

溶融合金・イオン性融体の表面張力の熱力学計算

田中 敏宏・鈴木 賢紀

Prediction of Surface Tension of Liquid Alloys and Molten Ionic Mixtures

Toshihiro TANAKA and Masanori SUZUKI

Abstract

Since physico-chemical properties of liquid alloys, molten salts and molten slags affects various phenomena in crystal-growth process, the information on those properties is indispensable to control and design the new technical processes. We sometimes, however, come across a situation of lacking those information, and we have to estimate the properties from some fundamental physical quantities. This paper describes some procedures to predict the surface tension of liquid alloys, molten salts and molten slags. In addition, some useful literatures will be given on the prediction of the properties.

Keyword(s): surface tension, theoretical prediction, thermodynamic database, molten alloy, molten silicate slag

1. はじめに

溶融合金・イオン性融体の表面張力は、材料プロセスのデザインには欠かせない重要な基礎物性のひとつである。これまでも数多くの表面張力の測定が行われ、数多くの物性値情報が報告されており、インターネット社会にあってはそれらの情報の入手はそれほど困難ではない。しかしながら、これらの物性値の情報は限られた温度、組成、成分の組み合わせに対して記述されていることが多いため、新たなプロセスを設計する場合には、目的とする温度・組成に対する物性値が必ずしも入手できないことが多々ある。その際、物性値の推算がきわめて重要となってくる。特に多成分系融体に対する測定は必ずしも系統的に行われておらず、今後多様化する新規材料に対して、融体物性値を高精度に測定する技術の開発のみならず、推算技術の開発も併せて重要な課題となると考えられる。また、不純物をも考量した多成分系高温融体に対しては、第一原理計算では物性値の推算が難しい場合も多い。これに対して著者らは、合金・イオン性物質・酸化物の分野において、これまでに開発が進められてきた平衡状態図や各種熱力学反応の計算用熱力学データベースを利用して、これらの物質の多成分系における界面物性の推算を進めてきた¹⁻¹¹⁾。(Fig.1) 特に自由表面を制御する融体プロセスや、結晶成長の工程においては、平衡状態図や熱力学的反応の情報

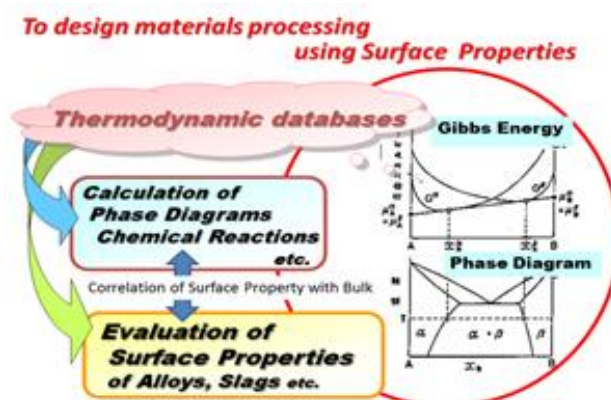


Fig.1 Concept for evaluation of surface properties from thermodynamic database.

と融体物性を密接に関連付けて評価できれば、材料プロセスの設計には非常に便利である。そこで、本稿では溶融合金・イオン性融体を主な例として、これらの融体の表面張力に焦点を当て、著者らの推算手法の概要を解説する。

2. 溶融合金・イオン性融体の表面張力の推算モデル

溶融合金の表面張力については、Speiser ら^{12,13)}が Butler の式¹⁴⁾を用いて熱力学量から表面張力を計算する

