

OpenCalphad 6.058 ソフトウェアを起動し、
マクロファイル uniquac.OCM を実行する。
すると計算処理が始まり、本書の Fig.1 から Fig.9 が画面表示される。

Fig.8 A-B 二成分の相図

液相の相分離

A = アセトニトリル

C₂H₃N

B = ヘプタン

C₇H₁₆

Fig.9 A-B-C 三成分の温度320K 等温断面図

A = アセトニトリル

ACETONITRILE

C₂H₃N

B = ヘプタン

N_HEPTANE

C₇H₁₆

C = ベンゼン

BENZENE

C₆H₆

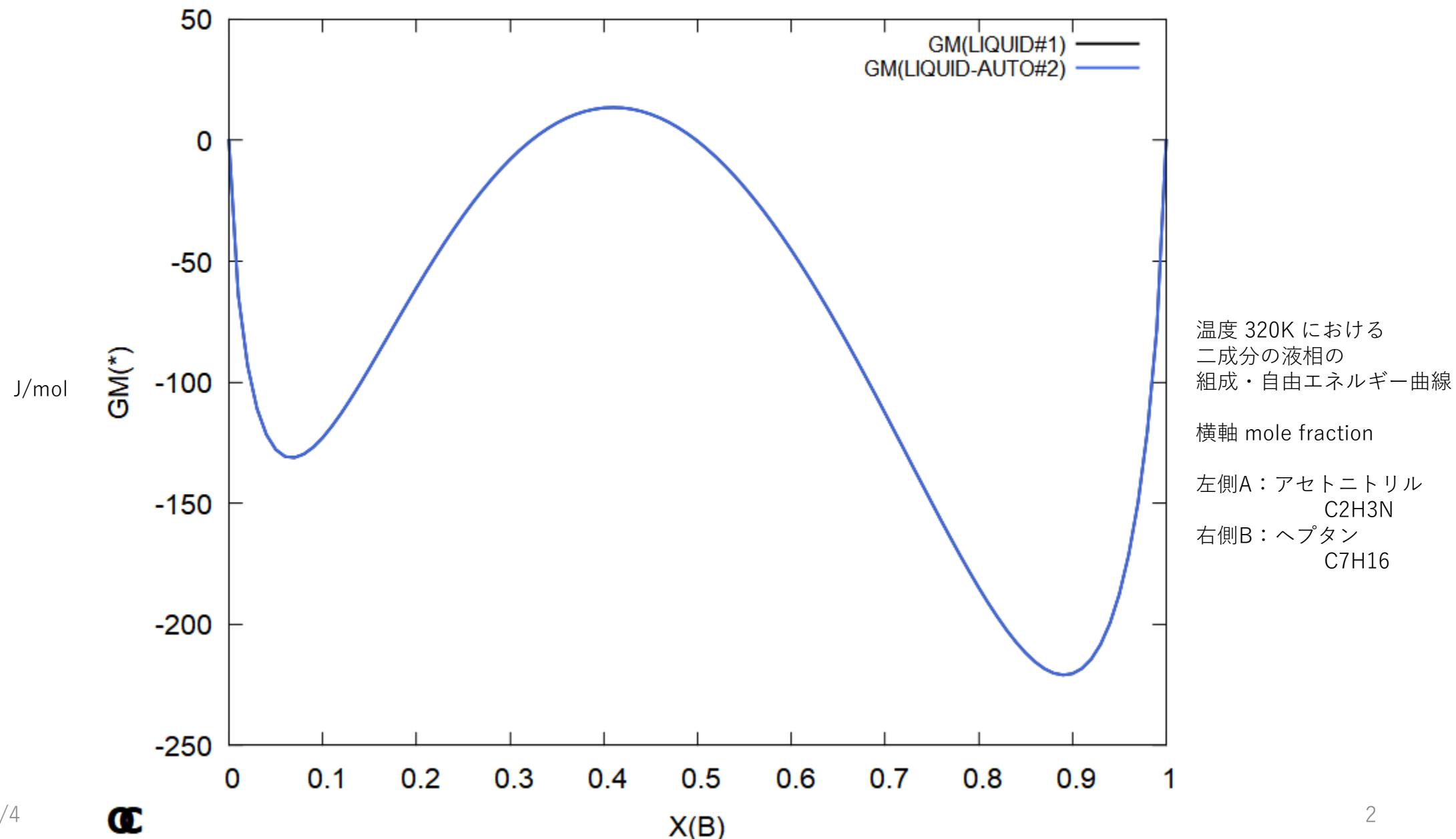
OpenCalphad とは www.opencalphad.com
github site からファイルをダウンロードできるオープンソフトウェアである。

