

受賞者名：川並 園実

受賞論文題名：赤外分光と量子化学計算による鉄鉱石中リン吸着
ゲージサイトの化学構造解析

掲載ページ：「分析化学」第 74 巻第 10・11 号，653-663 ページ



川並 園実*¹，村尾 玲子¹，松崎 洋市¹

(¹日本製鉄株式会社技術開発本部先端技術研究所)

「分析化学」編集委員会では、「分析化学」誌の初執筆論文特集に掲載された論文の中から、最も優れていると認められる論文の筆頭著者に、編集委員長名で「分析化学」初執筆論文賞を授与しています。本年度は多くの優れた論文の中から受賞論文 2 編を選考しました。その受賞者として、川並園実君が選定されましたので、お知らせいたします。

【選定理由】

豪州産鉄鉱石は 2030 年以降にリン (P) 濃度の上昇が予測され、これに伴い操業上の課題が懸念されている。一方で、豪州には P 濃度も鉄 (Fe) 濃度も高い未開発資源が残されており、鉄鉱石を海外からの輸入に依存する我が国では、現行の操業工程へ脱 P プロセスを導入し、これら未利用資源の活用を進めることが急務である。

豪州産鉄鉱石における P の存在状態は、地質学的成因から、その大部分がゲージサイトに吸着したリン酸イオン (リン吸着ゲージサイト、P 吸着 α -FeOOH) であることが知られているが、具体的な化学構造に関しては報告例がなかった。

著者らは、豪州産鉄鉱石に存在する P 吸着 α -FeOOH の化学構造を解析する方法として、迅速かつ高感度分析が可能で、かつ固体表面の分析や吸着質の観察に有効な赤外分光 (IR) に着目し、リン酸イオンに由来する微弱な IR ピークを観察するための測定技法として、顕微 IR を採用した。さらに、既往研究において P 吸着 α -FeOOH の化学構造に関して統一見解が得られていなかったこと等を踏まえ、IR スペクトルを解析するための量子化学計算を実施した。

量子化学計算による P 吸着 α -FeOOH のモデル計算に当たっては、 α -FeOOH に対するリン酸イオンの吸着構造や α -FeOOH の表面電荷といった、ピーク波数に影響を及ぼす可能性がある条件をすべて考慮して P 吸着 α -FeOOH の初期構造を作成し、計算を実施した。得られた計算結果をもとに、豪州産鉄鉱石 2 種に存在する P 吸着 α -FeOOH の IR スペクトルを解析した結果、鉄鉱

石に含まれる P 吸着 α -FeOOH の化学構造は、単座配位の $\text{FePO}_2(\text{OH})_2$ と FePO_3OH とで説明でき、その存在比率が鉄石銘柄ごとに異なることを明らかにした。リン酸溶液に浸漬して作成した固体の P 吸着 α -FeOOH の化学構造が溶液の pH によって異なったことから、2 種の鉄鉱石は生成条件が異なると推測した。2 種の鉄鉱石から生成条件が異なる 2 次リン酸塩鉱物が観測されたことから、考察を裏付けられる。

このように、IR と量子化学計算を活用して鉄鉱石に含まれる P 吸着 α -FeOOH の化学構造を特定することによりその化学構造に基づいた鉄鉱石の成因の推測が期待できる。これらの情報は、脱 P 条件の最適化や操業に有用な鉄鉱石の選別に有益な情報であり、取得した情報の活用により未開発資源の利用拡大が期待される。

以上に示すように、本論文は該当分野および分析化学における重要な知見を示しており、2025 年「分析化学」初執筆論文賞に値するものと認め、選定した。

〔「分析化学」初執筆論文賞選考委員会〕

【受賞者のコメント】

この度は「分析化学」初執筆論文賞に選定していただき、編集委員を始めとする関係者の皆様に厚く御礼申し上げます。今回の受賞に当たり、熱心にご指導ならびにご助言をいただきました村尾玲子氏、および松崎洋市氏に心より御礼申し上げます。また、本研究の成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) の助成事業により得られたもので、研究を進めるに当たり、NEDO プロジェクトを通してご指導いただきました関係者の皆様に感謝申し上げます。

本研究では、量子化学計算に関する技術の習得と、およそ 100 種類程度の、初期モデルの計算を行う点において苦労しました。しかし、納得のいく解析ができ、かつ、観測された二次リン酸塩鉱物の種類によって考察の妥当性を裏付けることができたことに達成感を覚えました。本研究で得られた経験を生かして、今後も分析化学の発展に少しでも貢献できるよう、日々精進してまいります。