

Fe-O ポテンシャル図

2021 年 4 月 18 日

CaTCalc SE basic を起動する。

Fe-O 二元系平衡状態図を計算する。 IdealGas.adb と RICT-BasicDB.edb を選択した。

1. ポテンシャル図を計算する

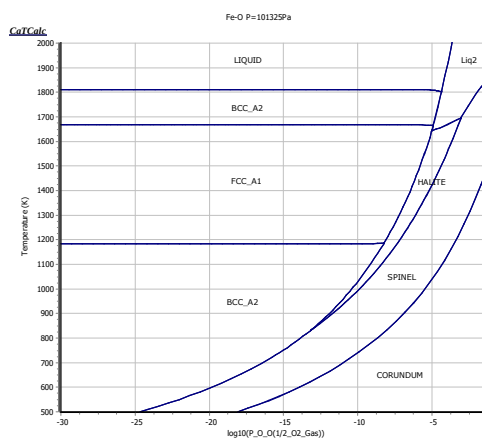
平衡状態図の計算指示画面にて、

酸素に対しては、Unit 列から “log10(P)” (分圧指定) を選択する。範囲を **-30 -1** とする。Calculate ボタン

Phase	Species	Unit	Value
Fe(BCC_A2)	Fe	mol	b
O(1/2_O2_Gas)	O	log10(P)	x

Temperature (K): 500 3000
Pressure (Pa): 101325

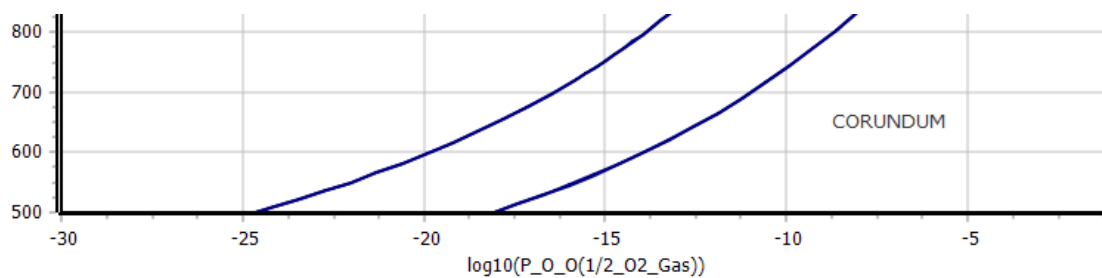
計算結果



縦軸 温度 (K)

横軸を確認すると下図の通り。

酸素 O₂ の分圧を正しく指示していなかった。



2. ポテンシャル図を再度計算する

酸素に対して、

Phase 列から Gas を選択する、

Species 列から O₂ を選択する、

Unit 列から “log10(P)” (分圧指定) を選択する。範囲を **-40 -1**

とする。Calculate ボタン

Feed/Activity Conditions				Default Unit: mol (formula)	
Phase	Species	Unit	Value		
Fe(BCC_A2)	Fe	mol	b		
Gas	O ₂	log10(P)	x		

