

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	C ₂ H ₃ N
B = ヘプタン	C ₇ H ₁₆

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	C ₂ H ₃ N
B = ヘプタン	N_HEPTANE	C ₇ H ₁₆
C = ベンゼン	BENZENE	C ₆ H ₆

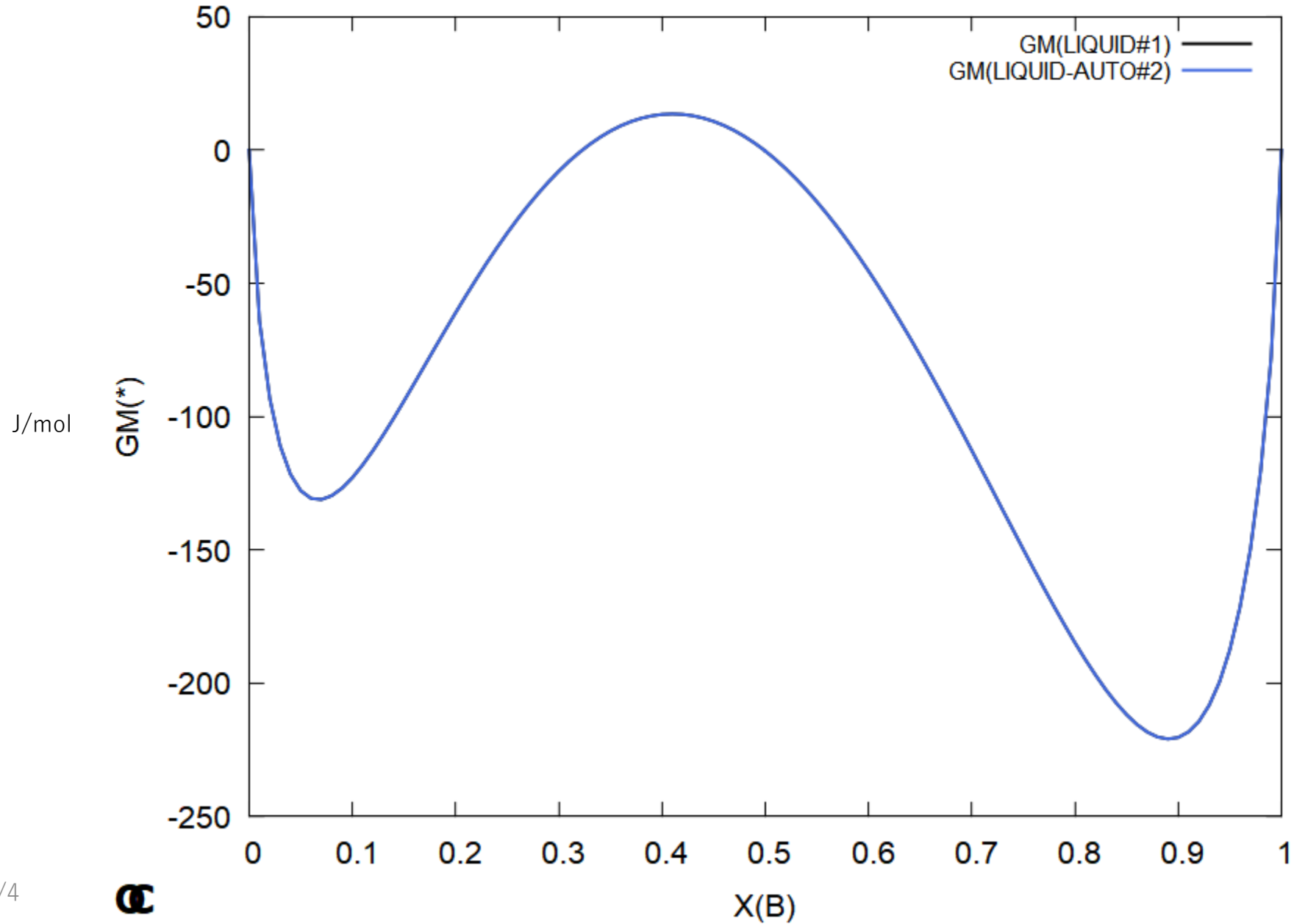
OpenCalphad とは www.opencalphad.com
github site からファイルをダウンロードできるオープンソフトウェアである。

UNIQUAC : universal quasi-chemical

文献 :

Implementation of the UNIQUAC model in the OpenCalphad software.

