

大阪大学工学部 飯田孝道 森田善一郎

(株)山梨製鋼所船町 山本友亮

1 結言：溶融純金属の自己拡散係数は希薄合金中の溶質元素の拡散係数を計算するときの主要なパラメータであり正確な値が必要である。たとえば溶鉄溶鋼中の各種元素の拡散係数を評価するには溶融純鉄の自己拡散係数が必要であるが、その実測値の報告はない。一方液体の自己拡散係数についていくつかの式が提出されているが上記の目的からすれば、いずれも十分なものである。そこで本報告では剛体球モデルに基づいた溶融金属の自己拡散係数の式を導出し実測値とよく一致する結果を得た。

2 自己拡散係数の式の導出：剛体球モデルによる高密度液体の自己拡散係数 D_s を、原子量 M 、原子容 V を用いて表わすと、充填率 γ が0.46付近では次式となる。

$$D_s = D_H \beta_H = 4.89 \times 10^{-6} \frac{(1-\gamma)^3}{\gamma^{3/2}(1-\frac{1}{2})} \left(\frac{T}{M}\right)^{1/2} V^{1/3} \quad (1)$$

ここで D_H は剛体球モデルによる希薄液体の自己拡散係数、 β_H は高密度液体に対する補正因子で充填率に依存する。融点における溶融純金属の充填率 γ_m は金属の種類によらずほぼ0.45なので、この値を(1)式に代入すると、融点における自己拡散係数 $(D_s)_m$ は次式で与えられる。

$$(D_s)_m = 3.97 \times 10^{-6} (T_m/M)^{1/2} V_m^{1/3} \quad (2)$$

一方著者は先に別の立場から(2)式と同様の式を導き、実測値とよく一致する結果を得たが、係数が 3.50×10^{-6} と若干異なるのでその点を考慮して(1)式を修正すると、 $\gamma \approx 0.45$ 付近では次式がえられる。

$$(D_s)_{\gamma \approx 0.45} = 4.31 \times 10^{-6} \frac{(1-\gamma)^3}{\gamma^{3/2}(1-\frac{1}{2})} \left(\frac{T_m}{M}\right)^{1/2} V_m^{1/3} \quad (3)$$

(3)式より任意の温度における D_s を求めるには、その温度における γ および γ に対する β_H の値が必要である。 γ と構造因子 $a(\gamma)$ との関係および種々の金属の $a(\gamma)$ の実測値の温度変化を検討すると経験的に、

$$\gamma \approx \gamma_m (T_m/T)^{1/4} \quad (4)$$

なる関係がえられる。また β_H と γ との関係は指数関数型の式により記述されるものと推定されるのでここで、

$$\beta_H = 0.291/\gamma_m \exp\{a(\gamma_m - \gamma)\} \quad (5)$$

とおけば(3)式より任意の温度における自己拡散係数の式として、

$$D_s = \frac{0.431 \times 10^{-5}}{\gamma_m} \exp\{a(\gamma_m - \gamma)\} \frac{(1-\gamma)^3}{\gamma^{3/2}(1-\frac{1}{2})} \left(\frac{T}{M}\right)^{1/2} V^{1/3} \quad (6)$$

が得られる。(6)式と実測の D_s との比較の結果、 a の値は半金属では9、アルカリ金属では13、その他の金属では20とすれば計算値と実測値とはきわめてよく一致することが明らかになった。図1にPbの場合の実測値と(6)式からの計算値および従来の実測値とをきわめてよく一致するとわかれている式からの計算値との比較を示した。また図2に溶融純鉄の推定値を示した。(6)式からの計算値と実測値との比較から考えると(6)式は少数の既知の物理量をパラメータとした単純な式ではあるが、その推定値はきわめて信頼しうべきものと考えられる。

1) 飯田、森田：学術資料140号資料(1976. 6. 23)

2) Trans AIME 206 (1956) P.199

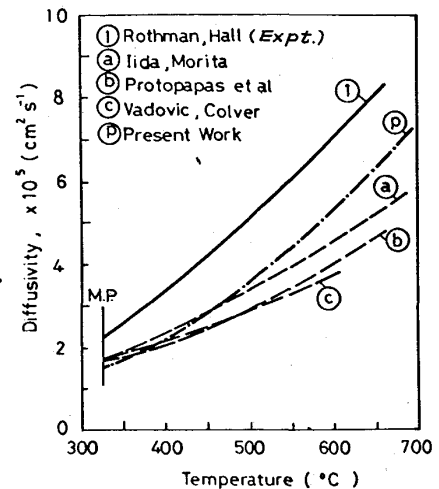


図1. 溶融鉛の自己拡散係数の計算値と実測値との比較 (Rothman Hall)

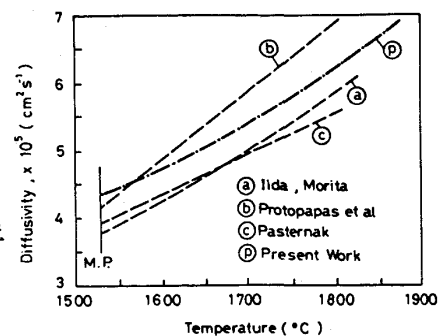


図2. 溶融純鉄の自己拡散係数の推定値