UNIQUAC : universal quasi-chemical

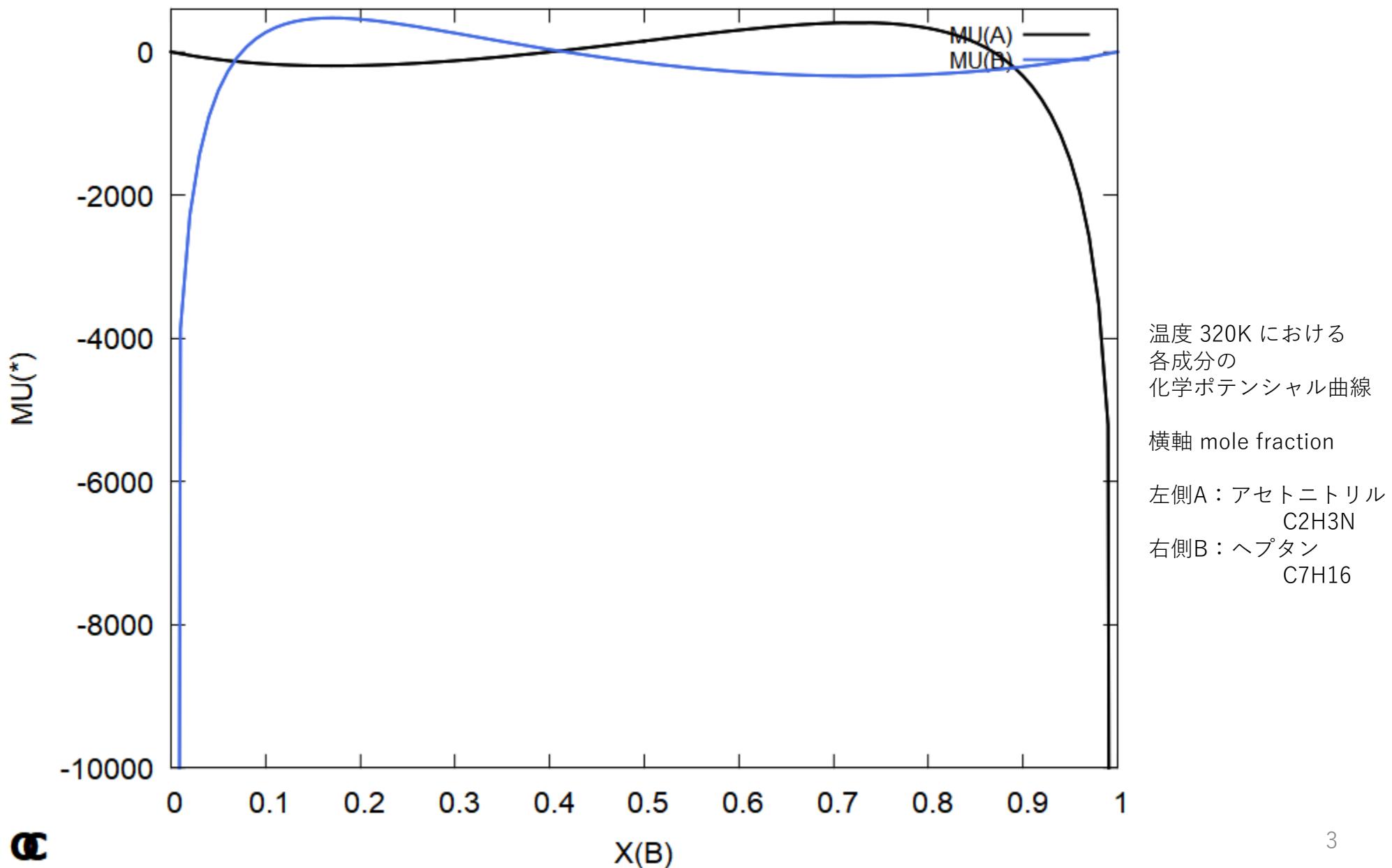
文献 :

Implementation of the UNIQUAC model in the OpenCalphad software.
J.Li, B.Sundman, J.G.M.Winkelmann, A.I.Vakis, F.Picchioni, Fluid Phase Equilibria, 507 (2020), 112398.

