

(137)

溶融金属の自己拡散係数に関する理論式および経験式

大阪大学工学部 ○飯田孝道, 森田善一郎

1 緒言 我々はさきに<sup>1)</sup>溶融金属の自己拡散に関する考察を行い, Sutherland-Einstein の関係式へ我々の導出した粘度式を代入することにより, 既知のパラメータを関数とした自己拡散係数の式を導いた。ここではその式を修正した結果とそれからの計算値と測定値との比較, および2体分布関数を用いた式からの計算値との比較, また別の立場から新に導出した自己拡散係数の経験式等について報告するとともに, 自己拡散係数が与えられると微量溶質元素の拡散係数も容易に計算できるので, 現在まだ測定値が与えられていない溶融純鉄の自己拡散係数の推算値について報告する。

2 自己拡散係数の式の導出 Sutherland-Einstein の式と前に<sup>2)</sup>報告した粘度の理論式および経験式とを結びことにより, 自己拡散係数  $D_s$  として,

$$D_s = K_D \frac{V^{2/3} T}{g(r_0) P(T) (M T_m)^{1/2} a} \quad (1)$$

および,

$$D_s = K_{diff} \frac{V_m^{2/3} \exp(H_2/RT_m)}{(M T_m)^{1/2}} \cdot \frac{T}{V^{1/3}} \cdot \exp\left(\frac{H_2}{RT}\right) \quad (2)$$

がえられる。ここで  $a$  は有効原子半径で回折実験のデータに基づき液体論の剛体球理論より求めることができる。  $K_D$ ,  $K_{diff}$  は定数で, それぞれ  $4.8 \times 10^{-14}$ ,  $3.5 \times 10^{-6} (\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1})$  程度であるが, より詳しくはアルカリ金属, 遷移金属ではそれぞれ  $4.5 \times 10^{-14}$ ,  $3.3 \times 10^{-6}$ , その他の多数の金属ではそれぞれ  $5.0 \times 10^{-14}$ ,  $3.7 \times 10^{-6}$  である。  $H_2$  は前に<sup>2)</sup>述べたように正常な金属 (Normal metal) では  $1.1 T_m^{1.2}$ , 半金属 (Semi-metal) では  $0.76 T_m^{1.2}$  である。

自己拡散係数も粘度と同様に, 指数関数型の式:  $D_s = D_0 \exp(-H_0/RT)$  により近似的に記述できることが知られている。この  $D_0$  は(2)式を用いることにより既知の物理量をパラメータとして表わされる。また  $H_0$  は実測値の温度依存性 (見かけの活性化エネルギー) を検討することによりえられ, 正常な金属では  $2.5 T_m^{1.15}$ , 半金属では  $2.0 T_m^{1.15}$  で表わすことができる。

$$\text{したがって, } D_s = K_{diff} \frac{T_m^{1/2} V_m^{2/3} \exp(H_0/RT_m) \cdot \exp\left(-\frac{H_0}{RT}\right)}{M^{1/2}} \quad (3)$$

3 計算値と実測値との比較および純鉄の推算値 以上の3つの式からの計算値と実測値との比較を図示したが, それらは  $\pm 15\%$  程度の範囲内で一致している。現在の  $D_s$  の測定精度から考えると満足すべきであろう。また図に純鉄の推算値を示した。 Pasternak および Waseda & Ohtani の値は相応状態の原理からの推算値で, 本報告とは異った方法によるものであるが, それらはよく一致しており推算値はかなり信頼できるものと考えられる。

1) 飯田, 上田, 森田: 鉄と鋼, 62(1976), S 469

2) 飯田, 上田, 森田: 鉄と鋼, 63(1977), S

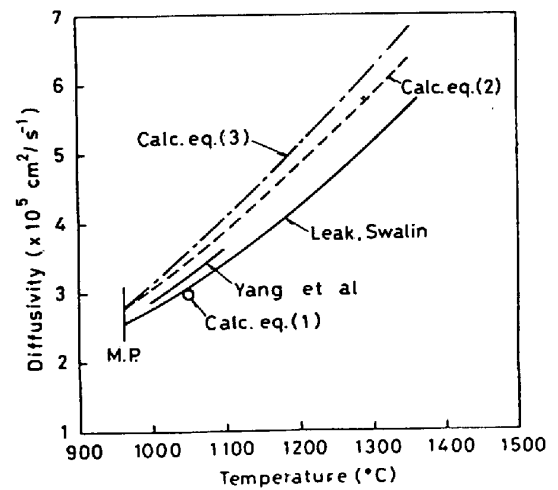


図1. 溶融銀の自己拡散係数の計算値と測定値との比較

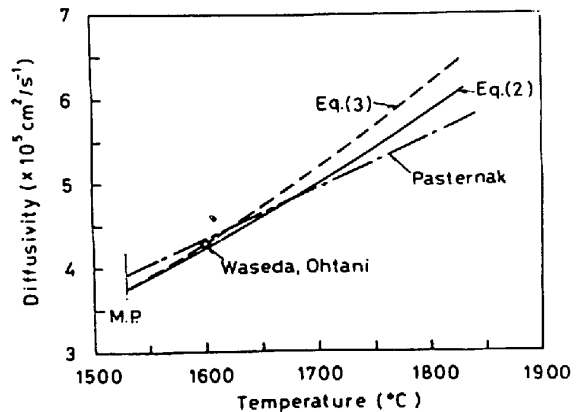


図2. 溶融純鉄の自己拡散係数の推算値