

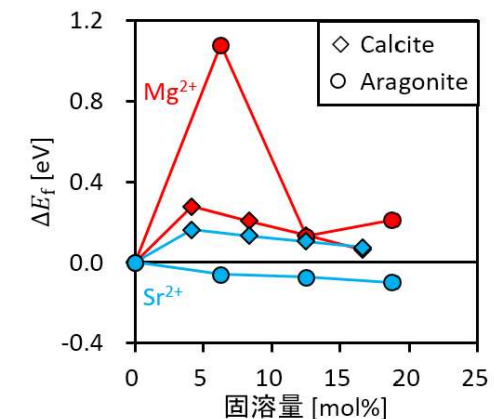
第一原理計算による炭酸カルシウムの陽イオン固溶機構の解明

名古屋大学大学院工学研究科 氏名 松永克志

目的 炭酸カルシウム CaCO_3 にはカルサイト、アラゴナイトなどの結晶多形が存在する。水溶液合成においてこれら各相の生成割合は、不純物となる2価陽イオンの種類や濃度に依存することが報告されている。しかし、この現象の起源は明らかとなっていない。本研究では第一原理計算を用いて、2価陽イオンの固溶状態を解明することを目的とした。

内容 計算解析にはDFT計算を用いた。カルサイトおよびアラゴナイトに様々な濃度の2価陽イオン(Mg^{2+} , Sr^{2+} など)を置換固溶させ、そのときの固溶エネルギーを求めた。

結果 Sr^{2+} の場合、カルサイト中への固溶エネルギーが常に正であるのに対し、アラゴナイト中のそれは常に負であった。したがって、 Sr^{2+} はアラゴナイトに容易に取り込まれると考えられる。一方、 Mg^{2+} ではカルサイト、アラゴナイト共に固溶エネルギーは正であったため、どちらの結晶においても Mg^{2+} は固溶しにくい。本研究より、 Sr^{2+} がアラゴナイト生成をより促進すると考えられる。



利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群

図 固溶エネルギーの固溶量依存性の計算結果