

(138) CaO-SiO₂ 融体におけるCaの拡散係数の推定

- 分子動力学法によるスラグのシミュレーションと物性の推定 第1報 -

新日本製鐵(株) 特別基礎第二研究センター ○松宮 徹, 中村正和
 本社中研企画部 大橋徹郎

1. 緒言

近年, コンピューターの高速化に伴って, 原子レベルの計算機シミュレーションを行って現象を実験では困難なマイクロレベルで観察することが, 計算機物理や計算機化学の分野で盛んである。そこで, 精錬スラグのシミュレーションを分子動力学法を用いて行って, その挙動や構造の解析を進め, 熱力学的諸量, 動的物性値等を推定する方法を検討し, 加えて, 動的現象の物理モデルを検討することとした。今回はCaO-SiO₂融体を対象にその構造および拡散係数を推定したので報告する。

2. 計算方法

CaO-SiO₂の1873 Kにおけるシミュレーションを粒子数105, 525, 1050で行った結果, 計算時間と温度の安定さからみて525個を最適と判断してこれを用いた。2体ポテンシャルは(1)式の形を用いて, 式中のパラメーターは文献1), 2)に基いてTable 1に示すものを用いた。体積を一定として, 周期境界条件を用いた。ランダムな状態を初期値として解析した。

Table 1 values used in eq(1)

	σ_i (Å)	b_i (Å)	Z_i
Si	0.64	0.0125	4
O	1.84	0.130	-2
Ca	1.9995	0.2101	2

$f_0 = 6.9472 \times 10^{-11}$ N

$$\phi^{ij}(r) = \frac{Z_i Z_j}{r} e^2 + f_0 (b_i + b_j) \exp\left(\frac{\sigma_i + \sigma_j - r}{b_i + b_j}\right) \dots (1)$$

ここで, ϕ^{ij} : 原子 i, j 間のポテンシャル, r : 同距離, e : 電気素量である。時刻は 1×10^{-15} s とした。

3. 計算結果

Fig. 1 に得られた動径分布関数を示す。図中黒三角でX線回折により求められた³⁾最近接原子間距離を示す。両者は整合している。

Caの移動距離の2乗の平均値 $\overline{X^2}$ から $6Dt = \overline{X^2}$ の関係を用いて計算されたCaの拡散係数D (Fig. 2 中の勾配) は 2.31×10^{-6} cm²/S となり, 丸山ら⁴⁾の1803K以下における実測値の1873 Kにおける外挿値 (2.06×10^{-6} cm²/S) とよく合致した。

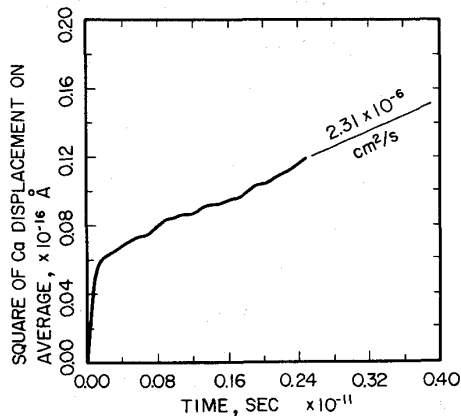


Fig. 2 Square of displacement of a Ca atom on average divided by six vs. time

4. 文献

- 1) 岡田ほか: 日本化学会誌, (1982), 910. 2) A.M. Stoneham: Handbook of Interatomic Potentials, I Ionic crystals, 1981 [HARWELL], Suppl.4. 3) Y.Waseda et al.: Met. Trans., 8B (1977) 563. 4) 齊藤・丸谷: 日本金属誌, 21 (1957) 728.

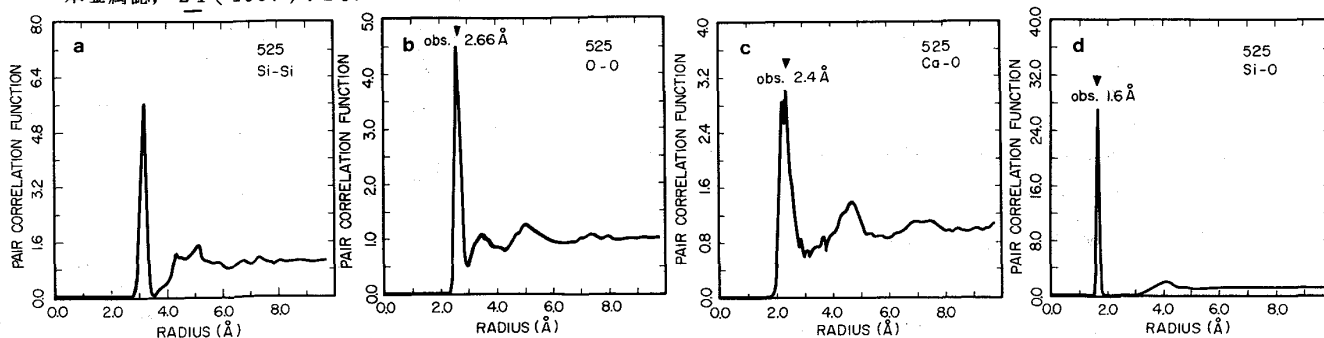


Fig. 1 Calculated radial distribution functions. (a) Si-Si, (b) O-O, (c) Ca-O, (d) Si-O obs. indicates the nearest neighbor distances obtained by X-ray diffraction.³⁾