

本書は Fe-C 系の活量値を調べる。

平成 22 年 4 月 6 日

株式会社材料設計技術研究所

別紙にて、Fe-C-O 系、Fe-CO-CO<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> における活量値を調べる。

- 最初に Fe-C 2 元系状態図を CaTCalc ソフトウェアを用いて計算した。図 1 と図 2 に結果を示す。4.08mol%C の位置を●印で示す。オーステナイト\_γ\_Fcc 相には数%の炭素が固溶する。

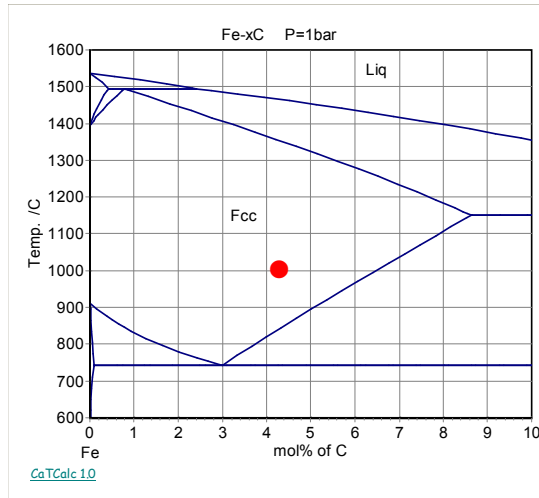


図 1 Fe-C 2 元系状態図

横軸：モル%

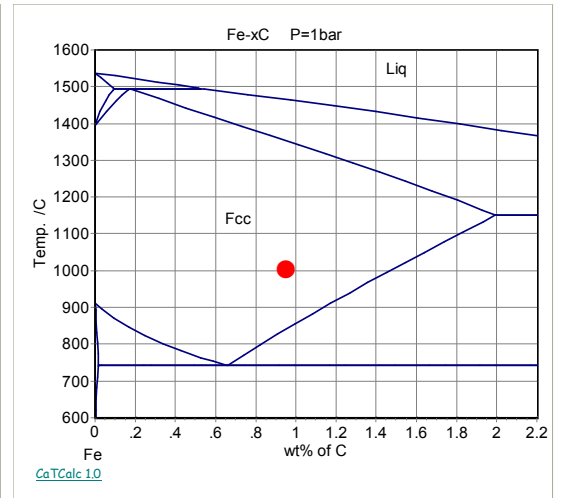


図 2 Fe-C 2 元系状態図

横軸：重量%

- 温度 1000°C、炭素濃度 4.08mol%C の 1 点を平衡計算してみよう。

計算指示画面

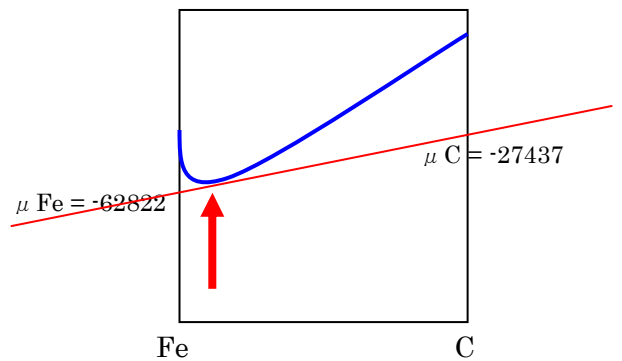
Feed/Activity Conditions		Set SER Elements	Unit /mol
Phase	Species	Select	Value
C(GRAPHITE)	C	Feed	4.08
Fe(BCC_A2)	Fe	Feed	b100

計算結果画面

List Viewer			
	P /bar		1
Phase	DataBase	T /C	1000
FCC_A1	FeCrNiO_C	Atom Amount	100
	Activity		1
Element	Fe		0.9592
Element	C		0.0408
SubLattice:0	Size		1
	Fe		1
SubLattice:1	Size		1
	Va		0.9574646
	C		0.04253545
Magnetic	BMag		-0.7
	TC		-67
Fe		kJ/mol	-62.82168
C		kJ/mol	-27.437
H	-0.003150308	kJ	3865.308
S	2640.095	J/K	7856.974
G	-787.1475	kJ	-6137.798

