

Title	MCM-41のモデリングおよび微細構造の解析
Author(s)	東, 和彦
Citation	
Issue Date	2001-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	none
URL	<a href="http://hdl.handle.net/10119/2758">http://hdl.handle.net/10119/2758</a>
Rights	
Description	Supervisor:佐野 庸治, 材料科学研究科, 修士

【緒言】ヘキサゴナル構造を有するメソポーラスシリカ MCM-41 には、均一な 1 次元メソ細孔が規則的に配列している。そのため、大きな分子の関与する吸着や触媒反応などへの応用が期待されているが、その骨格構造はシリカのみから構成されるため、イオン交換能や触媒活性を示さない。そこで、ゼオライトと類似した機能の発現のために、そのシリケート骨格構造中への各種金属の導入が検討されている。しかし、その骨格構造中の原子配列は無定形に近く、細孔壁の表面状態および性質が未だ不明確であるため、高機能化の大きな妨げとなっている。本研究では、MCM-41 の微細構造に関する詳細な知見を得るために、実験的および計算化学的な両アプローチにより MCM-41 骨格構造の形成機構の解明を目的とした。

【実験およびシミュレーション】MCM-41 の合成は所定の方法により行なった。MCM-41 のモデリングには、分子動力学 (MD) 計算およびモンテカルロ (MC) 法を用いた。MD 計算は、河村らが開発した MXDTRICL を改良したものを用い、298.0 K、 $\Delta t = 0.1 \times 10^{-15}$  sec、4,000~12,000 steps、NVT アンサンブルの条件で行なった。MC 計算は、MSI 社の Cerius<sup>2</sup> を用いた。なお、ポテンシャルパラメータに burchart-UNIVERSAL potential、20.0 K、300,000 cycle の計算条件を用いた。

【結果および考察】Fig.1 に MCM-41 のモデリングを示す。ダミー原子を配列した MCM-41 単位格子 (A) に MC 計算を行なうと、層状に SiO<sub>2</sub> が発生した (B)。ダミー原子除去後のモデル (C-1) に MD 計算を行ない、原子緩和後のモデル (D-1) に積層する形でモデル (C-2) を組合せ MD 計算を行なった (D-2)。さらに、次の層に相当するモデルの組合せ、MD 計算の繰り返しによりモデルを構築した (D-3)。Fi.2 に実験およびシミュレーションにより得られた MCM-41 の XRD パターンを示す。シミュレーションより得られた XRD パターンは、実験結果と同様なヘキサゴナル構造特有の (100)、(110)、(200)、(210) の 4 つの回折ピークが観察され、今回構築したモデルの妥当性が確認された。このことは、MCM-41 骨格構造は、シリカ-棒状ミセル複合体のシリケート層に、シリケート種が次々と層状に凝集することによって形成されていくことを示唆している。

【Keywords】MCM-41、モデリング、微細構造、構造形成機構

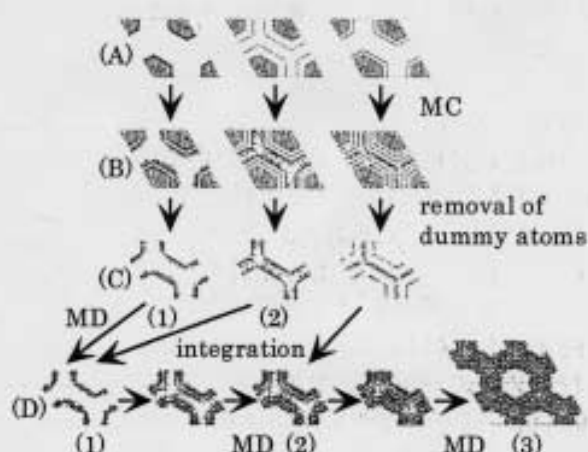


Fig. 1 Modeling of MCM-41.

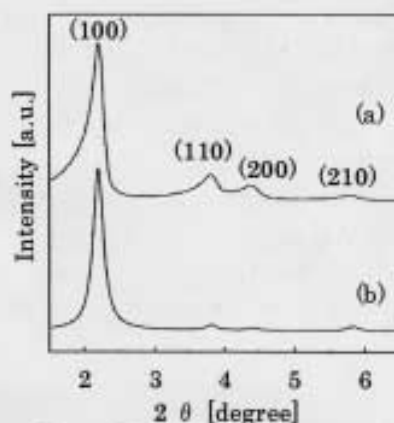


Fig. 2 XRD patterns of MCM-41.  
(a) Experiment, (b) Simulation