

異種元素を多量に固溶する Ca_2SiO_4 高温相の特異な結晶構造の解析と設計



キーワード 資源循環、酸化物固溶体、高温その場構造解析、構造不規則化

鈴木 賢紀 SUZUKI Masanori

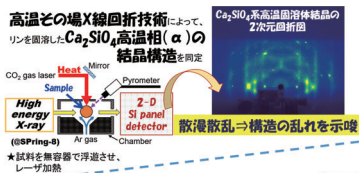
マテリアル生産科学専攻 准教授

材料エネルギー工学講座 界面制御工学領域 田中研究室



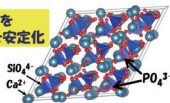
ここがポイント！【研究内容】

- 鉄鋼製造プロセスで溶融スラグ中に晶出し、異種元素（リン，P）を高濃度に固溶する α - Ca_2SiO_4 化合物の結晶構造と晶出過程を、放射光を用いた高温その場 X 線回折によって解析している。
- さらに、第一原理および分子動力学（MD）計算によって、異種元素を固溶した α 相化合物の原子配置シミュレーションを行っている。
- α - Ca_2SiO_4 へ異種元素が固溶すると、原子配置が自発的に不規則化することによって、結晶構造を安定化させることがわかった。この知見を応用し、リン以外にも様々な異種元素の固溶を可能とする α 相化合物の構造設計と作製を試みている。



不規則な原子配置を
自発的に形成し、構造を安定化

第一原理MD計算によって、
リンを固溶した α - Ca_2SiO_4 結晶の
原子配置のシミュレーション



応用分野

鉄鋼プロセス（高脱リン化）、土壌改質、有価資源回収、廃棄物汚染水の浄化（重金属除去）、等

論文・解説等

- [1] M. Suzuki, N. Umesaki, Y. Ishii : *J. Am. Ceram. Soc.*, Vol.104 (2021), DOI:10.1111/jace.18096.
- [2] M. Suzuki, H. Serizawa, N. Umesaki: *ISIJ Int.*, Vol.60 (2020), 2765.
- [3] M. Suzuki, S. Nakano, H. Serizawa, N. Umesaki: *ISIJ Int.*, Vol.60 (2020), 1127.

連絡先 URL

<http://www.mat.eng.osaka-u.ac.jp/msp2/MSP2-HomeJ.htm>

