

7-7 相互作用パラメータ値を変更できますか？

A： はい、変更できます。

熱力学データファイル形式がテキストの場合、具体的には TDB もしくは CDB の場合に限り、変更できます。

ここでは**仮想的なB元素とC元素**を用いて、パラメータ値を変更してみましょう。典型的な状態図を計算できることを体験できます。

なお、用いる元素は仮想であり、ボロンやカーボンを意味しません。

元素BとCを選択します。

Sample_BC.cdb ファイルを選択します。

液相 (Liquid) と固相 (Solid) の2つの相を利用します。

リチャードの法則を適用し融点を決めます。

正則溶体近似による固相 (Solid) の自由エネルギー

$$G^{Sol} = G_B^{Sol} x_B + G_C^{Sol} x_C + RT(x_B \ln x_B + x_C \ln x_C) + \Omega_{BC}^{Sol} x_B x_C$$

正則溶体近似による液相 (Liquid) の自由エネルギー

$$G^{Liq} = (G_B^{Sol} + R(T_B - T))x_B + (G_C^{Sol} + R(T_C - T))x_C + RT(x_B \ln x_B + x_C \ln x_C) + \Omega_{BC}^{Liq} x_B x_C$$

固相の状態を基準にします。 $G_B^{Sol} = 0$, $G_C^{Sol} = 0$

相互作用パラメータの値は共に+30000 が設定されています。液相2相分離型です。

具体的には

$$\Omega_{BC}^{Liq} = \text{Parameter G(Liquid;B,C;0)} \quad 298.15 \quad +30000; \quad 6000 \text{ N!}$$

$$\Omega_{BC}^{Sol} = \text{Parameter G(Solid;B,C;0)} \quad 298.15 \quad +30000; \quad 6000 \text{ N!}$$

です。

液相の相互作用パラメータ $\Omega^{Liq} = -20000, -10000, 0, +10000, +20000, +30000$

固相の相互作用パラメータ $\Omega^{Sol} = -15000, 0, +15000, +30000$

の組合せをそれぞれ設定 (値を上書きし cdb ファイルを保存) することで、典型的な状態図 (全率固溶型、共晶型など) を計算できます。

文献：

須藤一、田村今男、西澤泰二、金属組織学、丸善 (1972)、pp46.

杉本孝一ら、材料組織学、朝倉書店 (1991)、pp37.

西澤泰二、ミクロ組織の熱力学、日本金属学会 (2005)、pp82.

Temperature /K
100 2000 50

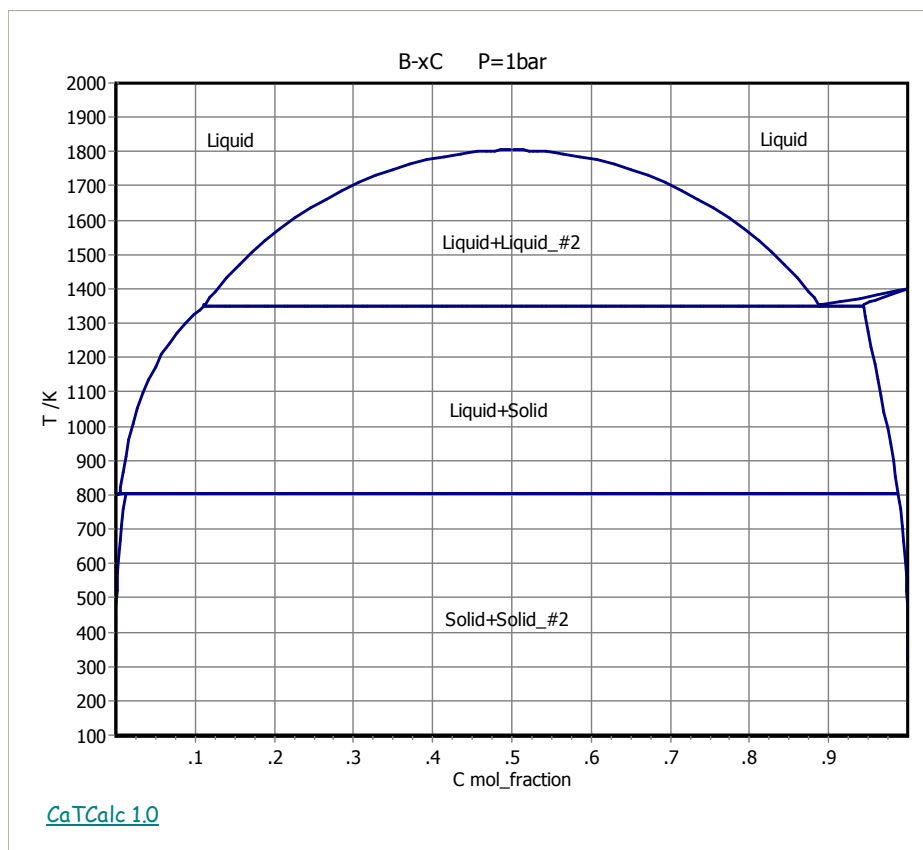
Pressure /bar
1

x 0 1 0.05

+ Phases	DataBase	Num	+ F	Species	T1(K)	T2(K)	Name
+ Liquid	Sample_BC	2	+ +	B	298.15	6000	
+ Solid	Sample_BC	2	+ +	C	298.15	6000	

