

論文審査の結果の要旨および担当者

報告番号	※ 甲 第 14530 号
------	---------------

氏 名 畑 友輝

論文題目

Study on coal reactivity with molecular structural analysis toward developing coke manufacturing technology
(分子構造解析による石炭反応性評価のコークス製造基盤技術への展開)

論文審査担当者

主査	名古屋大学	未来社会創造機構	教授	則永 行庸
委員	名古屋大学	未来材料・システム研究所	教授	成瀬 一郎
委員	名古屋大学	工学研究科	准教授	小林 敬幸
委員	名古屋大学	未来社会創造機構	准教授	町田 洋

論文審査の結果の要旨

畑友輝君提出の論文「Study on coal reactivity with molecular structural analysis toward developing coke manufacturing technology (分子構造解析による石炭反応性評価の кокス製造基盤技術への展開)」は、鉄鋼業で用いるコークス原料である石炭を対象に、高強度コークス製造に必須となる石炭中の軟化・溶融成分や石炭を貯蔵する際のリスク要因となる自然発熱反応に着目して石炭およびコークス製造時の副生成物であるコールタールの化学構造を、固体 ^{13}C や ^{17}O 核磁気共鳴法を駆使した分子構造解析によって分子レベルで理解し、コークス化及び酸化反応性を評価した一連の研究を纏めたものである。各章の概要は以下の通りである。

第1章では、石炭から製造されるコークスおよび石炭の鉄鋼業における重要性、これまでのコークス製造技術、分子構造解析手法の一つである核磁気共鳴法を解説するとともに、既往の石炭分子構造解析と自然発熱反応に関する研究における課題を整理し、本研究の位置付けや意義を明らかにしている。

第2章では、コークス製造時における粘結性発現特性が異なる二種類の石炭に注目し、溶媒抽出・分画を行い、各成分の詳細な化学構造解析に基づいて平均的な分子構造モデルを提案している。

第3章では、第2章で得られた二種類の石炭の平均分子構造モデルを用い、分子動力学シミュレーションによる分子間相互作用の定量的評価を行っている。さらに、これらの 0°C から 600°C における温度依存性を調査し、コークス製造時の熱物性が、石炭分子の凝集構造におけるファンデルワールス力に支配されていること示す結果を得ている。

第4章では、石炭の自然発熱反応を引き起こす石炭を原料とし、酸化時の昇温曲線や発生ガス分析を検討した。さらに、得られた酸化炭の ^{13}C MAS NMRスペクトルの詳細解析によって、 80°C までの低温で調製された酸化炭に生じた僅かな分子構造の変化を捉えることに成功している。

第5章では、石炭の自然発熱反応における酸素官能基の生成に着目するために、質量数17の同位体酸素を濃縮したガス中で酸化炭を調製し、得られた酸化炭の ^{17}O MAS NMRスペクトル測定および発生ガスを分析した。その結果、石炭中の酸素官能基が酸化反応の起点となっていることや、生成する酸素官能基の種類と起点が温度に依存することを示した。さらに、水によっても石炭の酸化反応が進行し、酸素ガスの存在により水と石炭の反応が促進されることを明らかにしている。

第6章では、コールタールについて、質量分析と ^1H NMRスペクトル測定からその化学構造を詳細に解析し、原料石炭の種類に依存して出現するコールタールの分子構造における差異を明らかにしている。

第7章では、本研究の結論を与えるとともに、石炭の反応性評価のみにとどまらず、低品位炭の利用拡大や自然発熱抑制と言う産業上の課題に対して、石炭とコールタールの詳細分子構造解析により得られる基礎科学的知見を活用するための指針を提示している。

以上のように本論文では、石炭の詳細な分子構造解析によって、熱物性を支配する分子間力の温度依存性と、酸素との低温における反応性を定量的に評価するための分析手法を確立している。ここで確立された一連の実験および解析手法、並びに得られた知見は、石炭からコークスを製造する鉄鋼プロセスをより安全かつ経済的に実現する上で有用であり、工学の発展に寄与するところが大きいと判断できる。よって、本論文の提出者である畑友輝君は博士(工学)の学位を受けるに十分な資格があると判断した。