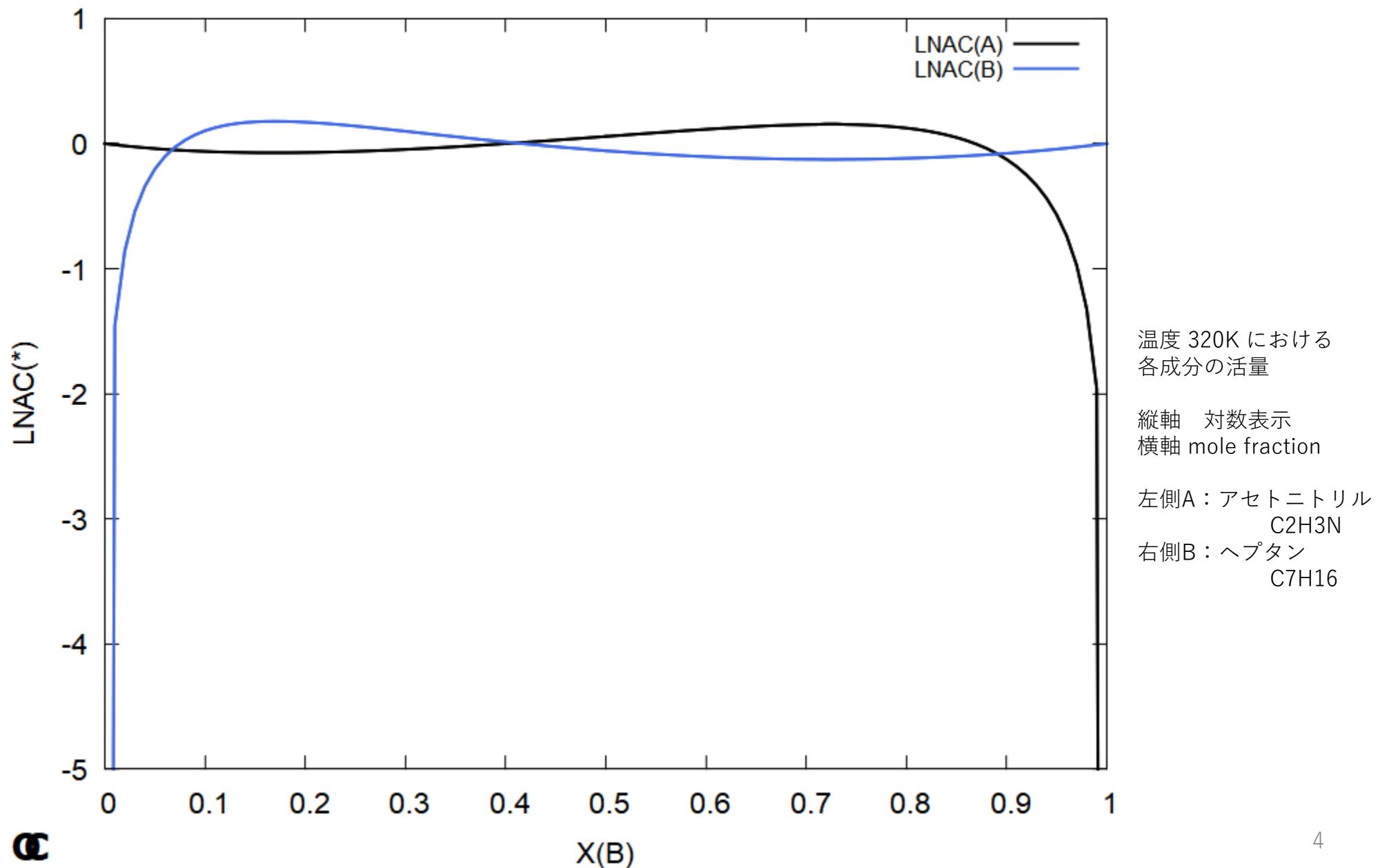
OpenCalphad 6.058 : 2023-08-03 : with GNUPLOT uniuquac fig 1
T=320, P=100000, N=1, X(B)=X,