Feed/Activity Conditions		Set SER Elements	Unit /mol	
Phase	Species	Select	Value	
Liquid	B	Feed	b	
Liquid	C	Feed	x	

計算指示の例

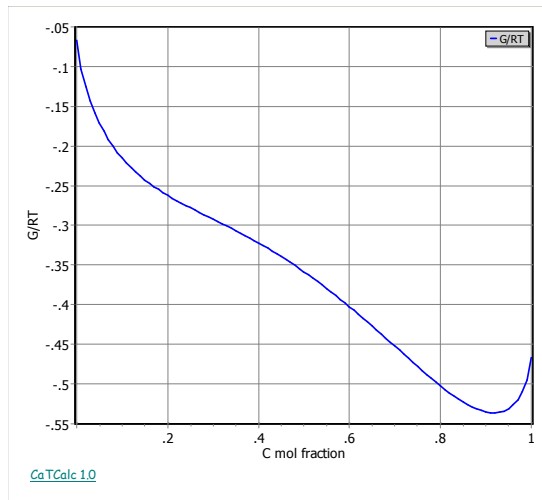


計算結果

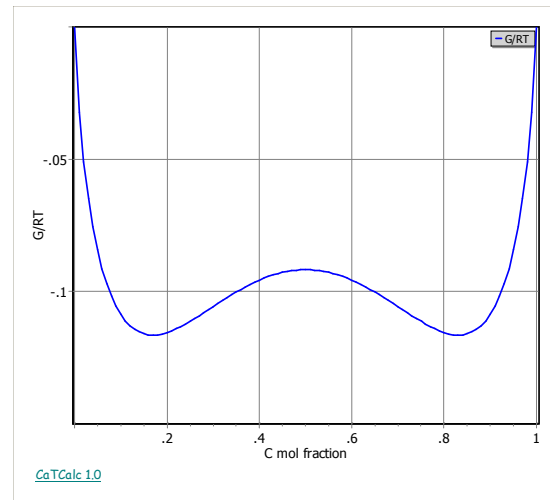
固相、液相の相分離を自動的に計算します

組成・自由エネルギー曲線図を出力できます。

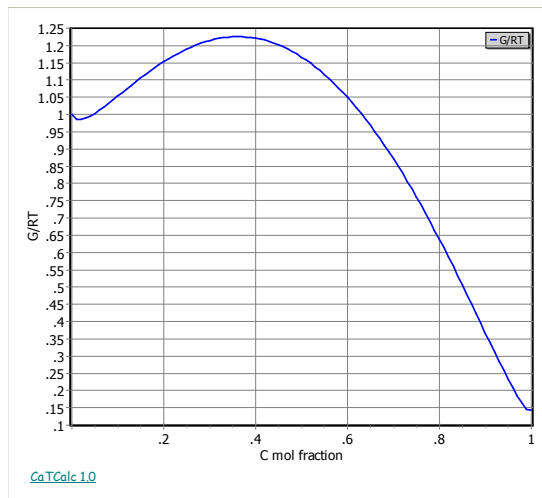
$\Omega^{\text{Liq}} = +30000$ 、 $\Omega^{\text{Sol}} = +30000$ の場合



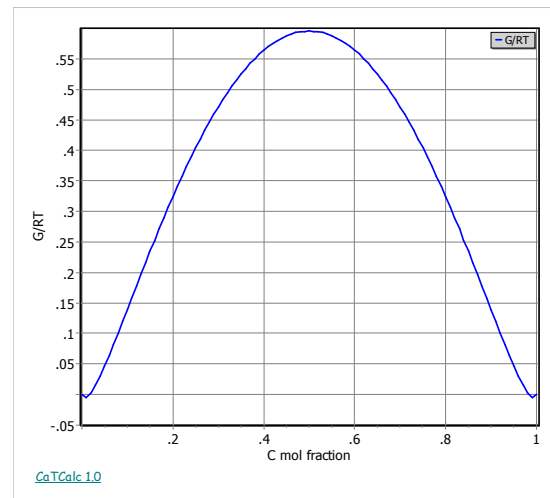
温度 1500 K 液相 (Liquid)



固相 (Solid)



温度 700K 液相 (Liquid)



固相 (Solid)

