

(123) Conformal Ionic Solution 理論の

製鋼スラグへの適用

東北大学 選鉱製錬研究所 水渡 英昭

1. 緒言

製鋼スラグ (CaO, Fe<sub>t</sub>O, MgO, MnO, SiO<sub>2</sub>, P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, CaF<sub>2</sub> etc. を含む) 中の Fe<sub>t</sub>O(ℓ), MnO(ℓ)の活量係数を, Conformal Ionic Solution 理論<sup>1)</sup>より計算し, 実測値との比較検討を行った。

2. Conformal Ionic Solution 理論

活量係数の算出に際して二次項まで考慮すれば, 例えば CaO-MgO-Fe<sub>t</sub>O-MnO-SiO<sub>2</sub>-P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 系スラグ中の Fe<sub>t</sub>O の活量係数は次式で与えられる。ただし, イオン種として Fe<sup>2+</sup>, M<sub>i</sub><sup>2+</sup>(M<sub>j</sub><sup>2+</sup>)(= Ca<sup>2+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, Mn<sup>2+</sup>), O<sup>2-</sup>, SiO<sub>4</sub><sup>4-</sup>, PO<sub>4</sub><sup>3-</sup> を考える。

$$\begin{aligned}
 RT \ln \gamma_{Fe_tO(\ell)} &= RT \ln Q_{Fe_tO(\ell)} / (N_{Fe^{2+}} \cdot N_{O^{2-}}) \\
 &= X_{SiO_4}^{4-} - \sum_i X_{M_i}^{2+} \cdot \Delta G_{FeO-M_i(SiO_4)}^{1/2} + X_{PO_4}^{3-} - \sum_i X_{M_i}^{2+} \cdot \Delta G_{FeO-M_i(PO_4)}^{2/3} \\
 &\quad - 2 \{ X_{SiO_4}^{4-} - \sum_{ij} X_{M_i}^{2+} X_{M_j}^{2+} \lambda_{(M_i, M_j)SiO_4} + X_{PO_4}^{3-} - \sum_{ij} X_{M_i}^{2+} X_{M_j}^{2+} \lambda_{(M_i, M_j)PO_4} + X_{SiO_4}^{4-} X_{PO_4}^{3-} - \sum_i X_{M_i}^{2+} \lambda_{M_i(SiO_4, PO_4)} \} \\
 &\quad + (1 - 2 X_{O^{2-}}) \{ X_{SiO_4}^{4-} - \sum_i X_{M_i}^{2+} \lambda_{M_i(O, SiO_4)} + X_{PO_4}^{3-} - \sum_i X_{M_i}^{2+} \lambda_{M_i(O, PO_4)} + \sum_{ij} X_{M_i}^{2+} X_{M_j}^{2+} \lambda_{(M_i, M_j)O} \} \\
 &\quad + (1 - 2 X_{Fe^{2+}}) \{ X_{SiO_4}^{4-} - \sum_i X_{M_i}^{2+} \lambda_{(Fe, M_i)SiO_4} + X_{PO_4}^{3-} - \sum_i X_{M_i}^{2+} \lambda_{(Fe, M_i)PO_4} + X_{SiO_4}^{4-} X_{PO_4}^{3-} - \lambda_{Fe(SiO_4, PO_4)} \} \\
 &\quad + (X_{O^{2-}}^2 + X_{Fe^{2+}}^2 - 2 X_{O^{2-}} X_{Fe^{2+}}) \{ X_{SiO_4}^{4-} - \lambda_{Fe(O, SiO_4)} + X_{PO_4}^{3-} - \lambda_{Fe(O, PO_4)} + \sum_i X_{M_i}^{2+} \lambda_{(Fe, M_i)O} \} + f(\Lambda)
 \end{aligned}$$

$\Delta G_{FeO-M_i(SiO_4)}^{1/2}$  は  $FeO(\ell) + 1/2 M_{i2} SiO_4(\ell) = M_iO(\ell) + 1/2 Fe_2SiO_4(\ell)$  の  $\Delta G^\circ$ ,  $\lambda_{M_i(O, SiO_4)}$  etc. は  $M_iO-M_i(SiO_4)_{1/2}$ 系 etc. の interaction parameter である。  $X_{M_i}^{2+}$  etc. は各イオンの等価イオン分率,  $N_{Fe^{2+}}$ ,  $N_{O^{2-}}$  はイオン分率である。  $f(\Lambda)$  は理想融体からのズレを表す項である。

