

(54) 熔融状態における鉄およびニッケルの構造について.

東北大学大学院 ○早稲田嘉夫
東北大学 金研 鈴木謙爾, 竹内 栄

1. 緒言

液体金属の構造や物性に関する研究は近年著しく進歩したが、遷移金属の液体状態に関しては、融点が高くかつ化学的にもかなり活性である為非常に立ち遅れているのが現状である。遷移金属の中でも、特にFe, Co, Niなどの鉄族金属の液体状態については単に物理的興味のみならず、実用上の観点からの基礎的データの蓄積が切望されている。現在、鉄族金属液体の性質として測定されているものは密度、粘性、電気抵抗、帯磁率のみであり、液体構造に関する報告は無い。そこで我々はNi(1500℃), Fe(1620℃)の熔融状態における中性子回折の測定を試み、これに成功したのでその一部を先に報告した¹⁾。今回はこれらの結果について特に構造に関して詳細に解析した結果を報告する。

2. 実験方法

直接W線を巻きつけたアルミナ管にあらかじめ電子ビーム溶解により充分ガス抜きした試料を装入し、真空中でW線に通電してNiを1500℃, Feを1620℃に保持した。試料液体の大きさは $16\text{mm}\phi \times 80\text{mm}$ である。なお温度はoptical pyrometerで測定すると同時に炉の側壁に挿入したR-R Pt thermo-coupleでモニターした。

用いた中性子回折装置は、金研JRR-3に設置されているTOG-NDである。中性子散乱強度の測定にはモニター定係数法を採用し、中性子線の波長はNiの場合 $1.03\text{\AA}$, Feの場合 $1.01\text{\AA}$ である。測定された相関関数 $a(K)$ から動径分布関数へのフーリエ変換、あるいはその逆変換や種々の誤差解析などの大量の数値計算はすべて東北大学大型計算機センターに新たに設置された大型電子計算機NEAC2200-MODEL500により行われた。

3. 結果

測定データに種々の補正(特にFeについては磁気散乱の補正を実施した)を行なった後得られたNiおよびFeの熔融状態に関する相関関数 $a(K)$ を図1に、動径分布関数から求められた最隣接原子間距離、最近接配位数、密度を表1に示す。図1に示めすようにNi, Feともいわゆるshoulderのような特異性は全く認められず、Niはpacking density $\eta=0.48$, Feはpacking density $\eta=0.44$ と算出したHard Sphere Modelとかなりよい一致を示めした。

また中性子回折より求めた密度はNi, FeともLucasの測定に近い値を示し、最隣接原子間距離、最近接配位数などはPb, NaなどSimple metalを溶解した場合と同じ傾向を示した。

これらの測定結果を基礎として特にデータの信頼性と処理手続との関連性に関する電子計算機を利用した数値計算による解析結果、有効イオン直径

相互作用をそれらを用いて算出して種々の物性値との関連性についても報告する。

文献

1) 昭和44年度春季日本金属学会講演概要 P111

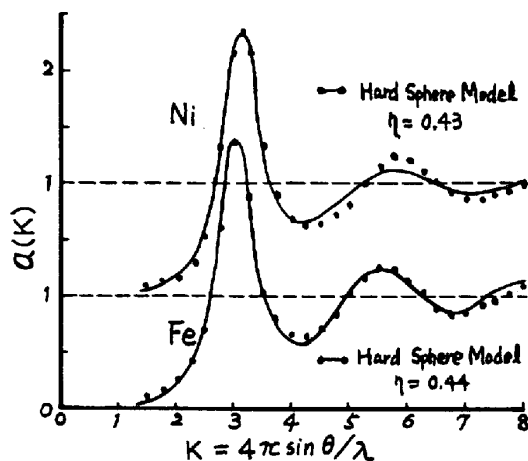
図1 相関関数 $a(K)$

表1 中性子回折より得られた結果

	温度	最隣接距離	配位数	密度(本実験)	密度(Lucas)
Ni	1500℃	2.52Å	10.7	7.68 g/cm ³	7.70 g/cm ³
Fe	1620℃	2.58Å	9.5	6.86 g/cm ³	6.90 g/cm ³