

早稻田嘉夫・鈴木謙爾・竹内 栄

subsidiary maximum の原因についてはさらに詳細な研究が必要であるが、我々の実験結果から特に、固体状態から融解した試料に関する X 線散乱強度は微結晶の存在により high angle 側での異常性を過大評価する恐れがある事、また水銀液体の融点付近での研究にはこの構造の異常性について留意すべきであることを示唆するものと考ええる。

文 献

- 1) Y.Waseda, T.Iida, K.Suzuki and S.Takeuchi: Phys. Lett., 29A (1969) 227.
- 2) Y.Waseda, T.Iida, K.Suzuki and S.Takeuchi: Phys. Lett., 30A (1969) 121.
- 3) M.Wolf : Z.Physik, 53 (1929) 72.
- 4) V.G.Rivlin, R.M.Waghorne and G.I.Williams : Phil. Mag., 13 (1966) 1169.

7. 溶融鉄ならびにニッケルの中性子回折

東北大金研 早稻田 嘉 夫
 鈴木 謙 爾
 竹 内 栄

液体金属の構造や物性に関する研究は近年著しく進歩したが、遷移金属の液体状態に関しては、融点が高く、かつ化学的にもかなり活性である為非常に遅れているのが現状である。遷移金属の中でも特に Fe, Co, Ni などの鉄族金属の液体状態については単に物理的な興味のみならず、実用上の観点からの基礎的データの蓄積が切望されている。現在鉄族金属液体の性質として測定されているものは密度、粘性、電気抵抗、帯磁率のみであり、直接液体構造に関する報告はない。

そこで我々は Ni (1500°C), Fe (1620°C) の溶融状態における中性子回折¹⁾の測定を試み、これに成功したのでその結果について報告する。

実験方法は直接 W 線を巻きつけたアルミナ管にあらかじめ電子ビーム溶解により充分ガス抜きした試料を装入し、真空中で W 線に通電して Ni を 1500°C, Fe を 1620°C に保持した。試料液体の大きさは 16 mm ϕ $\times$ 80 mm である。

なお用いた中性子回折装置は原研 JRR-3 に設置されている TOG-ND である。

測定データについて種々の補正 (特に Fe については磁気散乱の補正を実施した) を行なった後得られた Ni および Fe の structure factor $a(K)$ を Fig. 1 に、フーリエ変換して得られた動径分布関数から求められた最近接原子間距離, 最近接配位数などを Table 1 に示めす。

ここで若干 Fe の磁気散乱の補正について述べることにする。中性子回折の測定により得られる structure factor に基づいて pair correlation function $g(r)$ を求めて来たが、その過程で溶融 Ni に関しては通常 of 非遷移金属液体の場合と同様なデータ処理方法により充分満足出来る $a(K) \leftrightarrow g(r)$ の相互変換ならびに ripple の小さな $g(r)$ を得ることが出来るが Fe の場合はいかに注意深く非干渉性散乱, 吸収あるいは多重散乱などの補正を行なっても相互変換ならびに ripple の小さな $g(r)$ を得ることが出来ないことを知った。²⁾

peak Positions		1st	2nd	3rd	配置数
structure factor ($\text{\AA}^{-1}$)	Ni	3.10	5.85	8.10	—
	Fe	2.97	5.48	7.95	—
radial distribution function ($\text{\AA}$)	Ni	2.52	4.95	—	10.7ケ
	Fe	2.58	5.07	—	9.5ケ

Table 1 Results of neutron diffraction study of iron and nickel in the liquid state.

我々は、この原因は溶融鉄の中性子散乱の中にかなり常磁性磁気散乱の寄与が含まれていることにありと考へて、角度依存性を有する磁気散乱を background の補正に考慮した。

試行錯誤的に補正を実施した結果、溶融状態における Fe 原子の有効スピン量子数を約 0.6 と見積った場合の磁気散乱の補正は $g(r)$ の ripple をほぼ完全に除去してしまふことがわかった。

これらの事実から溶融状態の Fe 原子にも局在磁気モーメントが存在することが予想される。

Fig. 1 に示めす様に Ni, Fe ともいわゆる subsidiary maximum の様な特異性は全く認められず Ni は packing density = 0.43, Fe は packing density = 0.44 で算出した Hard Sphere Model と、かなり良い一致を示めした。なお Fe については Hard Sphere Model による $a(0)$ の値と等温圧縮率³⁾との関係から算出した packing density は 0.44 で一致が見られる。(Ni については圧縮率の実測値が報告されていない。)

