

(86)

溶融鉄の二体相互作用ポテンシャル

東京大学大学院
東京大学工学部洲崎 勝
佐野信雄 松下幸雄

I. 緒言

動径分布関数および二体相互作用ポテンシャルは、液体の統計力学的取扱の基礎となるもので、これより、液体の種々の熱力学的量を導くことが出来る。わいわいは溶融鉄のX線回折実験から得られた動径分布関数⁽²⁾を用いて、Born-Green-Yvonの積分方程式を数値解析によって解き、二体相互作用ポテンシャルを求め、検討を行った。

II. 方法

液体の二体相互作用ポテンシャル $[\phi(r)]$ と、動径分布関数 $[4\pi r^2 g(r)]$ との間に成立するBorn-Green-Yvonの積分方程式⁽¹⁾を部分積分により書きなおしたものは次式のようになる。

$$\begin{aligned} kT \ln \{g(r)\} = & -\phi(r) - \frac{\pi \rho_0}{r} \int_0^\infty ds \phi(s) \left[\frac{dg(s)}{ds} \int_{r-s}^{r+s} dx x \{g(x) - 1\} \{s^2 - (x-r)^2\} \right. \\ & \left. + g(s) \int_{r-s}^{r+s} 2s x \{g(x) - 1\} dx \right] \end{aligned}$$

[k :ボルツマン定数, T :絶対温度, $g(r)$:二体相関関数, ρ_0 :平均原子数密度]
[r, s, x :距離]

X線回折実験から求めた $g(r)$ ⁽²⁾を用い $dg(r)/dr$ を計算し、 $g(r)$ とともに与式に代入することにより、 $\phi(r)$ を多元連立一次方程式の解⁽³⁾として求める。

III. 結果および考察

求めた $\phi(r)$ と r との関係を図に示す。 $\phi(r)$ は振動型ポテンシャルを示している。Born-Green-Yvonの積分方程式はポテンシャル形状の明らかでない金属について有効な情報を提供すると思われるが、重ね合せの近似を用いており、密度の大きい液体では、悪い近似であると予想される。比較の為に、さらにHNC近似⁽⁴⁾によるポテンシャルの導出を試みている。

IV. 結言

溶融鉄の $\phi(r)$ は振動型ポテンシャルを示しており、アルカリ金属と較べてポテンシャルの谷が深く凝集エネルギーが大きいと思われる。

[参考文献]

- (1) M. Born and H.S. Green: Proc. Roy. Soc., **190** (1947), A455.
- (2) M. Sunosaki, N. Sano and Y. Matsushita: to be published. (The Fourth JAPAN-USSR Joint Symposium)
- (3) Y. Waseda and K. Suzuki: Phys. Stat. Sol., (b) **47** (1971), 203.
- (4) G. S. Rushbrooke: Physica, **26** (1960), 259.

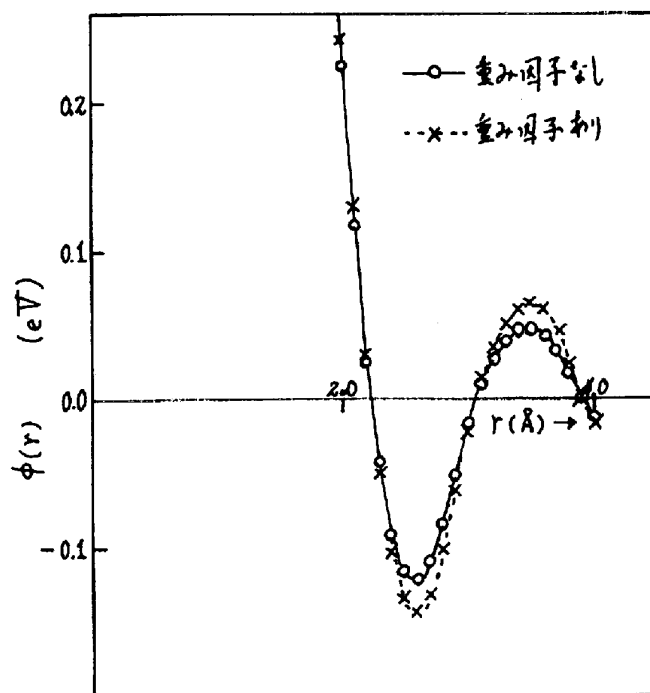


図. 溶融鉄の二体相互作用ポテンシャル