J.Li, B.Sundman, J.G.M.Winkelman, A.I.Vakis, F.Picchioni, Fluid Phase Equilibria, 507 (2020), 112398.

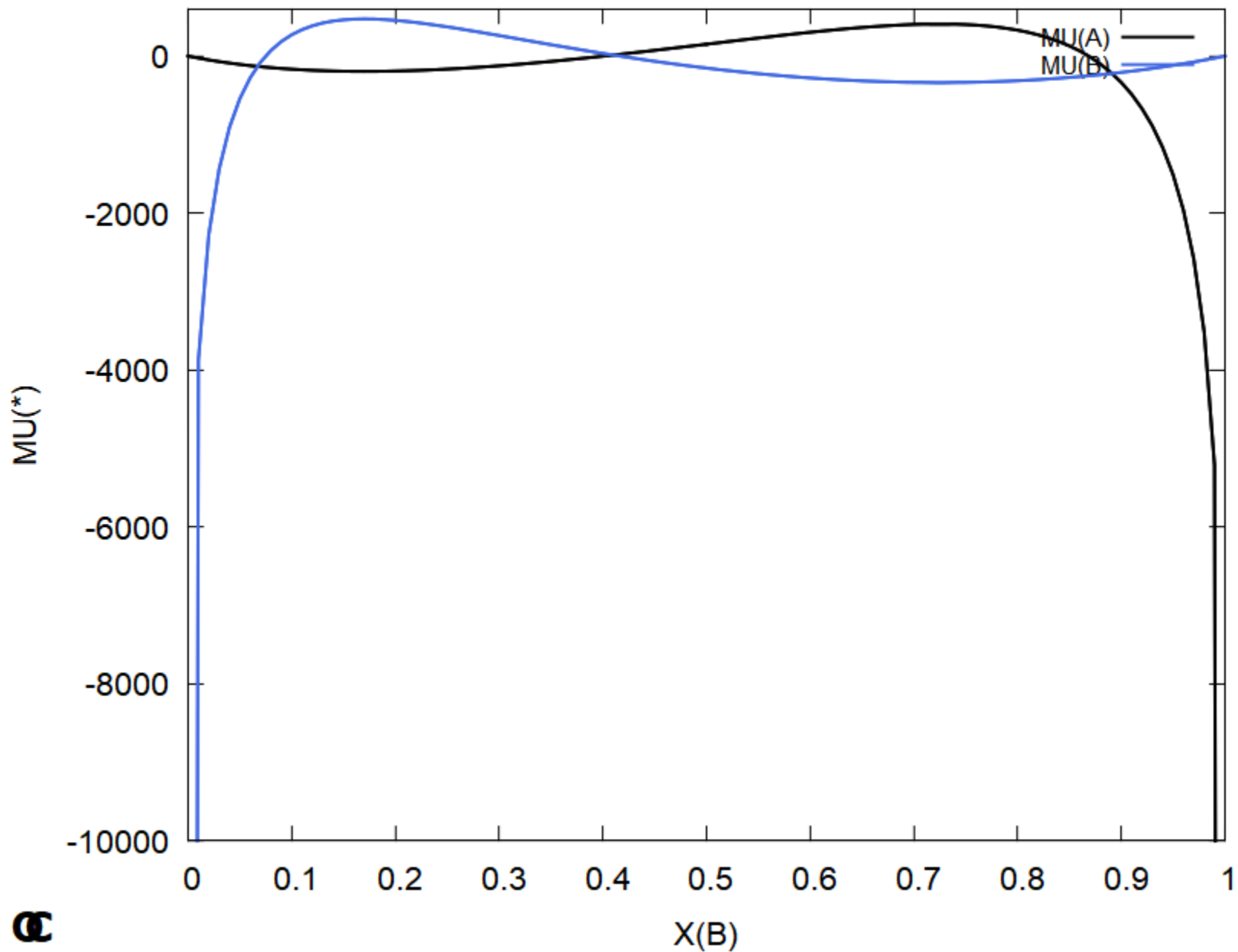


温度 320K における
二成分の液相の
組成・自由エネルギー曲線

横軸 mole fraction

左側A : アセトニトリル
C₂H₃N

右側B : ヘプタン
