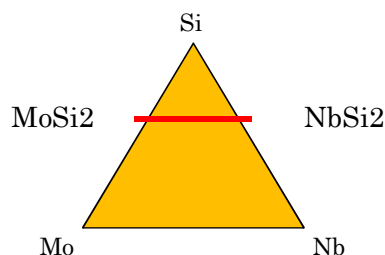


平成 23 年 10 月 11 日

CaTCalc ソフトウェアによる MoSi<sub>2</sub>-NbSi<sub>2</sub> 断面の計算

株式会社材料設計技術研究所

Mo-Nb-Si 3 元系における Si = (2/3) mol の断面は、下図の赤線の位置である。



CaTCalc ソフトウェアによる MoSi<sub>2</sub>-NbSi<sub>2</sub> 断面の計算結果を図 1 に示す。

計算には公開文献に記載されている熱力学パラメータ値を用いた。10 個の相を計算対象とした。

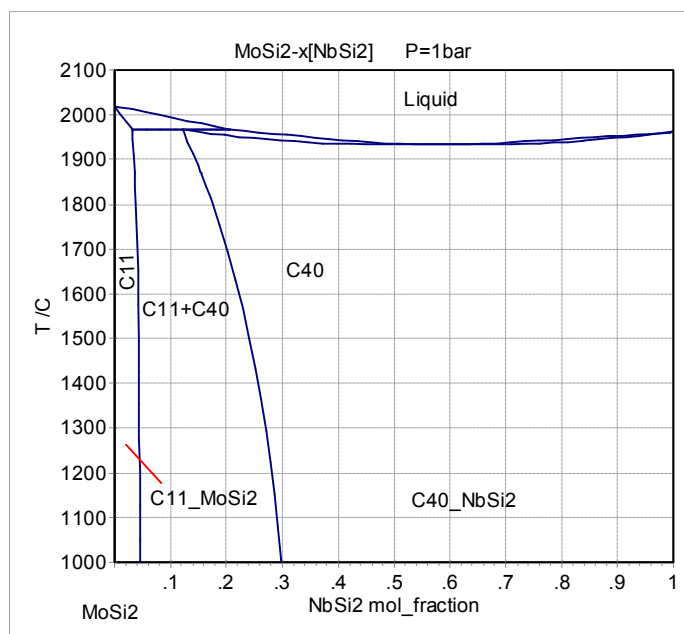


図 1 MoSi<sub>2</sub>-NbSi<sub>2</sub> 縦断面図

CaTCalc ソフトウェアは上記赤線の断面を正確に計算する。ここで「正確」とは？

この意味を説明するために、Mo-Si 2 元系状態図を図 2 に、Nb-Si 2 元系状態図を図 3 に示す。共に Si = (2/3) より少し Si が増えると液相との二相共存領域があり、液相は約 1400°C 以上で存在する。また、Si = (2/3) より少し Si が減っても液相との二相共存領域があり、液相は約 1900°C 以上で存在する。そこで、Si = 66.67mol% の断面を図 4 に、Si = 66.66mol% の断面を図 5 に示す。液相との二相共存領域を含む図となる。