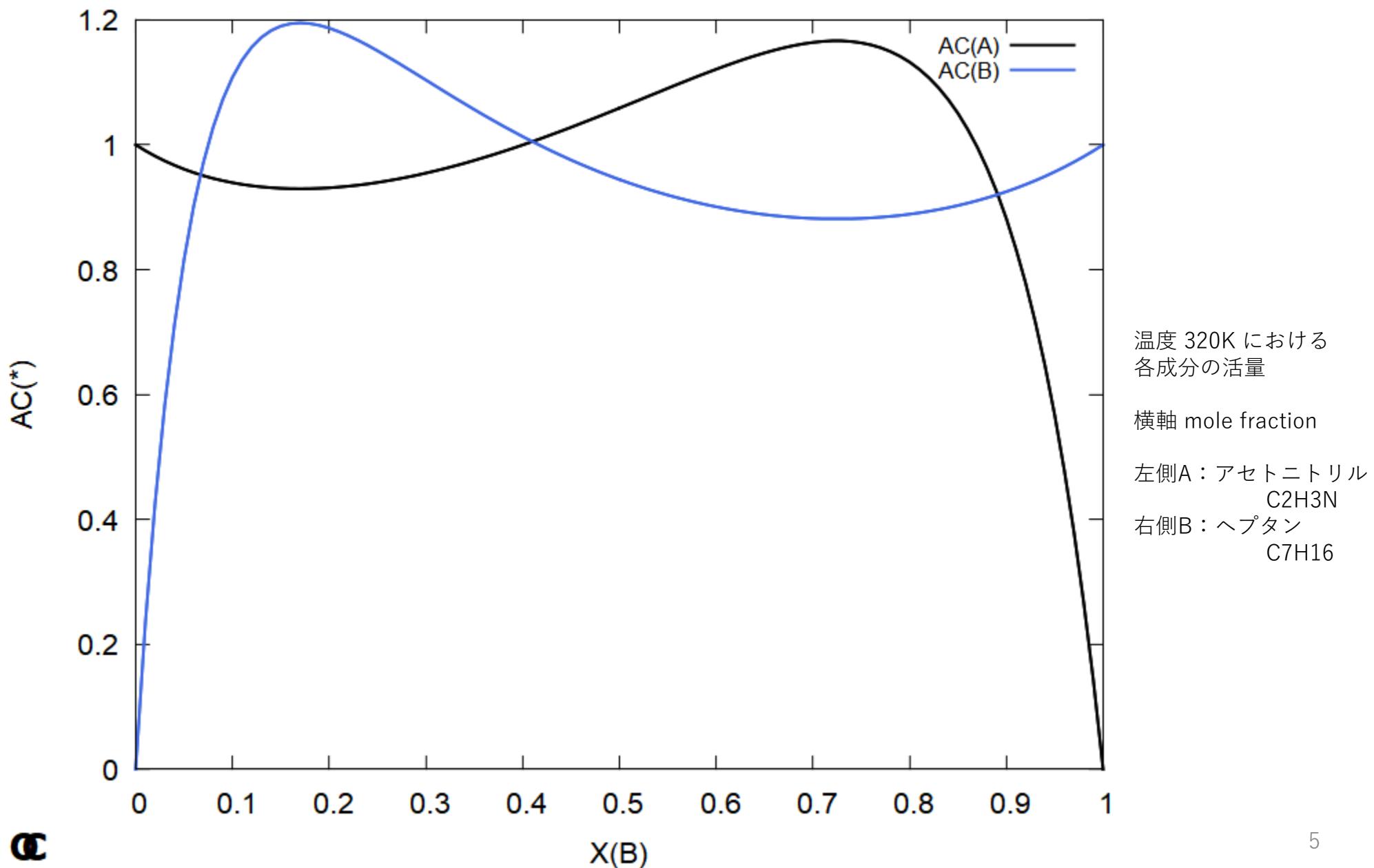
OpenCalphad 6.058 : 2023-08-03 : with GNUPLOT uniuquac fig 2
T=320, P=100000, N=1, X(B)=X,



OpenCalphad 6.058 : 2023-08-03 : with GNUPLOT uniuquac fig 3
T=320, P=100000, N=1, X(B)=X,

