

## 新しい燃焼技術の生成物としての中空の八面体分子

Randall A. LaViolette and Michael T. Benson

Idaho National Engineering and Environmental Laboratory †

P.O. Box 1625, Idaho Falls ID 83415-2208

アイダホ国立工学・環境研究所の研究者達は、一連の中空八面体分子の構造上の特性および相対的な安定性を見積もりました。これらの分子は、極端な条件下での新しい燃焼技術の生成物であると考えられます。

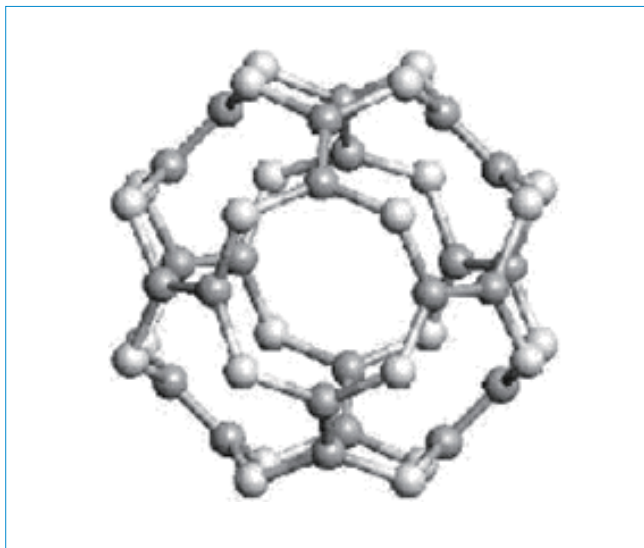


図1: 仮定された八面体X<sub>48</sub>分子。白色球:二重サイト; 暗色球:三重サイト。

### はじめに

フラーレンの発見以来、科学者および材料研究者は、炭素および元素周期律表でその周辺にある他の元素の新しい、開口部のある構造に特別の関心を持っています。アイダホ国立工学・環境研究所の研究者[1]は、一連のX<sub>48</sub>Y<sub>24</sub> (X=B, C, N, Al; Y=H, O) 分子の構造上の特性および相対的な安定性を計算するために、MSIの密度汎関数プログラムDMol<sup>3</sup>を使用しました(図1をご覧ください)。水素化物(Y=H)は、新しい種類の固体の先駆物質と考えることができますが、一方、酸化物(Y=O)はフラーレンに類似しており、SCRAMジェット[2]またはプラズマ焼却炉[3]のような新しい燃焼技術によって作ることができます。

### 結果

予備的な比較計算が、仮定されたC<sub>48</sub>分子[4]について繰り返されました。以前の結果が確認され、原子あたり152kcal/molというかなりの結合エネルギーが見つかりました。ついで、BIOVIAのDMol<sup>3</sup>プログラムを使用して一連のX<sub>48</sub>Y<sub>48</sub> (X=B, C, N, Al; Y=H, O) 分子を調べました。C<sub>48</sub>H<sub>48</sub>ダイマーは、C<sub>48</sub>H<sub>48</sub>分子から固体を作成する際の第1段階と考えることができます。電荷分析により、一般的に三重サイトより二重サイト上により多くの電荷があり、電荷の分離は、水素化物に対してよりも酸化物に対して大きいことが明らかになりました。この計算により、炭素の水素化物分子と酸化物分子が合成に対して最も有望な候補である化合物と予測されます。そして窒素の水素化物分子と酸化物分子は、一番期待薄という結果になります。

### Organization

Idaho National Engineering and Environmental Laboratory, USA

### Products

BIOVIA Materials Studio DMol<sup>3</sup>

### 参考文献

1. Randall A. LaViolette, Michael T. Benson, "Density functional calculations of hypothetical neutral hollow octahedral molecules with a 48-atom framework: Hydrides and oxides of boron, carbon, nitrogen, aluminum, and silicon", *J. Chem. Phys.* 112, 9269 (2000).
2. L. M. Chiappetta and J. J. Sangiovanni, *J. Propulsion* 7, 678 (1991).
3. *Heat Transfer in Thermal Plasma Processing*, HTD Vol. 161, edited by K. Etemadi and J.
4. B. I. Dunlap and R. Taylor, *J. Phys. Chem.* 98, 11018 (1994)