C₇H₁₆

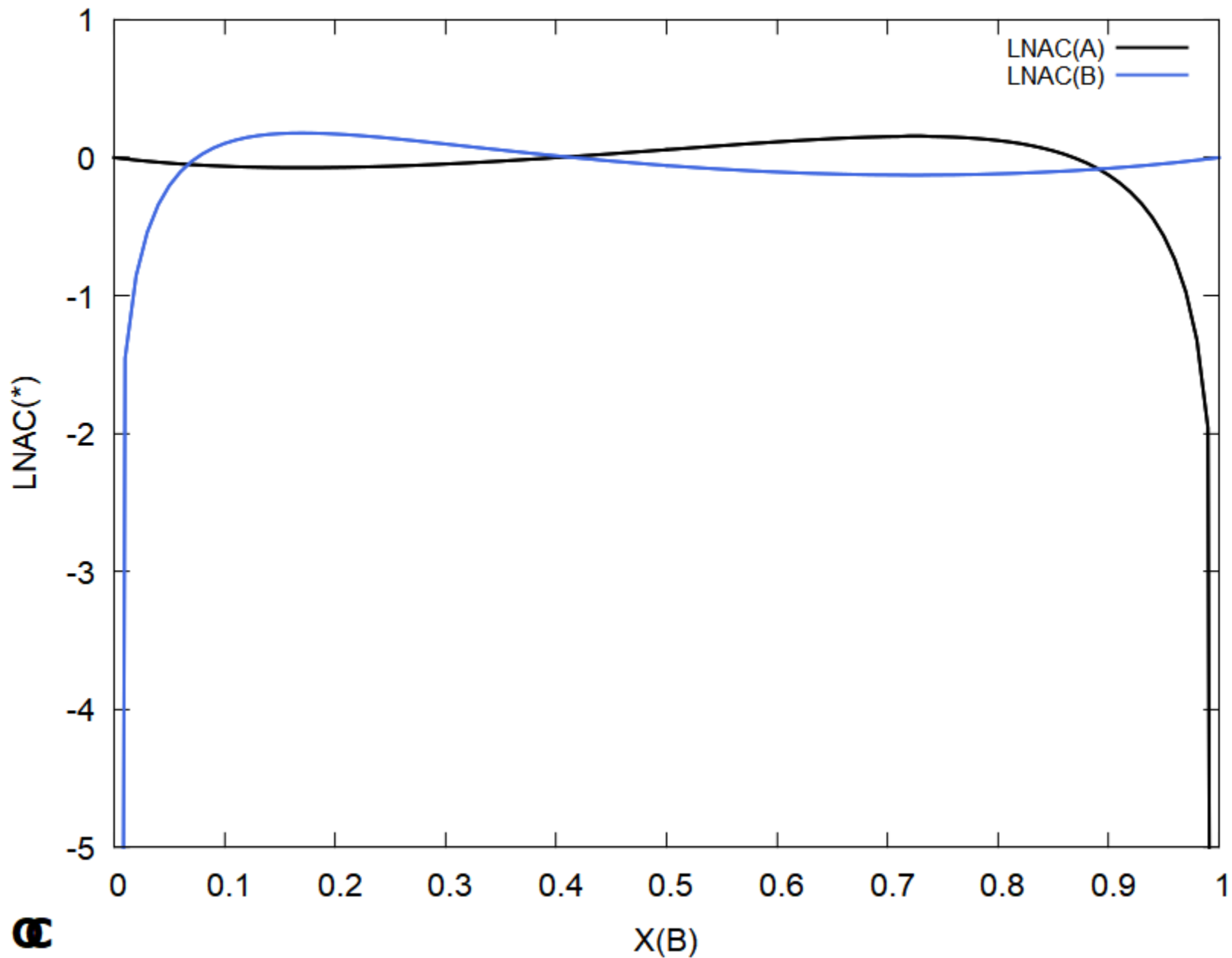


温度 320K における
各成分の
化学ポテンシャル曲線

横軸 mole fraction

左側A : アセトニトリル
C₂H₃N