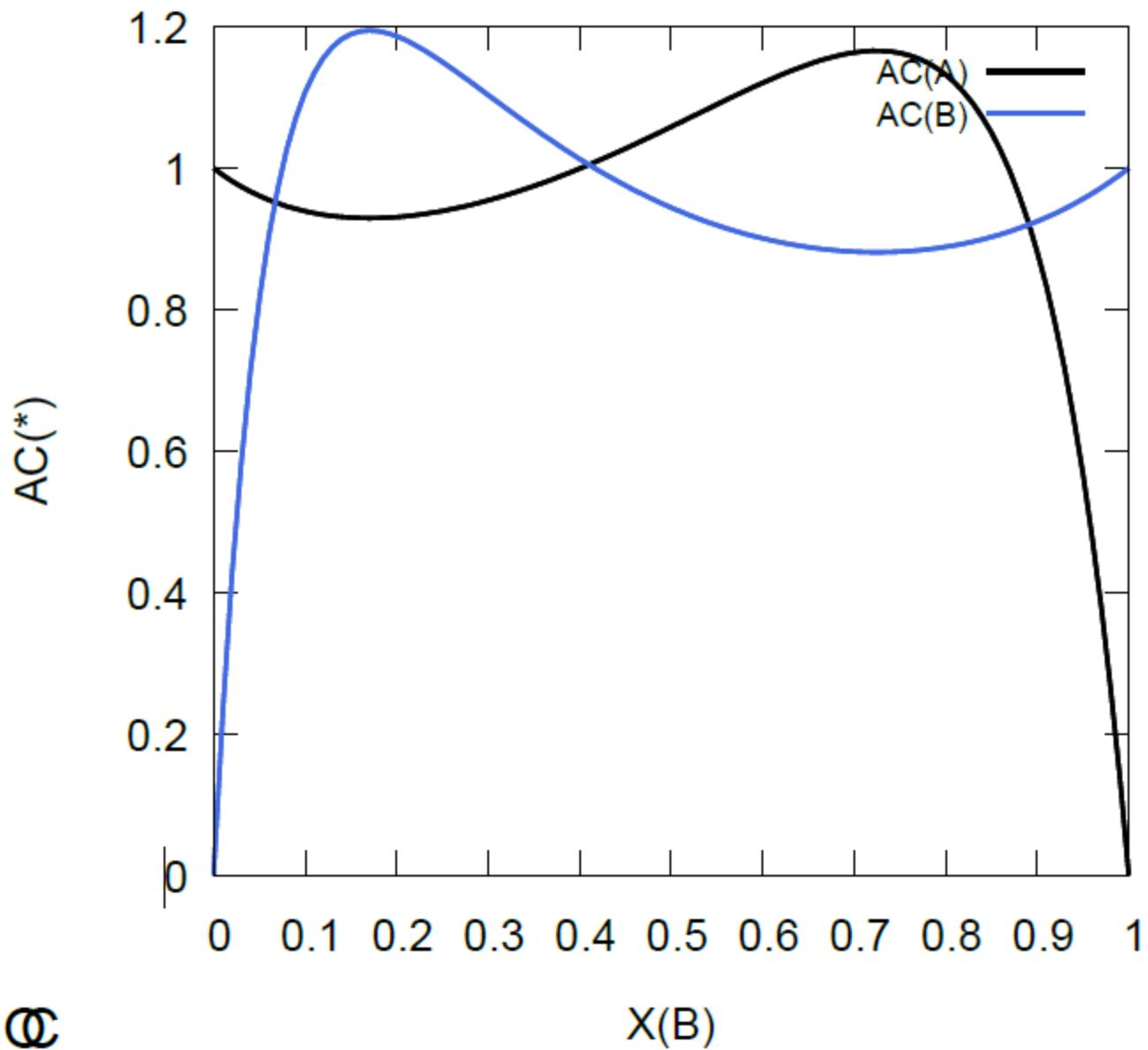


OpenCalphad 6.058 : 2023-08-03 : with GNUPLOT uniuac fig 4
T=320, P=100000, N=1, X(B)=X,

