

1. 緒言 著者らは、先に¹⁾溶融金属中の溶質拡散係数に関する式を導出し、その式からの計算値は実測値とよく一致することを示した。しかし異種原子間の相互作用を定式化する際の取り扱いに不十分な点があったので、ここではそれについてさらに検討を加え修正式を導いた。本報では修正式の導出過程と、その式からの計算例として、溶融金属中の気体の拡散係数について実測値との比較を示す。

2. 溶質拡散係数の式の導出 前報¹⁾での取り扱いに対して、本報では次のような点について検討を加えた。すなわち前報¹⁾で導いた異種原子間の原子振動に対する補正係数 k_D について、著者らの溶融金属に関するモデルに従って、より厳密なものに修正した。そこには溶質原子の平均振動寿命および溶質・溶媒原子の原子半径などを考慮されており、溶質拡散係数 D_x は次式で表わされる。

$$D_x = \frac{1}{k_D} \cdot \frac{[(MT_m)^{\frac{1}{2}}]_M}{[(MT_m)^{\frac{1}{2}}]_x} \cdot D_s \quad (1)$$

$$\text{ここで } k_D \equiv \frac{P(\bar{\tau})^*}{P(\bar{\tau})} \cdot \left(\frac{a_M}{a_x^*} \right) \left\{ 1 + \frac{3.5 \times 10^6 |4\chi|^2}{(RT_m)_x RT} \cdot \left(\frac{a_x^*}{a_M} \right)^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$$

$$P(\bar{\tau})_x^* \equiv 1 - \int_x^{\infty} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \exp \left[-\frac{3}{8} \left\{ \frac{3.2 T_m (1+\theta) - \bar{\tau}}{\bar{\tau}} \right\}^2 \right] d \left(\frac{3.2 T_m (1+\theta) - \bar{\tau}}{\bar{\tau}} \right)$$

$$\chi \equiv \frac{\sqrt{3}}{2} \left\{ \frac{3.2 T_m (1+\theta) - \bar{\tau}}{\bar{\tau}} \right\}$$

$$\theta \equiv \frac{3.5 \times 10^6 |4\chi|^2}{(RT_m)_x RT} \cdot \left(\frac{a_x^*}{a_M} \right)^2$$

$P(\bar{\tau})_x^*$ は溶質原子の平均振動寿命を表わす因子、 $\bar{\tau}$ は熱平衡温度(K)、 a は原子半径、 $|4\chi|$ は溶質・溶媒間の電気陰性度の差、添字M、 x はそれぞれ溶媒金属、溶質元素を表す。

3. 計算値と実測値との比較 前報¹⁾で導出した式からの計算値と上式からの計算値は±10%程度の範囲内で一致した。特に溶質が金属

原子の場合には、それらはほぼ等しい値が得られた。図1～図3に従来比較的计算例の少ない溶融金属中のガス^{*}の拡散係数の計算値と実測値との比較を示した。図から明らかなように計算値は妥当なものと考えられる。なお自己拡散係数 D_s には、著者らによる経験式²⁾および剛体球モデルに基づいた式³⁾からの値を用いた。(※酸素、水素、窒素)

1) 飯田、森田：鉄と鋼，63(1977)，S. 554。

2) 飯田、森田：鉄と鋼，63(1977)，S. 553。3) 飯田、山本、森田：鉄と鋼，64(1978)，S.

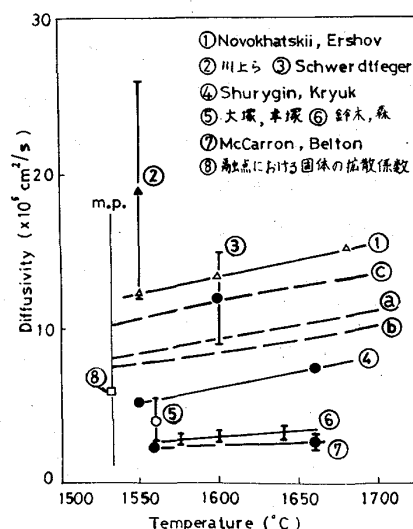


図1 溶鉄中の酸素の拡散係数
②(1)式からの計算値(D_s :剛体球モデル) ③(1)式からの計算値(D_s :経験式) ④Protoapasらによる計算値

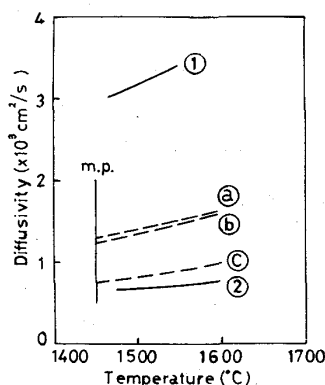


図2 溶融ニッケル中の水素の拡散係数
②(1)式からの計算値(D_s :剛体球モデル) ③(1)式からの計算値(D_s :経験式) ④Protoapasらによる計算値
①Wright, Hocking ② Sacris, Parlee

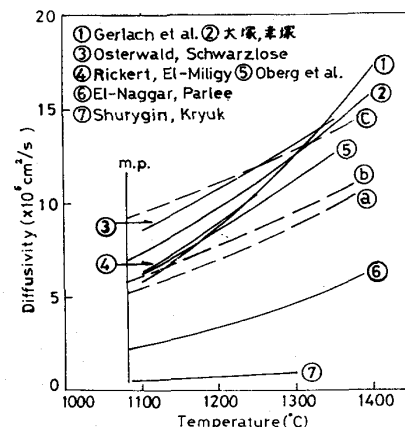


図3 溶鋼中の酸素の拡散係数
②(1)式からの計算値(D_s :剛体球モデル) ③(1)式からの計算値(D_s :経験式) ④Protoapasらによる計算値