右側B : ヘプタン
C₇H₁₆

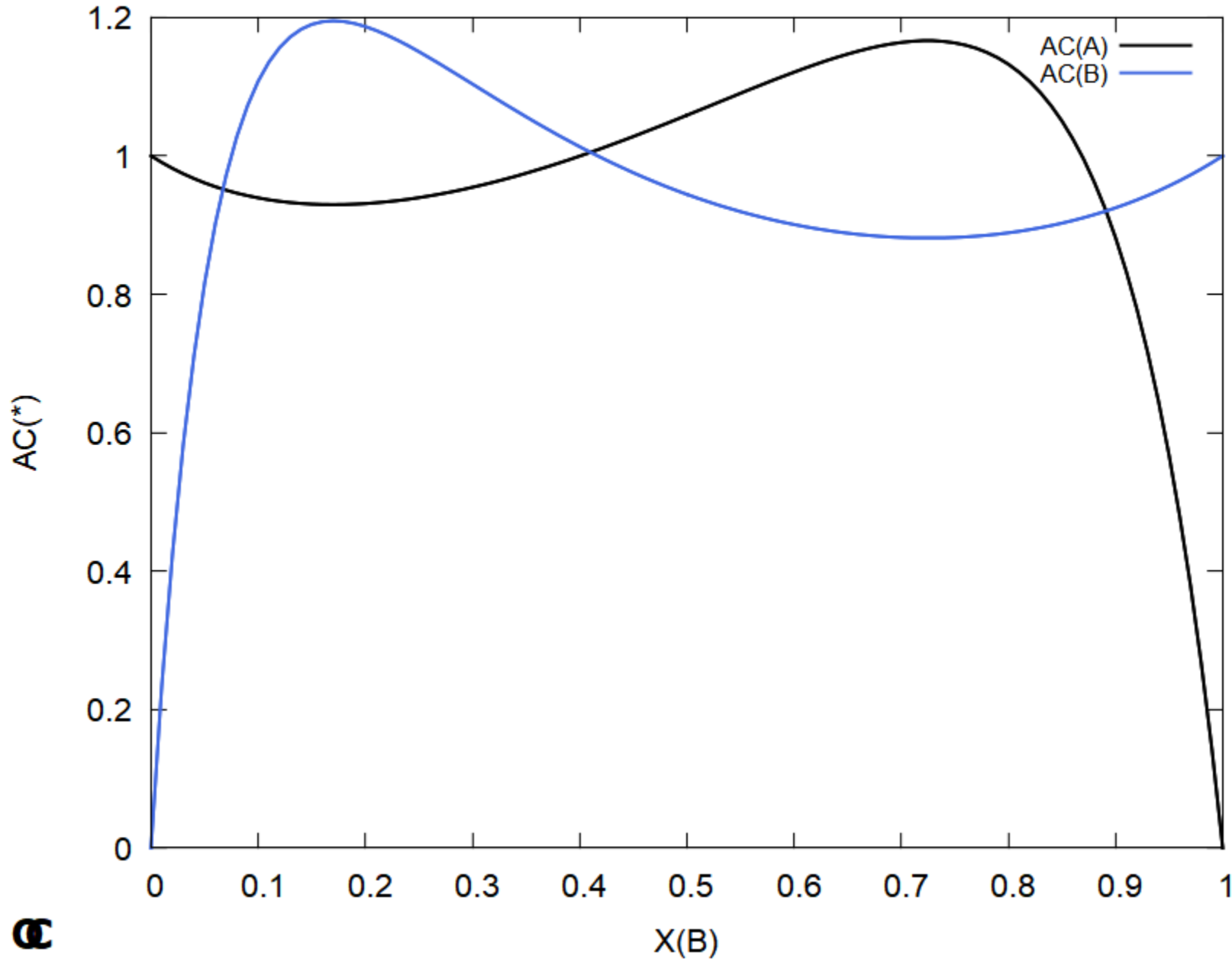


温度 320K における
各成分の活量

縦軸 対数表示
横軸 mole fraction