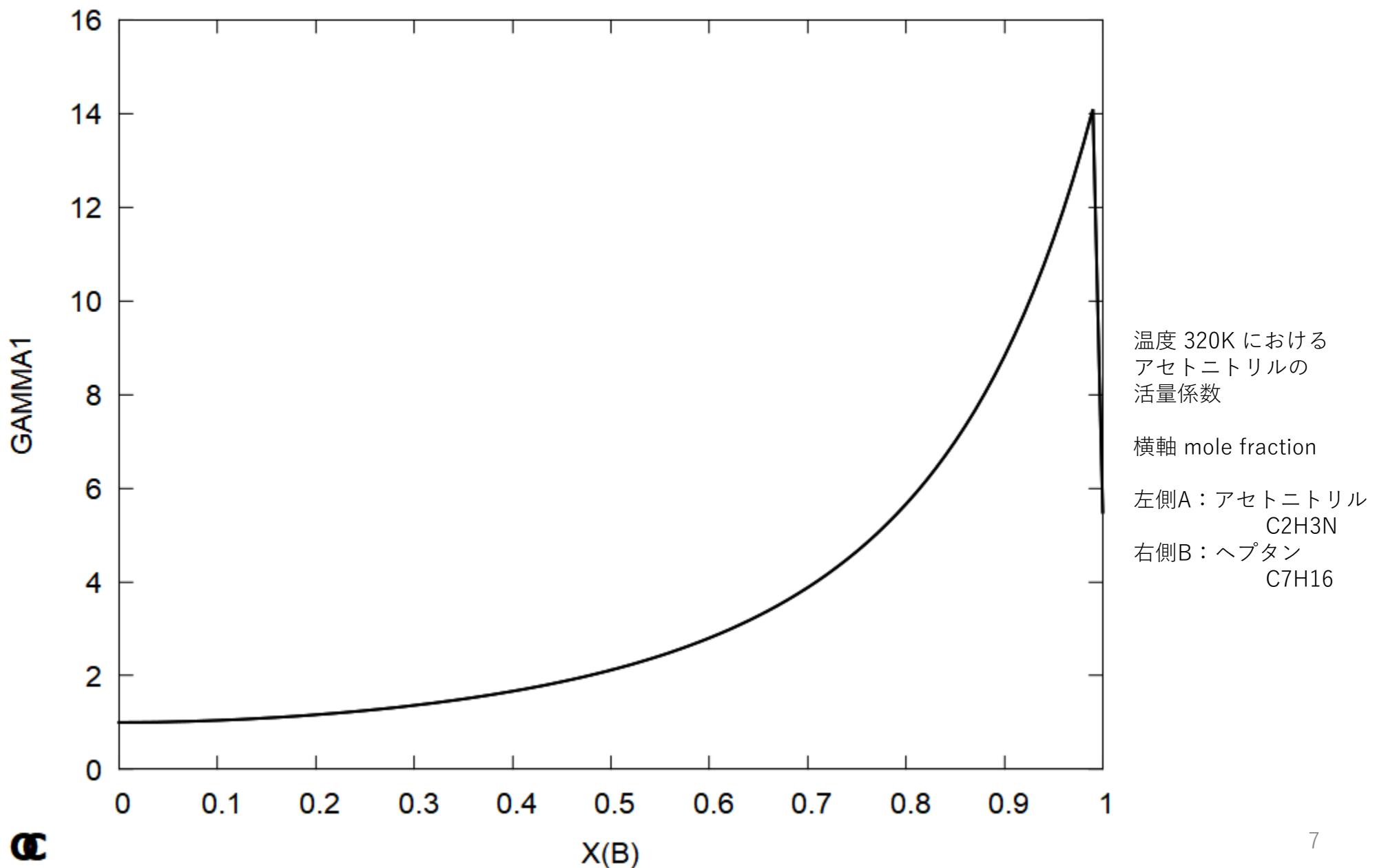


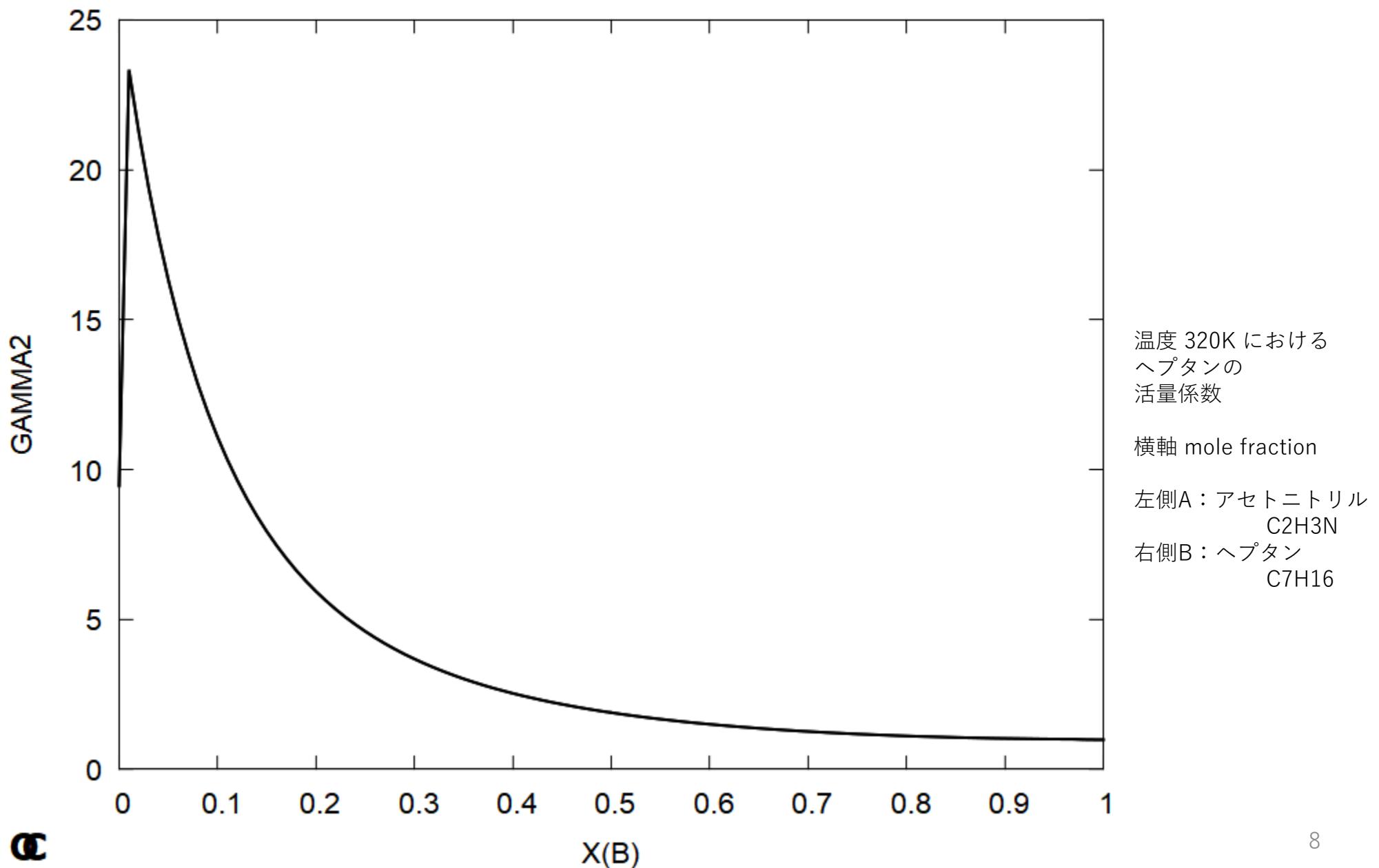
Windows フォルダ内
Square.pdf

OpenCalphad 6.058 : 2023-08-03 : with GNUPLOT uniuac fig 5
