

Ar-C-O-Pu 系の化学平衡計算

入力値： Ar 0.1mol
C 1 mol
O 0.1mol
Pu 1 mol

温度：1900K
気圧：1 気圧

Set SER Elements		Unit /mol	
Species	Select	Value	
Ar	Feed	0.1	
C	Feed	1	
O	Feed	0.1	
Pu	Feed	1	

CaTCalc

計算結果： 4つの相が平衡する

PuC_solid	0.79998 mol
PuC1.5_solid	0.13334 mol
Pu2O3_solid	0.03333 mol
Gas	0.10000 mol

Gas 相中のガス種のモル比率

Ar	0.9999444
Pu	5.377E-05
CO	1.573E-06
PuO	2.692E-07
PuO2	4.330E-13

放射性物質を含む系の量を入力し、温度、圧力を変化させることで、その条件下の平衡状態を求められます。たとえば温度を 500K にするとガスは主に Ar だけになり、他のガス種は $10^{*(-34)}$ 以下となります。入力値は文献 77Bes と同じ値です。この文献は化合物相の自由エネルギーを $a + b*T$ の項のみで表現しているため、計算結果値は少し違います。さらに化合物相のデータの有る無しが計算結果値に大きく影響するため、データベースファイルにデータが登録されているか事前に確認することが重要です。

CaTCalc は Species-mol 単位を用いて化学平衡計算をおこなうため、入力値合計 2.2 mol に対して、計算結果の 4つの相の合計 1.07 mol を単純に比較するのではなく、それぞれの元素に分割すれば保存則が成り立っています。

文献 77Bes :

SOLGASMIX

Theodore M. Besmann, OAK RIDGE NATIONAL LABORATORY report, (1977)