A

これより Fcc 自由エネルギーと化学ポテンシャル値の関係は下図となる。



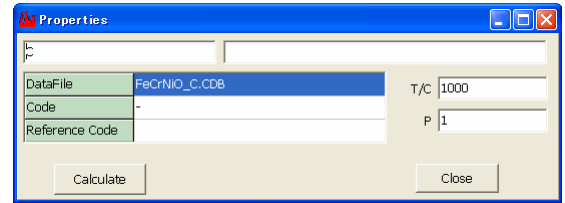
Main 画面にある相一覧から、Graphite 相をダブルクリックすると Properties 画面になる。温度値を確認して Calculate ボタンをクリックする。

Graphite 相の 1000°Cにおける G 値は

-20093.76 J/mol

**B**

を得る。



C	FeCrNiO_C.CDE								
T (C)	P (bar)	G (kJ/mol)	H (kJ/mol)	S (J/molK)	V (L/mol)	Cp (J/molK)	K (Pa)	VTE (K)	
1000	1	-20.09376	17.89436	29.8379	0	23.05432	0	0	0

1点計算結果画面において、 Mass のチェックボックスをクリックすると単位が mass になり、Fe-0.9065mass% と簡単に単位換算できる。

Phase	DataBase	T /C	
FCC_A1	FeCrNiO_C	Mass Amount	5405.849
		Activity	1
Element	Fe		0.9909348
Element	C		0.009065159
SubLattice:0	Size		1
	Fe		1
SubLattice:1	Size		1
	Va		0.9574646
	C		0.04253545
Magnetic	BMag		-0.7
	TC		-67
Fe		kJ/mol	-62.82168
C		kJ/mol	-27.437
H	-0.003150308	kJ	3865.308
S	2640.095	J/K	7856.974
G	-787.1475	kJ	-6137.798
F	-787.1475	kJ	-6137.798
U	-0.003150308	kJ	3865.308
C		J/K	3425.375
Volume			0

Only active phases  
 Mass  SubLattice

3. 温度 1000°C、炭素濃度 4.08mol%C の 1点における活量値を計算してみよう。

$$\mu [C] = G[C\text{-graphite}] + R \cdot T \cdot \ln a [C]$$

A 値と B 値を利用し

$$\begin{aligned} \text{Activity}[C] &= \exp \left( \frac{\mu [C] - G[C\text{-graphite}]}{R \cdot T} \right) \\ &= \exp \left( \frac{-27437 - (-20094)}{8.31451 \cdot 1273.15} \right) \\ &= 0.4997 \end{aligned}$$

活量値が求められる。

このように平衡計算すれば、どの点においても活量値を求めることができる。CaTCalc ソフトウェアは Global minimization 機能を標準装備しているので合金系でも酸化物系でも確実に 1点平衡計算を行う。

4. 炭素活量 0.5 の等活量線を計算してみよう。

計算指示画面

Temperature /C  
    
 Pressure /bar

Feed/Activity Conditions		Set SER Elements		Unit /mol	
Phase	Species	Select	Value		
C(GRAPHITE)	C	Log(A)	-0.30103		
Fe(BCC_A2)	Fe	Feed	b		

計算指示は  $\log_{10}(A)$  で行うため、 $\log_{10}(0.5)=-0.30103$  を入力する。  
 温度を 600 から 1800°Cと指定する。

