

第3図  $In-Hg$ 相図における圧縮率のボヤケ

### VI - 3. 最近の金属液体論に対するコメント

日本原子力研究所    古川 和 男

液体はやはり最も古くしかも依然新しいテーマである。再確認および論点明示のためのコメントをさせていただきたい。

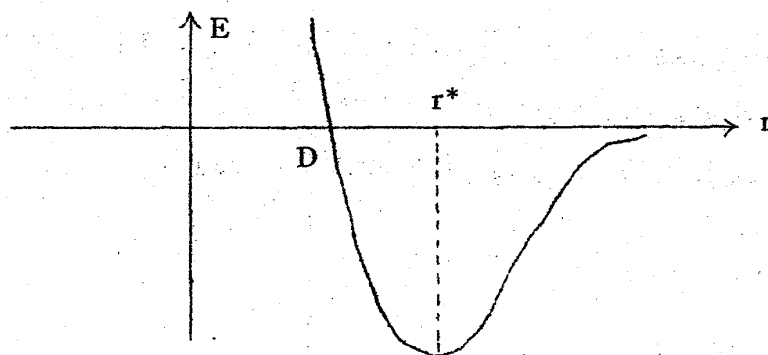
〔I〕(1) 液体論は特異な体質をもっている。<sup>(1)</sup>ここでは何一つ定説なるものはないのであるから、特に本質となる分子論的液体構造についてどのようなモデルを前提としているか明示しつつ論議を展開してゆかないと、「液体」そっちのけの「便宜的」な論議となってしまふ。少しでも理論的考察を試みるかぎり、物性の一部を介して常に液体の「動的構造」にせまろうとしている必要がある。

(2) 原子対ポテンシャル( $\phi$ )としてHooverの提案の外に、古くFurth (1944)<sup>(2)</sup>が提案した次のものも単純であるだけ発展性があるのではなか

ろうか？

$$\phi = -a r^{-m} + b r^{-n} \quad m < n$$

$$D/r^* = (m/n)^{1/(n-m)}$$



v. d. Waals 液体では  $m=6$ ,  $n=12$  で近似できるから相応状態の原理が成立する。金属ではアルカリ金属で  $m=2$ ,  $n=4$ , Fe で  $m=4$ ,  $n=7$  などとなり物質毎に異なる。〔これが金属・非金属の差を生むことは、すでに論じた。<sup>(3)</sup>〕したがって相応状態の原理が使えず複雑になってしまう。何かもっと見通しのよい方法はないものであろうか？(3)(4)の難問が残っているのだから。

(3) Prof. Bernal<sup>(4)</sup> は「液相では温度が変わるにつれて相転移がおきている」という重要な認識の必要性を強調しておられる。即ち最近接配位数( $Z$ )は一般に温度と共に変化するが、これは構造の決定的変化を意味する。したがって簡単な理論で温度変化が説明できる筈のものでない。〔しかし体積一定(このときは  $Z \doteq \text{const}$ ) の下での諸物性は単純性を示してくる。例えば融点直上の自己拡散、粘性等に関する無次元量は単純液体で広く物質によらなくなる。<sup>(1)(3)</sup>〕

(4) v. d. Waals 液体でも(3)の問題はあるが、 $\phi$  は  $Z$  によらないと近似できる。しかし金属液体では本質的に異なる。 $Z$  が小さくなれば有効  $\phi$  は大きくなり、最近接距離は短くなる。<sup>(3)</sup> 金属の融解時体積変化が小さいのはこの為であろう。<sup>(3)</sup> これも忘れてならない問題点である。

(5) 単純でない金属液体では、電子軌道の混成が行われ、方向性のある分子間力が一部に作用している。それを「clustering」などといっているがこのようなものが混在している動的な構造を定量的に表現する方法が準備されつ

つあるであろうか？

〔Ⅰ〕 このように問題が多いが，アルカリ金属についてはNASA関係で広大なデータがえられたので，その解析に役立つ理論を作ってほしい。ここでは固相液相間の臨界現象も検討してほしい。小生のメモ<sup>(5)</sup>も参考としていただければ幸いである。

〔Ⅱ〕 二元系金属液体の構造<sup>(1)</sup>は一層大変であるが，Electronegativityが金属結合でどう変わるか再検討するのも一つの手掛りとなるう。<sup>(1)(6)</sup>なお，イオン性の強い場合に対しては，イオン性液体構造の考察<sup>(7)</sup>が役に立つ面もあるであろう。

(引用文献)

- 1) 日本金属学会誌, 23A, 322(1959); 金属物理, 5, 99(1959)
- 2) R. Fürth, Proc. Roy. Soc. A183, 87(1944)
- 3) 物性論研究, 第2集5, 692(1959); Sci. Rep. R. I. Tohoku U. A12, 368(1960); Nature 183, 1209(1959).
- 4) J. D. Bernal, Trans. Far. Soc. 33, 27(1937)
- 5) Nature, 188, 569(1960).
- 6) 未発表.
- 7) Dis. Far. Soc. 32, 53(1962); 電気化学セミナー(11)「高温電気化学」p. 1(1967).