T=320, P=100000, N=1, X(B)=X,

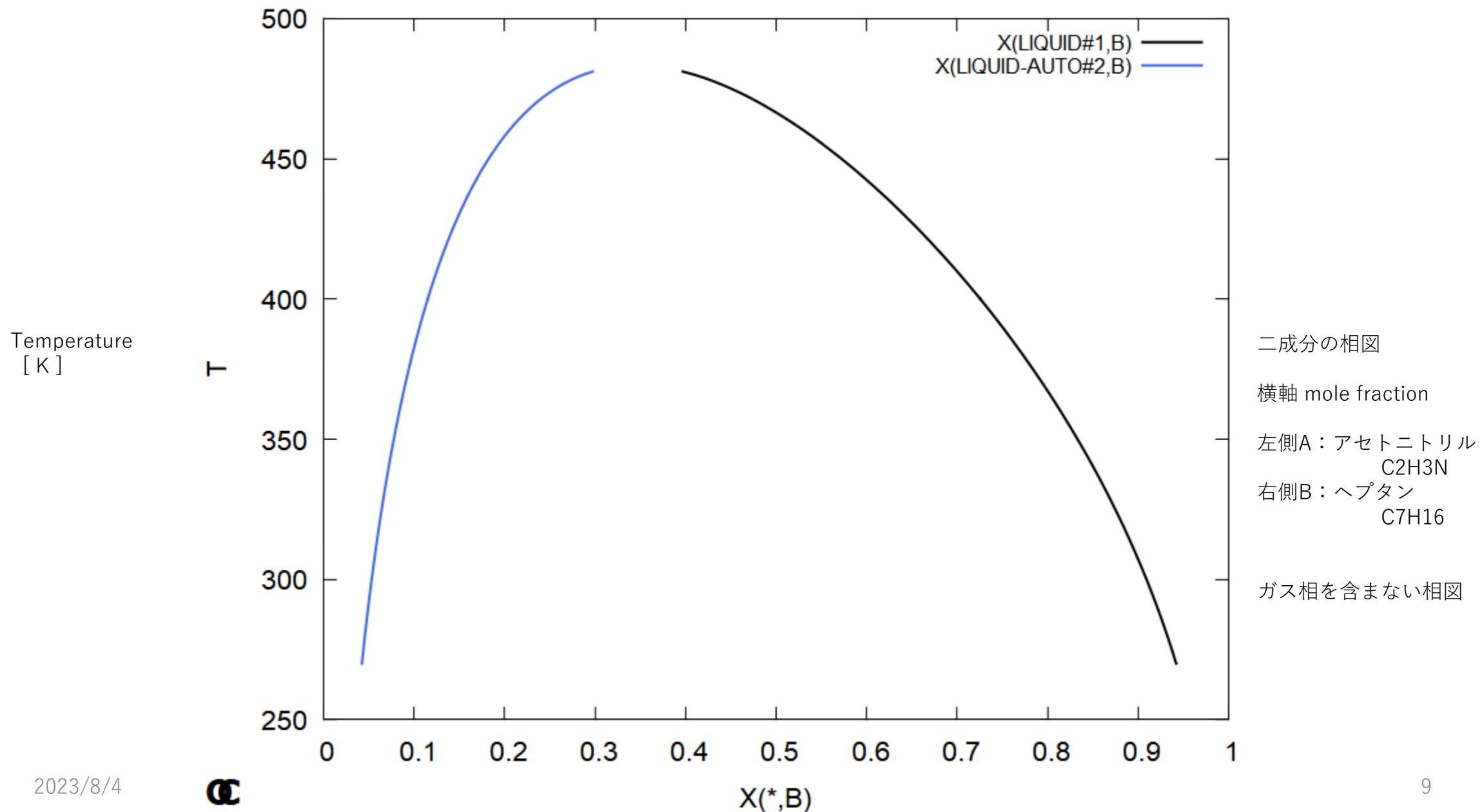


OpenCalphad 6.058 : 2023-08-03 : with GNUPLOT uniuquac fig 6
T=320, P=100000, N=1, X(B)=X,