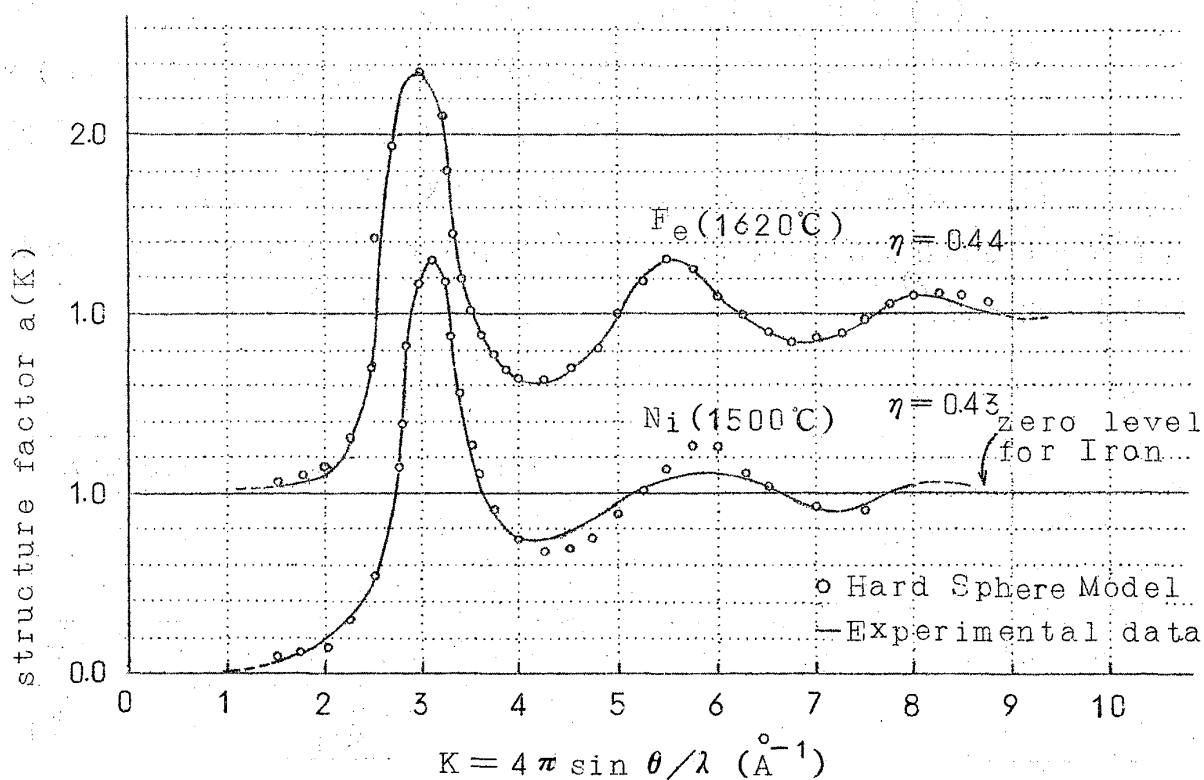


Fig. 1 Structure factor $a(K)$ of liquid iron and nickel.

また動径分布関数により得られた結果は、一般の metal が融解した場合と同様の最隣原子間距離、配位数の変化を示めている。

最後に本研究のうち Ni の測定については新潟大・田巻氏、東北大金研・柳尾氏が従事された事を付記致します。

文 献

- 1) 早稲田, 鈴木, 竹内: 鉄と鋼 55 (1969) s444.
- 2) 竹内, 鈴木, 早稲田: 昭和 44 年度秋期金属学会講演概要 p171.
- 3) S.I.Filippov, N.B.Kazakov and L.A.Prounin: Izr. Vyshiku. chern. Met., 9 (1966) 8.

8. 液体金属・合金の圧縮率の理論

東北大理 渡 部 三 雄
長谷川 正 之

研究会では液体金属・合金の圧縮率の定式化についてはあまり触れなかったので、ここではそれについて詳しく述べて、最後に数値計算の結果を簡単に報告する。

よく知られているように N 個の古典粒子系に対するハミルトニアンを

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2M} + U\{N\} \quad (1)$$

とすると、この系の圧力は次のように与えられる。¹⁾

$$P = \frac{N}{V} k_B T - \frac{1}{Z_N} \int \cdots \int_V \exp \left[-\frac{U\{N\}}{k_B T} \right] \frac{\partial U}{\partial V} d\{N\},$$

$$Z_N \equiv \int \cdots \int_V \exp \left[-\frac{U\{N\}}{k_B T} \right] d\{N\}. \quad (2)$$