計算結果画面

Phase	DataBase	P /bar	1	1	1	1	1	1	1	1
		T /C	990	995	1000	1005	1010	1015	1020	1025
SubLattice:0	Size		1	1	1	1	1	1	1	1
	Fe		1	1	1	1	1	1	1	1
SubLattice:1	Size		1	1	1	1	1	1	1	1
	Va		0.9585528	0.9580008	0.9574468	0.9568907	0.9563326	0.9557725	0.9552105	0.9546466
	C		0.04144722	0.04199918	0.04255321	0.0431093	0.04366739	0.04422747	0.04478948	0.04535339
Magnetic	BMag		-0.7	-0.7	-0.7	-0.7	-0.7	-0.7	-0.7	-0.7
	TC		-67	-67	-67	-67	-67	-67	-67	-67
Fe	kJ/mol		-62.01951	-62.42033	-62.82193	-63.22431	-63.62747	-64.03141	-64.43614	-64.84163
C	kJ/mol		-27.07605	-27.25338	-27.43115	-27.60939	-27.78807	-27.9672	-28.14678	-28.32681
H	-3.283583E-05	kJ	39.87074	40.08429	40.29835	40.51291	40.72798	40.94355	41.15962	41.37618
S	27.27968	J/K	81.55206	81.73263	81.91302	82.09321	82.27322	82.45304	82.63267	82.8121
G	-8.133408	kJ	-63.14174	-63.56495	-63.98921	-64.41453	-64.8409	-65.26833	-65.69682	-66.12635
F	-8.133468	kJ	-63.14174	-63.56495	-63.98921	-64.41453	-64.8409	-65.26833	-65.69682	-66.12635
U	-3.283583E-05	kJ	39.87074	40.08429	40.29835	40.51291	40.72798	40.94355	41.15962	41.37618
C	42.66022	J/K	42.76137	42.86228	42.96296	43.06341	43.16362	43.2636	43.36335	
Volume	0	L	0	0	0	0	0	0	0	0
ExtraFeed	C	mol	0.04144722	0.04199918	0.04255321	0.0431093	0.04366739	0.04422747	0.04478948	0.04535339

炭素濃度値は ExtraFeed 行に表示される。

活量指定で計算される分 ExtraFeed 値が全 mol 数に含まれないので、組成を再計算する。

ExtraFeed 値を e とし、炭素のモル%値を x とすると、

$$1000^{\circ}\text{C} \text{ の値 } e = 0.04255321$$

$$x = e / (1 + e) * 100$$

$$= 4.08163 \text{ mol\%C}$$

1000°Cにおいて炭素活量が 0.5  
 になる炭素濃度は 4.08163 mol%  
 である。

全ての温度の e 値を x 値に  
 変換すれば等活量線 (赤線)  
 が得られる。

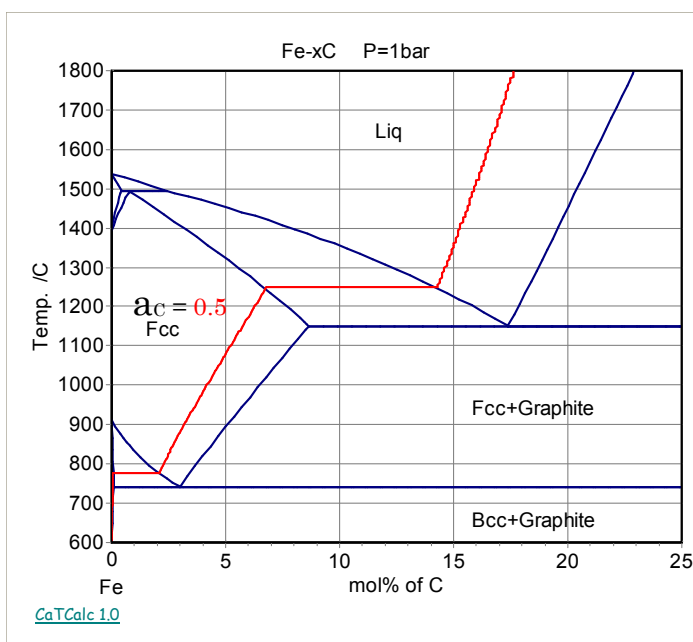


図3 Fe-C系における炭素の等活量線