ設計を行ってから実験したいという強い要求がある。

セラミックス材料開発の分野における材料設計は、微細構造や組織が与える物性への影響が大きく、医薬品や金属の分野と比べてより複雑で高度な技術が必要となる。このためこの分野では、コンピュータ利用は遅れている。

本シートでは、最近、問題となっているダイオキシンを取り上げて、これを除去する吸着剤としてのゼオライトの可能性を探った例について報告する。

ゼオライト

現在知られているゼオライトは種類が多く、構造も、化学組成も多種多様である。基本構造としては、図1の(a)や(b)のようなものが立体的に連結して構成されており、構造内にかご状の空洞やそれらを相互に結ぶトンネルが存在する多孔体である。無数の空洞に分子を取り込み吸着することにより分子を除去する性質を持つ。ゼオライトの各基本構造の名称は、IUPACの勧めによりアルファベット3文字による略号が使われる(文献参照)。

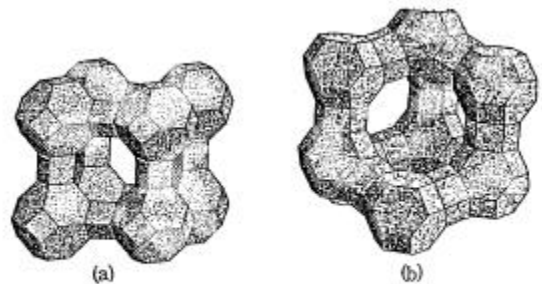


図1 ゼオライトの基本構造の例

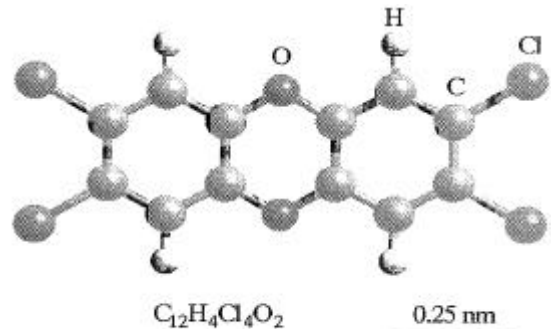


図2 ダイオキシンの分子モデル

ダイオキシンの吸着除去

コンピュータシミュレーションの装置は、Silicon graphics社のIndigo2を、ソフトウェアはCerius2を用い、以下のような流れで設計を行った。1) ダイオキシンの3次元分子モデルを図2に示すように原子を組み合わせて作成する。2) 各種のゼオライト結晶構造を3次元モデルとして作成する。FAUタイプのゼオライトでは図3に示すように孔が見られる(穴の1つを矢印で示す)。3) ゼオライトの分子モデルが存在する空間にダイオキシン分子のモデルを一定量導入して自由に運動させる。一定時間後の状態が図3であるが、孔の中にダイオキシン分子が入り込み吸

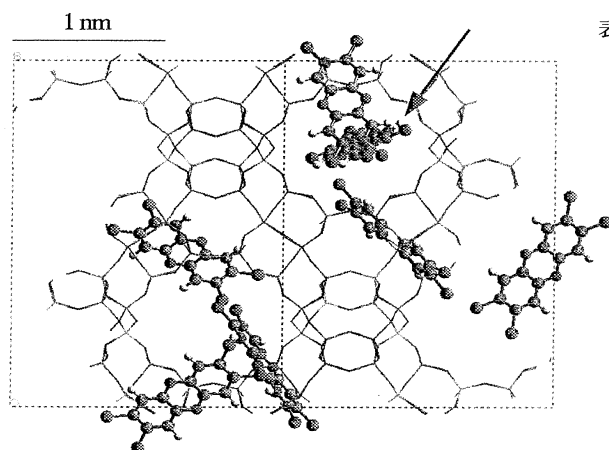


図3 ゼオライトに対するダイオキシンの吸着シミュレーション

着されている様子が見られる。4) ゼオライトの1単位格子あたりの吸着ダイオキシンの平均分子数と算出した吸着エネルギーから、吸着され易さを判定する。

各種ゼオライトについてシミュレーションした結果を表1に示す。FAUタイプではダイオキシンの導入圧力が400kPaのとき単位格子あたりの平均吸着分子数が14個であった。導入圧力を0.1kPaまで減少させた希薄濃度でも吸着分子が14個と変わらず、性能の高さがうかがえる。FAU(Ti⁺)タイプはFAUタイプのカルシウムイオンをチタンイオンで置換したものであるが、単位格子あたりの吸着分子数は15個でFAUタイプと同じ程度(誤差範囲内)と考えられ、吸着エネルギーの比較からFAUタイプの方が優れていると判断できる。同様に、EMT及びAFTタイプはFAUタイプより性能が劣る。その他のタイプではダイオキシンの吸着が一切見られなかった。これ以外にもリンを含む18種のタイプのゼオライトについてシミュレーションを行ったが、これらは全てダイオキシンの吸着が一切見られなかった。

これらのことからFAUタイプの吸着特性が高いと推定できる。実験により確認ができればダイオキシン除去用の材料として広く利用される可能性がある。

作成者 材料技術部 機能性材料グループ
発行日 1998年10月30日

表1 各種ゼオライトにおけるダイオキシンの吸着能力(温度300K)

ゼオライトの型	導入圧力(kPa)	分子数(個)	吸着エネルギー(kcal/mol)
FAU	400	14	-534
FAU	0.1	14	-534
FAU(Ti ⁺)	400	15	-484
FAU(Ti ⁺)	0.1	15	-484
EMT	400	7.4	-272
EMT	0.1	6.4	-239
AFT	400	1.0	-26
AFT	0.1	1.0	-26
LTA(-5A)	400	0	0
LTA(-5A)	0.1	0	0
MFS(ZSM-57)	400	0	0
MFS(ZSM-57)	0.1	0	0
MF1, DDR, ABW	400	0	0
MF1, DDR, ABW	0.1	0	0

各種分野へのコンピュータ利用

本シートでは、セラミックスとして、多孔体材料であるゼオライトを取り上げて、有毒物質であるダイオキシンを除去する能力について、コンピュータシミュレーション上で比較する手法を紹介した。人が快適に過ごせるアメニティ空間を創出するにはこのような有毒物質や不快臭を除去することが必要であり、我々も各種物質の除去材料に関してコンピュータシミュレーションにより検討している。

また、全く異なる手法としては、我々はセラミックスの強度を向上させることを目的として、粒界構造、粒界結合力の解析を試みている。解析が進むと強度向上のための指針のいくつかが明らかになることが予想される。さらに、セラミックスの電子状態をシミュレーションして物性と関連付け、物性向上の指針を得るといった観点からの検討も行っている。

このように多くの分野の材料開発において、コンピュータは試行錯誤を減らし効率的に開発を成功に導くための道具として有益である。

文献

Meier, W.M., Atlas of Zeolite Structure Types, Structure Commission of the International Zeolite Association, 1992

稲村 偉 Phone: 0725-51-2658