X: -40 -1

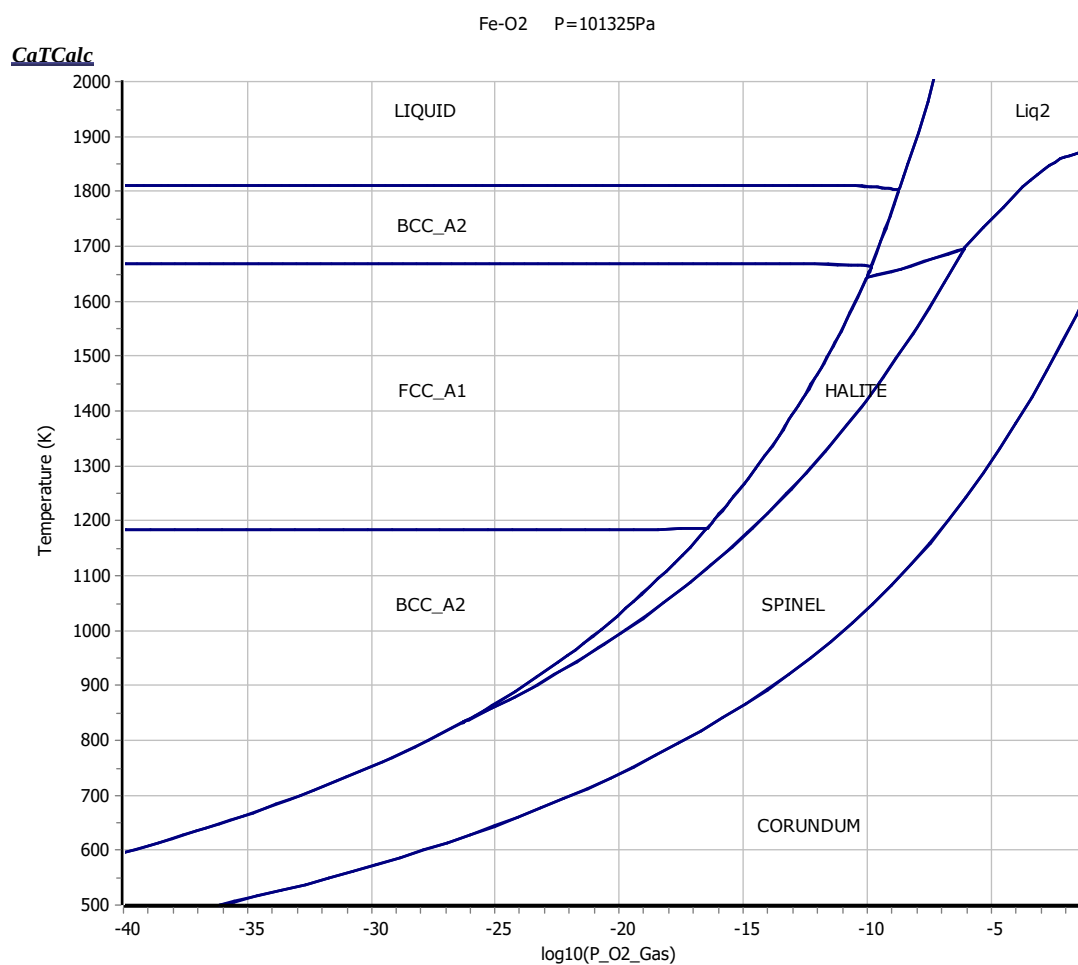
Set Elements Add Feed Clear Feed Set Default Values

☐ Equilibrium Calc
☒ Phase Diagram

Temperature (K): 500 3000

Pressure (Pa): 101325

計算結果



3. 文献値を確認する

鉄鋼精錬、日本金属学会、1979. の図 2.4 に「鉄－酸素系状態図(酸素分圧 P_{O_2} の単位 Pa)」がある。温度 800K における補助線を見ると、マグネタイト(Spinel)に対しては 10^{-23} 、ヘマタイト(Corundum)に対しては 10^{-11} 酸素分圧と読み取れる。単位を変え、 $1 \text{ bar} = 100000 \text{ Pa}$ とすると、ヘマタイト(Corundum, Fe_2O_3) は、 10^{-16} bar となる。同文献の図 2.1 にエリンガム図「各種酸化物の生成自由エネルギー温度－酸素圧線図」がある。反応「 $4Fe_3O_4 + O_2 = 6Fe_2O_3$ 」の温度 800K にける酸素分圧を定規をあてて確認すると、約 10^{-16} と読み取れる。

鉄冶金熱力学、大谷正康、日刊工業新聞社、1971. の図 3.31 に「Fe-O 状態図と P_{O_2} の関係」がある。補助線の単位が明記されていないが、「鉄鋼精錬」の図とは 10^{-5} の違いがあるので、bar もしくは atm と思われる。

同文献の図 2.24 に「 $\Delta G^0 = RT \ln P_{O_2}$ - 温度線図 (酸化物系)」がある。この図には酸素分圧の単位が atm とある。反応「 $4Fe_3O_4 + O_2 = 6Fe_2O_3$ 」の温度 800K にける酸素分圧を定規をあてて確認すると、約 10^{-16} と読み取れる。