



Title	擬ポテンシャルに基づく剛体球模型を用いた金属溶液の活量係数に関する理論的研究
Author(s)	上埜, 修司
Citation	大阪大学, 1989, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/36800
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏名・(本籍)	上 埜 修 司
学位の種類	工 学 博 士
学位記番号	第 8804 号
学位授与の日付	平成元年 8 月 4 日
学位授与の要件	学位規則第 5 条第 2 項該当
学位論文題目	擬ポテンシャルに基づく剛体球模型を用いた金属溶液の活量係数に関する理論的研究
論文審査委員	(主査) 教 授 森田善一郎 (副査) 教 授 岩本 信也 教 授 幸塚 善作 教 授 興地 斐男

論文内容の要旨

本論文は、合金における原子間相互作用を記述するために有効性が認められている擬ポテンシャルと、合金の融体構造の特徴を記述できることが確認されている剛体球模型を用いて行った金属溶液の活量係数に関する研究の成果をまとめたもので、次の 6 章から構成されている。

第 1 章では、本研究の金属物理学および冶金工学における位置づけを目的として、擬ポテンシャルを用いた金属溶液の熱力学量ならびに活量や相互作用パラメータに関する従来の研究を概観するとともに、本研究の具体的な目的ならびに内容について述べている。

第 2 章では、X 線構造解析の実験から剛体球模型により構造の特徴が良好に記述できることが知られている Na-K 系および Al-Mg 系合金を例にとり、擬ポテンシャルと剛体球模型に基づいて活量を算出し、実験値と比較を行い、このような液体論的、電子論的アプローチが溶融 2 元系合金の活量算出に有効であることを確認している。

第 3 章では、無限希薄溶液における溶質の活量係数について擬ポテンシャルと剛体球模型に基づく理論式を算出し、幾つかの系について直接計算を試みている。また冶金学的应用への立場から計算が複雑な擬ポテンシャル項を部分モル溶解熱を用いて表す近似式を提案し、その近似式による計算の有効性を確認している。

第 4 章では、多成分金属溶液の相互作用パラメータについて擬ポテンシャルと剛体球模型に基づく理論式を導出するとともに、前章での成果を踏まえて、擬ポテンシャル項の算出に際して 2 成分系における部分モル溶解熱を利用した近似式を提案している。さらにこの新しい近似式を用いて非鉄合金系 23 例ならびに鉄合金系 320 例の相互作用パラメータを算出し、実験値との比較から、本研究で求めた相互作

用パラメータの近似式は十分有用であることを明らかにしている。

第5章では、近年新しい機能材料として注目を集めているアモルファス金属の合金設計において、アモルファス金属の合金組成の変化に対するアモルファス形成能を予測するために、最近江上と早稲田により提出された原子サイズ効果を考慮したアモルファス形成能評価式に相互作用パラメータを導入した新たな評価式を導出している。さらに鉄基アモルファス金属についてその評価式の有効性を検討している。

第6章では、本研究で得られた成果を要約している。

論文の審査結果の要旨

近年微視的な金属電子論による巨視的な熱力学的諸量の記述が試みられているが、熱力学的性質の中でも冶金学的に重要である金属溶液の活量あるいは活量係数に関するこのような手法を用いた研究は殆ど行われていない。

本論文は、金属電子論において合金の原子間相互作用を記述するために有効な手段であることが認められている擬ポテンシャルと、金属および合金の融体構造の特徴を記述できることが認められている剛体球模型を用いて行った金属溶液の活量係数に関する研究をまとめたもので、その主な成果を要約すると次のとおりである。

- (1) 剛体球模型により液体構造の特徴が良好に記述できることが知られているNa-K系ならびにAl-Mg系合金の活量を擬ポテンシャルと剛体球模型を用いて算出し、実験値との比較を行い、このような剛体球模型と擬ポテンシャルを組み合わせる方法が2成分系合金溶液の活量の算出に有効であることを確認している。
- (2) 擬ポテンシャルと剛体球模型に基づき、2成分系合金溶液における溶質の無限希薄における活量係数の理論式を導出し、さらにそれをAlとPbを溶媒とする数種の合金溶液の活量係数の計算に適用し、その有効性を確認している。また冶金学的応用の立場から、計算が複雑な擬ポテンシャル項を部分モル溶解熱を用いて表す近似式を提案している。
- (3) 擬ポテンシャルと剛体球模型に基づき、多成分系合金溶液の相互作用パラメータの理論式を導出している。また実用的立場から、擬ポテンシャル項の算出に2成分系における部分モル溶解熱を用いた近似式を提案し、さらにこれらの式を用いて非鉄合金系23例ならびに鉄合金系320例の相互作用パラメータを算出して実験値との比較を行い、この近似式の有効性を明らかにしている。
- (4) アモルファス金属の合金設計におけるアモルファス形成能を予測するため、相互作用パラメータを導入した新たな評価式を導出するとともに、この評価式を鉄基アモルファス金属に適用し、その有効性を明らかにしている。

以上のように本論文は、微視的立場から金属溶液の活量係数ならびに相互作用について多くの新しい知見を与えており、その成果は学術・応用の両面において冶金物理化学ならびに冶金工学の分野に貢献するところが多い。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。