3. Interaction parameter の検討

A0-B0, A0-B0-C0, A0-SiO<sub>2</sub>, A(SiO<sub>4</sub>)<sub>1/2</sub>-B(SiO<sub>4</sub>)<sub>1/2</sub> 系スラグのデータに基づいて各 parameter を求め, それらの値を参考にして CaO(MgO, MnO)-Fe<sub>t</sub>O-SiO<sub>2</sub> 系, CaO-MnO-Fe<sub>t</sub>O系, CaO(MgO)-Fe<sub>t</sub>O-P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 系, CaO-MgO-Fe<sub>t</sub>O-SiO<sub>2</sub> 系, MgO-MnO-Fe<sub>t</sub>O-SiO<sub>2</sub> 系, CaO(MnO)-Fe<sub>t</sub>O-SiO<sub>2</sub>-P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 系および CaF<sub>2</sub>-CaO-Fe<sub>t</sub>O系スラグの Fe<sub>t</sub>O の活量係수에等しくなるように試行錯誤法により各 parameter を決定した。その際, 上式で  $RT \ln \gamma_{Fe_tO(\ell)}$  におよぼす各項の割合を参考にして各 parameter を求めた。

4. 結果

Figs.1~3 に CaO-MgO-Fe<sub>t</sub>O-SiO<sub>2</sub>系, CaO-Fe<sub>t</sub>O-P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 系および CaF<sub>2</sub>-CaO-Fe<sub>t</sub>O系スラグの結果を与える。従来の Fe<sub>t</sub>O を含むスラグ系についてのデータを検討した結果, いずれのデータもこの理論によりよく説明できることが明らかとなった。

参考文献

1) M.Blander and S.J.Yosim: J. Chem. Phys., 39(1963), p2610

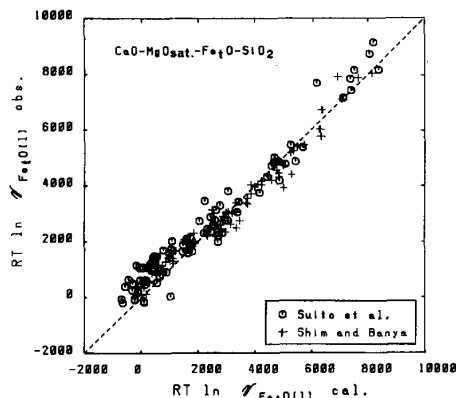


Fig.1 Comparison between observed and calculated results in CaO-Fe<sub>t</sub>O-MgO-SiO<sub>2</sub> system.

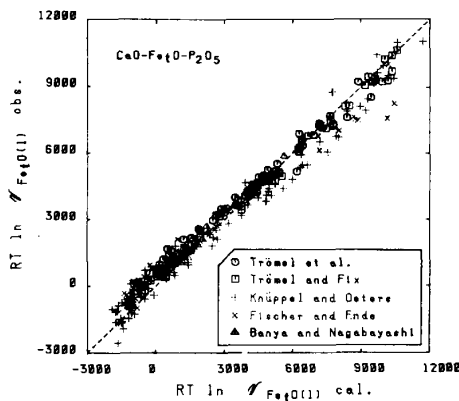


Fig.2 Comparison between observed and calculated results in CaO-Fe<sub>t</sub>O-P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> system.

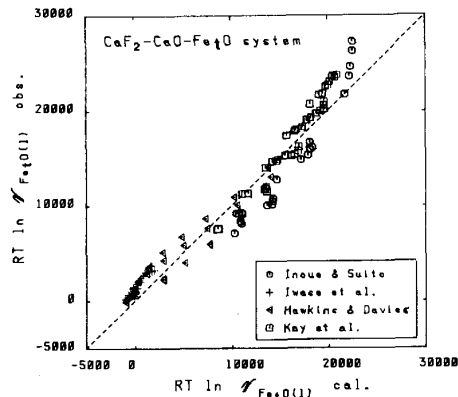


Fig.3 Comparison between observed and calculated results in CaF<sub>2</sub>-CaO-Fe<sub>t</sub>O system.