このように Si = (2/3) の断面を計算した図 1 との違いがわかる。

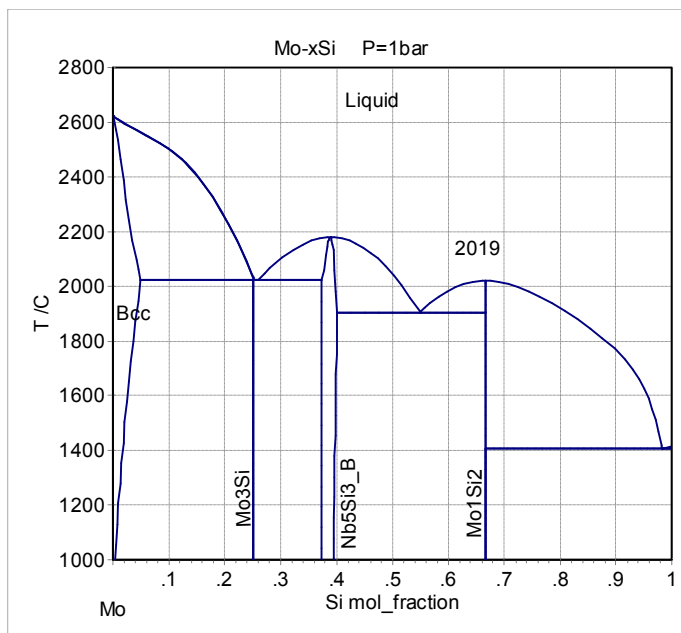


図 2 Mo-Si 2元系状態図

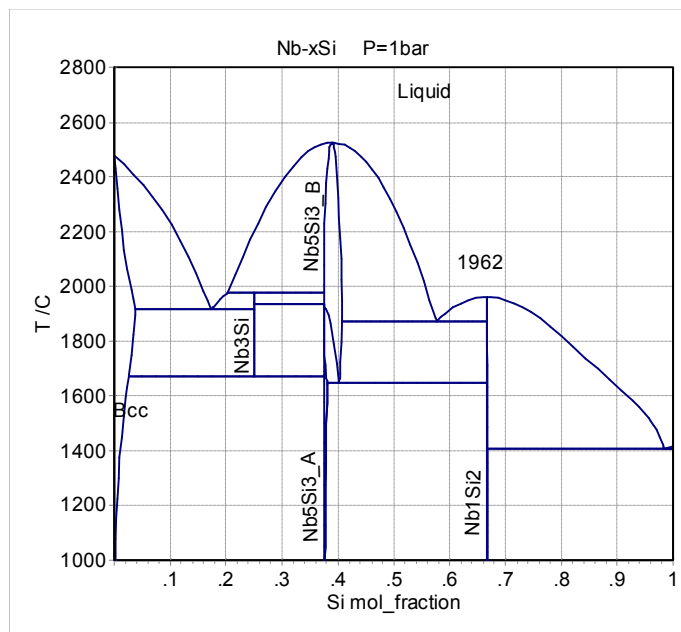


図 3 Nb-Si 2元系状態図

Mo-Nb 2元系状態図は単純な全率固溶型図

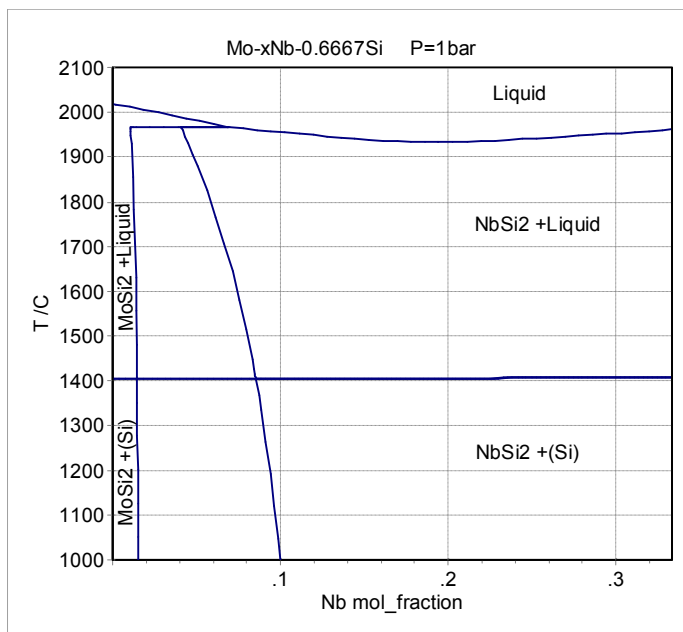


图 4 Mo-Nb-66.667mol%Si 断面图

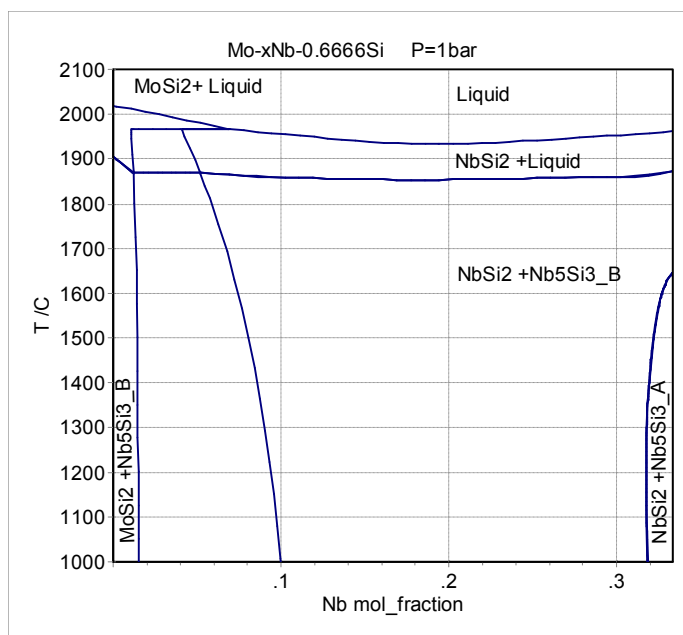
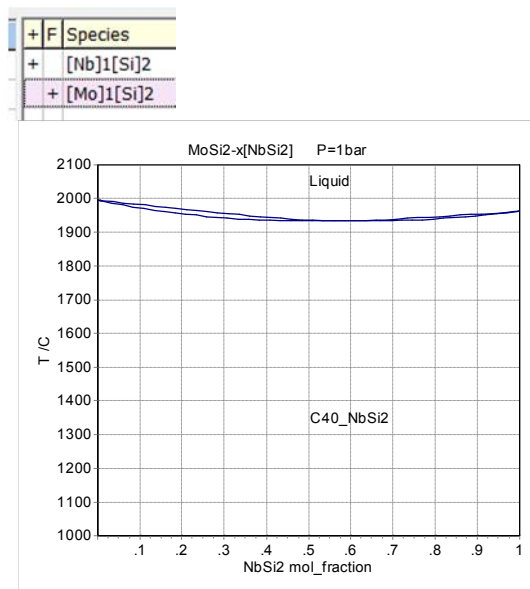