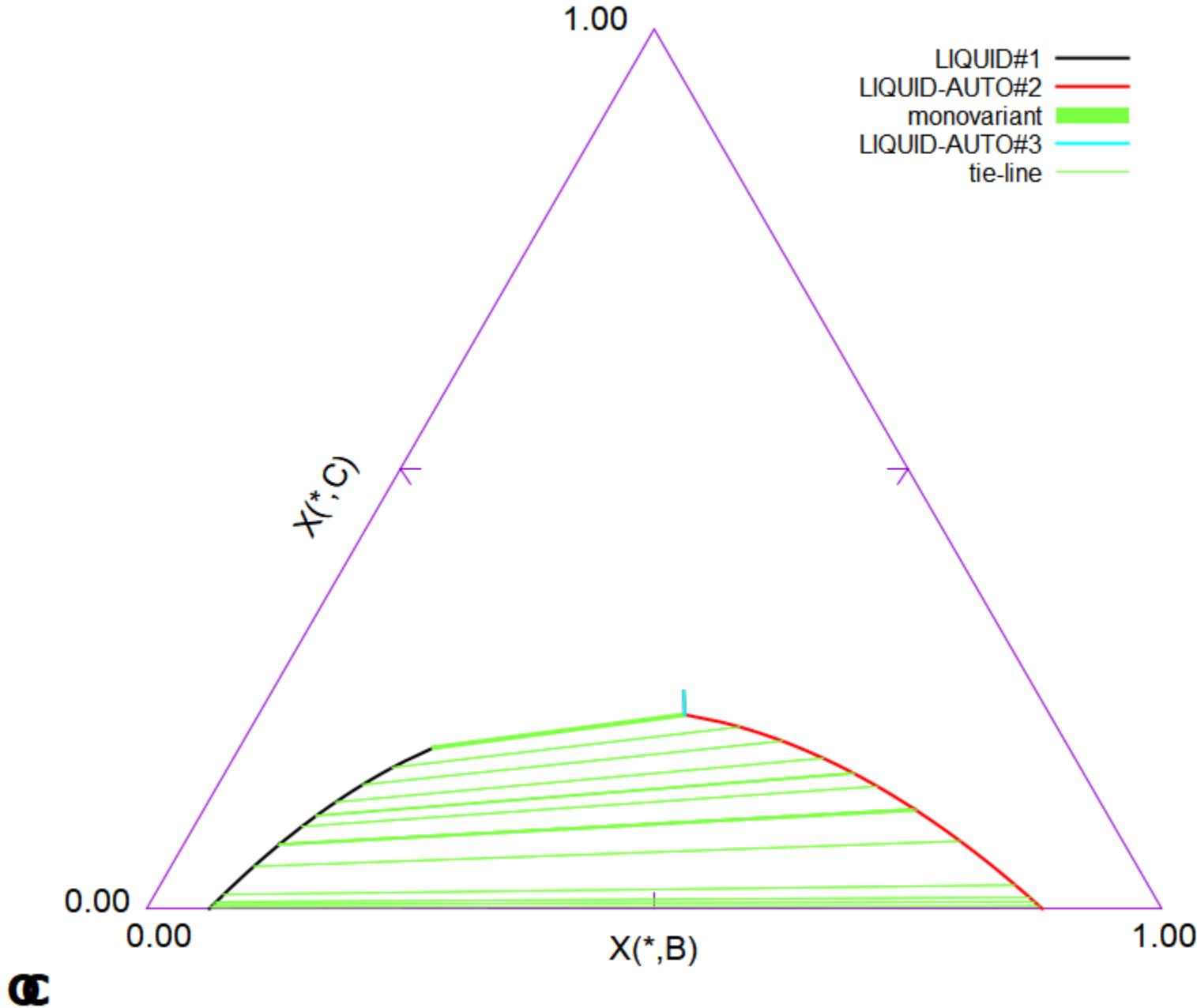




OpenCalphad 6.058 : 2023-08-03 : with GNUPLOT uniuquac fig 8
T=Y, P=100000, N=1, X(B)=X,



OpenCalphad 6.058 : 2023-08-03 : with GNUPLOT uniuquac fig 9
T=320, P=100000, N=1, X(B)=X, X(C)=Y,



温度 320K における
三成分の等温断面図

軸 mole fraction

左下A：アセトニトリル
C2H3N

右下B：ヘプタン
C7H16

上 C : ベンゼン
C6H6