

東北大 大学院  
東北大 選 研

○ 早稲田 嘉夫  
大 谷 正 康

1、緒言：近年，液体金属の構造や物性に関する研究は盛んとなり，製錬の分野においても，とくに鉄ならびに鉄合金については，基礎研究として溶融状態における密度，粘性，表面張力，電気抵抗および拡散などの測定が試みられている。1960年Samarin (1) によつて初めて報告された溶鉄の諸物性における不連続な温度変化という現象を，阪大グループも密度 (2)，粘性 (3) において報告している。そしてこの現象は溶鉄の構造が，bcc的な $\delta$ -近似構造からfcc的な $\gamma$ -近似構造へ変化する事に対応すると解釈されている。そこで，金属の溶融状態の原子分布 (短範囲規則性) の特徴を，最隣接原子間距離における配位数によつて表現する事の適否について，すなわち最隣接原子間距離を中心に，原子が激しく振動している溶融状態において，bcc的あるいはfccの特徴が動径分布関数において，どの様に現われるかを検討した。さらに溶鉄で報告されている密度の不連続な温度変化を，X線などの回折実験によつて検知しうるかを，Hard Sphere Model により検討した。

2、方法： $r_i$  の位置に局在している原子の熱振動が激しくなると，その存在確率は拡がりを持つようになると考えられる。この熱振動による拡がりの影響を，Gaussian で近似すれば，動径分布関数  $4\pi r^2 \rho(r)$  は次式で表わされる。

$$4\pi r^2 \rho(r) = \sum_{i=1}^{\infty} n_i (2\pi\sigma_i^2)^{-1/2} \exp[-(r-r_i)^2 / (2\sigma_i^2)] \quad (1)$$

ここで $\sigma_i^2$ は原子間の相対的振幅の二乗平均， $n_i$ は位置 $r_i$ における配位数である。 $\sigma^2$ は原子間距離に依存するが，距離が遠くなれば振動は独立になるから，この場合の $\sigma^2$ を $\sigma_c^2$ とすれば， $\beta_i = \sigma_i^2 / \sigma_c^2$ で定義されるcoupling factorを導入出来る。具体的には， $\sigma_c^2$ はX線散乱におけるDebye-Wallerの温度因子から，一方 $\beta_i$ はdispersion relation から得られる値を使用し，(1)式がA $\lambda$ の実験結果を十分再現し得ることを確かめた。

3、結果：最隣接原子間距離に原子が9.5個あるいは10.5個局在していると仮定して，(1)式により計算した動径分布関数を図1に示す。一般に，液体状態のX線散乱強度測定は，最も良い条件で1%程度の誤差を含み，非弾性散乱の分離，原子散乱因子の精度，さらにフーリエ変換に伴う数値計算誤差などから，得られる動径分布関数は10%近くの誤差を含んでいると考えられる。したがつて，液体状態における原子分布を，最隣接距離における配位数で特徴づける事は適当でない。図2にHard Sphere Mixture Model により，溶鉄中に微量(1at%)の非金属元素(C, N, O)が入つたと仮定して計算したstructure factorと入らない場合に関する比較の一例を示す。図のようにほとんど影響は現われない事がわかる。その他2, 3の検討結果についても報告する。以上の検討から，溶鉄

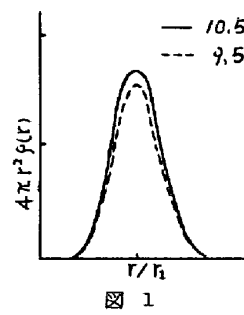


図 1

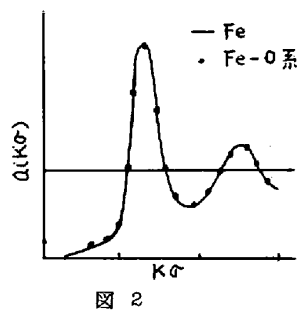


図 2

に報告されている程度の構造変化があるとしても，報告されている程度の変化の割合では，それを回折実験により判定する事は不適當であると考えられる。なお密度などの実験結果に関する若干の考察を行なつた。

文献：(1) A.M.Samarin J I S I, 200(1960), 95.  
(2) 森田ら：金属学会誌, 34(1970), 248.  
(3) 沢野ら：鉄と鋼, 56(1970), 1633.