图 5 Mo-Nb-66.666mol%Si 断面图

CaTCalc ソフトウェアは準安定平衡計算を簡単にできる。(液相の3元系相互作用パラメータ値をそのまま利用するが、) 準安定な結晶の融点を推定できる。

- (1) MoSi<sub>2</sub> 相のエンドメンバーから MoSi<sub>2</sub> を除外した計算。10 個の相を計算対象とした。  
ただし、計算条件の Feed (入力組成) としては MoSi<sub>2</sub> を利用する。



計算結果

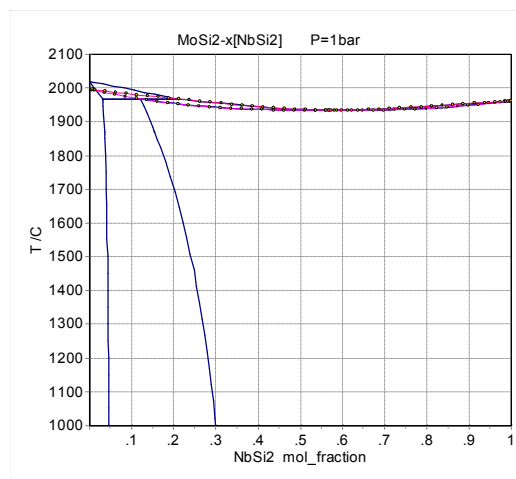
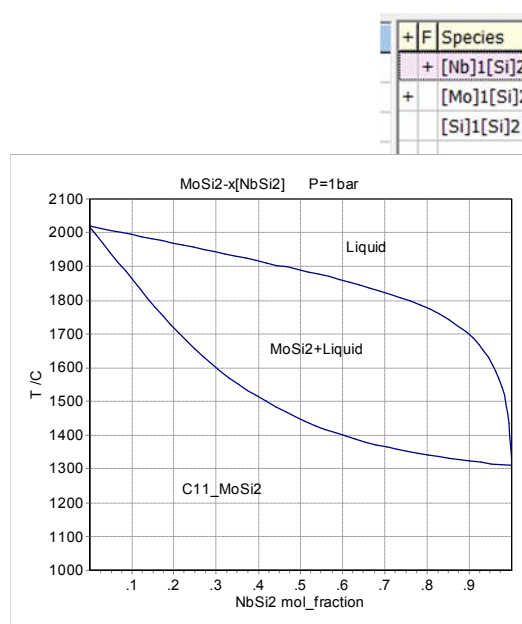


図 1 との重ね合わせ

- (2) NbSi<sub>2</sub> 相のエンドメンバーから NbSi<sub>2</sub> を除外した計算。  
ただし、計算条件の Feed (入力組成) としては NbSi<sub>2</sub> を利用する。



計算結果

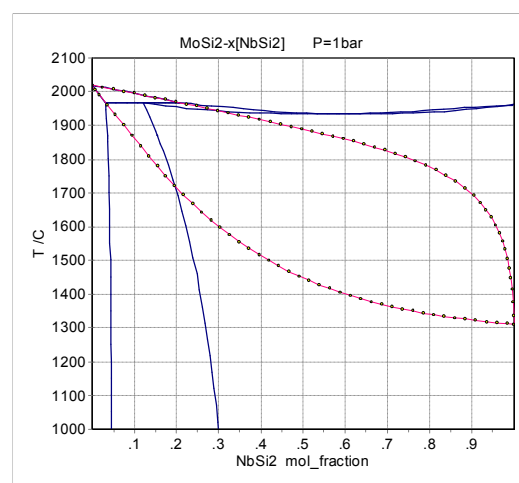


図 1 との重ね合わせ