



[石炭の徹底研究]

石炭をミクロに分析する

石炭はさまざまな化学構造をもつ高分子から成る有機質と鉱物質から構成される固体資源です。石炭を効率よく利用するためには、その利用目的によってさまざまなミクロスケールの物性や構造に関する情報が必要となります。

石炭の元素組成

有機質の元素組成は石炭種によってさまざまですが、およそ $C_{100}H_{30-110}O_{3-40}N_{0.5-2}S_{0.1-3}$ のように表されます。無機質は、以下の主要元素と微量元素から構成されています。

◆主要無機元素

Si, Al, Ca, Fe, Mg, Na, Ti, K

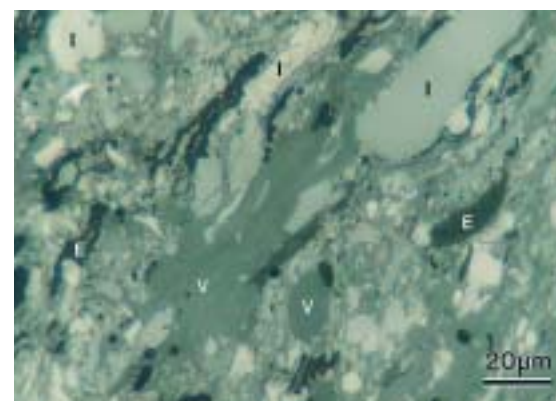
◆微量元素

Be, Se, V, Cr, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Ge, As, Hg, Pb, Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Ba, La, Ce, Nd, Sm など

石炭の組織をみる

石炭マセラル

石炭はおよそ3億5千万年前の石炭紀から数百万年前の新第三紀にかけて地中に堆積した植物が、菌類によって分解され、さらに地殻変動などの圧力によって炭化したものです。石炭がその時代に繁殖していた植物の樹木質からできているのは疑いのない事実です。光学顕微鏡による観察によって、石炭マセラル（組織）を確認することができます。



石炭マセラルの反射顕微鏡写真

- V: ビトリナイト。植物の木質部に由来。反射率が低い。
- E: エグジナイト。植物の葉、角皮、花粉、種子、水藻、および樹脂質に由来。反射率が非常に低い。
- I: イナーチナイト。植物の木質部、菌類に由来するが、強い酸化を受けているもの。反射率が高い。

石炭中の鉱物質

鉱物質の組成、存在形態や分散状態は、高温での燃焼、ガス化における石炭灰の生成メカニズムや挙動を解明するのに欠かせない基礎物性です。



石炭を研磨した表面の走査型電子顕微鏡写真
白く見える部分が鉱物質。
(提供: 出光興産)

◆代表的鉱物質

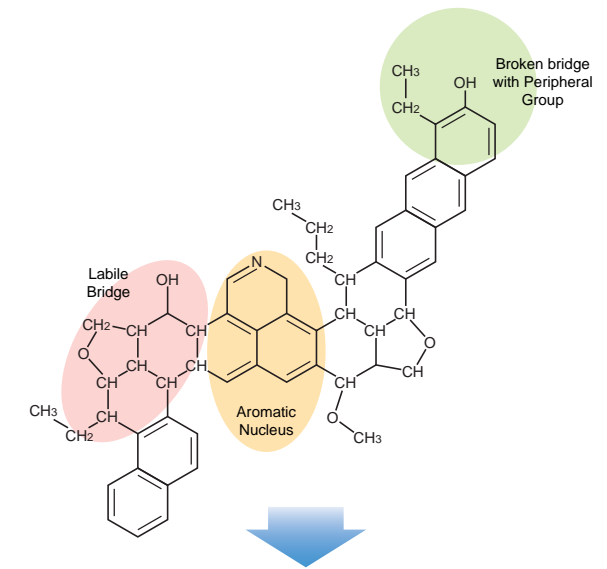
粘土鉱物 (カオリナイト $Al_2O_3 \cdot SiO_2 \cdot xH_2O$ など)
炭酸塩 (カルサイト $CaCO_3$ など)
硫化物 (パイライト FeS_2 など)
酸化物 (石英、 SiO_2 など)

◆有機質結合金属

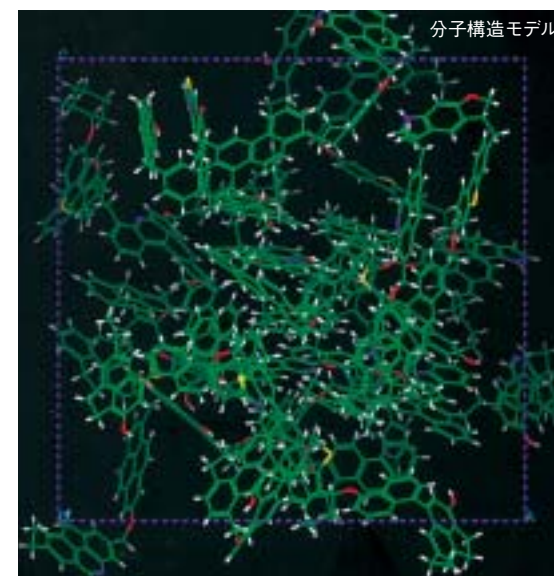
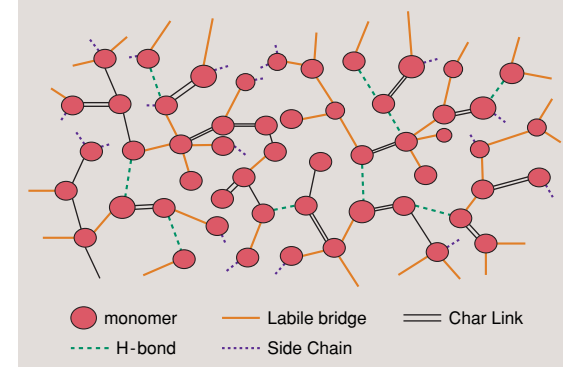
イオン交換性金属 ($-COO^-Na^+$ など)

石炭の分子構造を探る

石炭の有機質は、メチル基や水酸基などの官能基が結合したベンゼン環や多核芳香環を基本単位(クラスター)とし、これらがメチレン結合やエーテル結合などによって架橋された分子量数百~数千あるいはそれ以上のマクロ分子から構成されています。マクロ分子は、 $\pi-\pi$ 結合と呼ばれる芳香族平面間のファンデルワールス結合、水素結合、イオン結合などのいわゆる非共有結合によって架橋され、強固な三次元網目構造を形成しています。これらの分子間相互作用は、加熱時の石炭の物性変化や熱化学反応特性を支配する因子であることなどがわかってきました。



Bethe Latticeによる石炭結合形態のモデル化



分子構造モデル

コンピュータを利用した石炭化学の先端技術

パーコレーション理論とコンピュータを駆使した石炭熱分解シミュレーション

複雑な石炭構造をBethe Latticeの格子理論に基づき、モノマー及びLabile Link (分解しやすい結合)、Char Link (分解しない結合)、官能基、水素結合の4種類の結合形態でモデル化し、この結合の分解反応速度を熱分解モデルに従って定量化する、計算機シミュレーションによる研究が実施されています。これまで経験に頼ってきた石炭の世界も、石炭からベンゼン、メタンなどの様々な有用化学物質の生成量、液体成分(タール)の分子量分布の予測など、IT時代の石炭利用技術開発へと大きく前進しています。