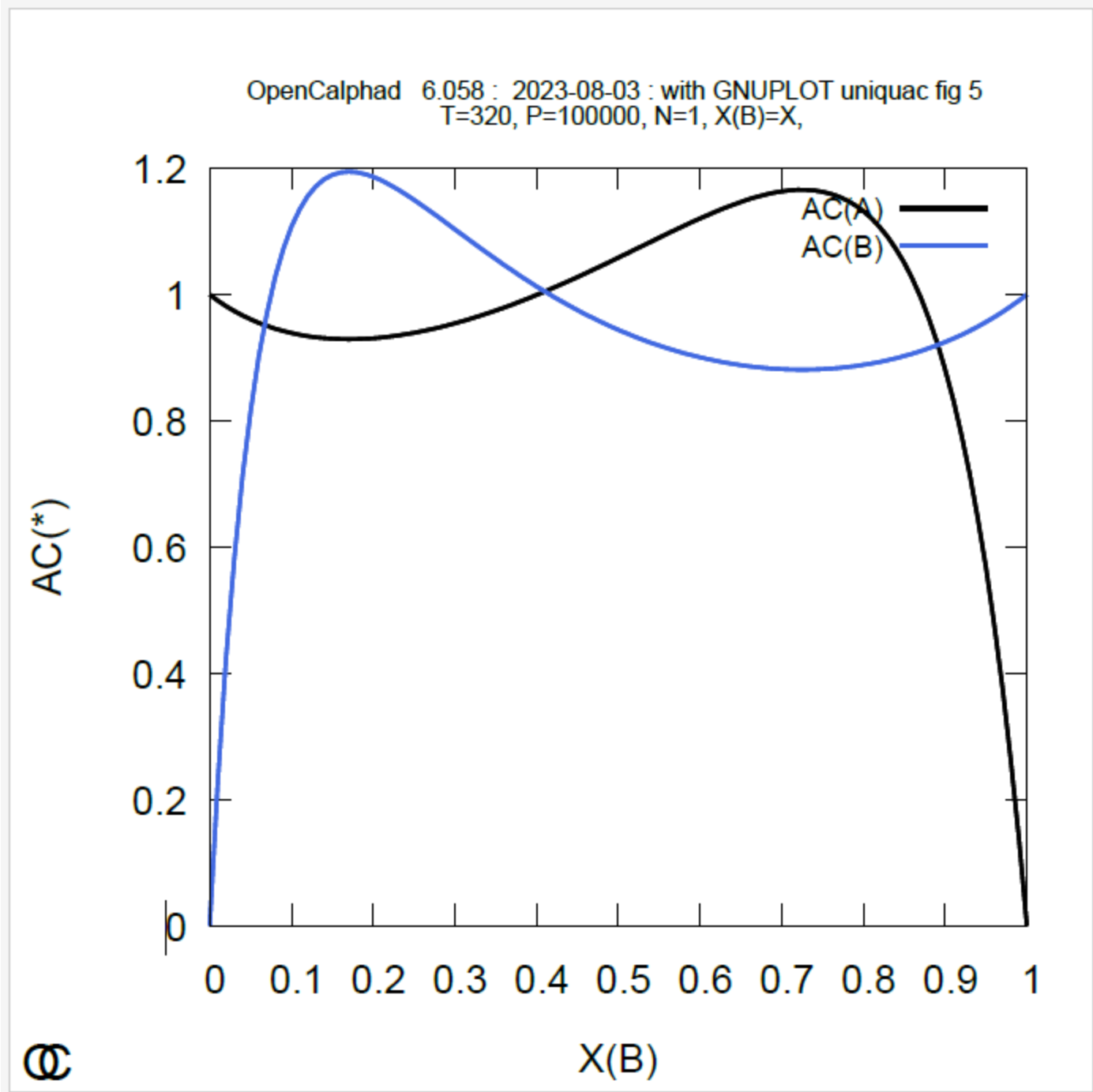
左側A : アセトニトリル
C2H3N

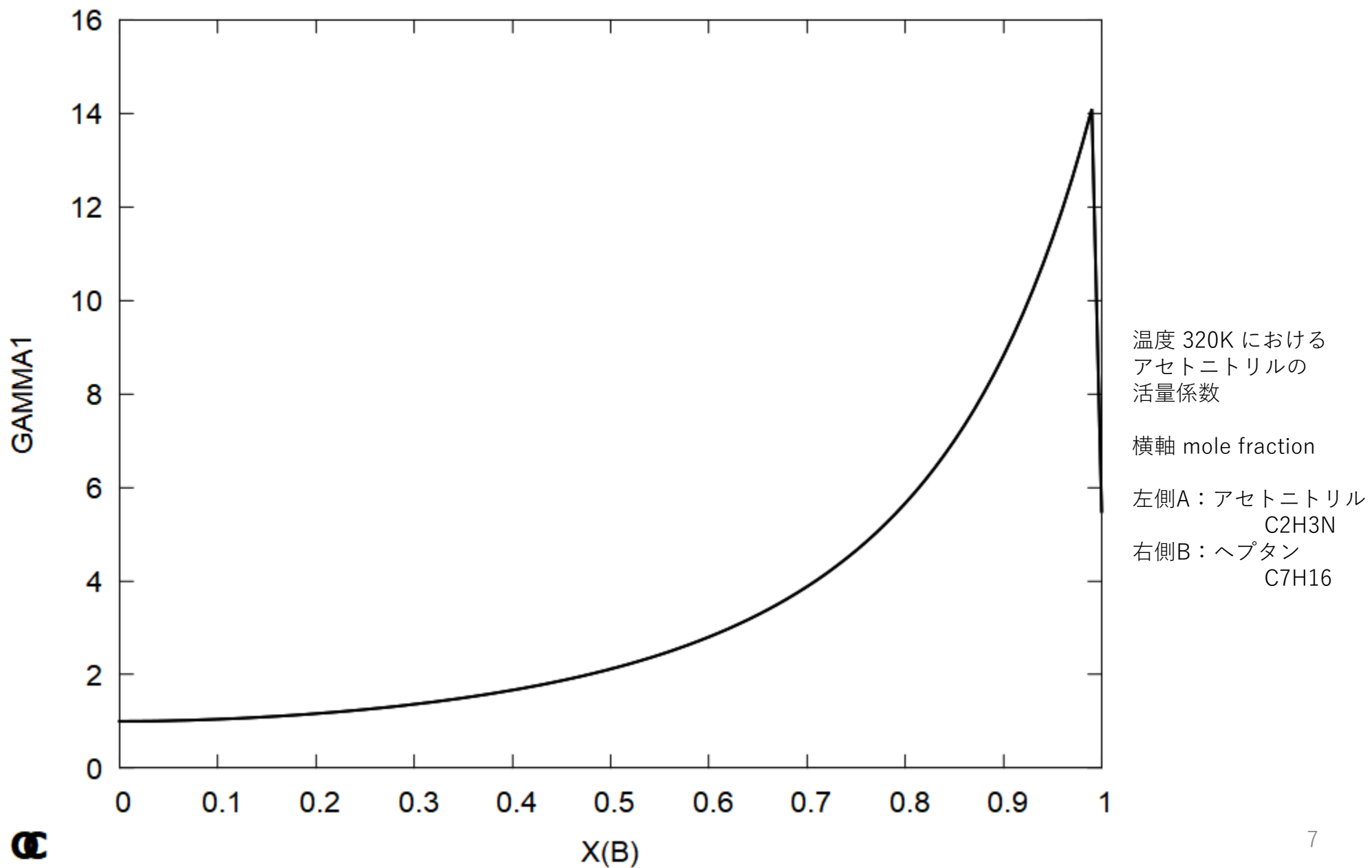
右側B : ヘプタン
C7H16

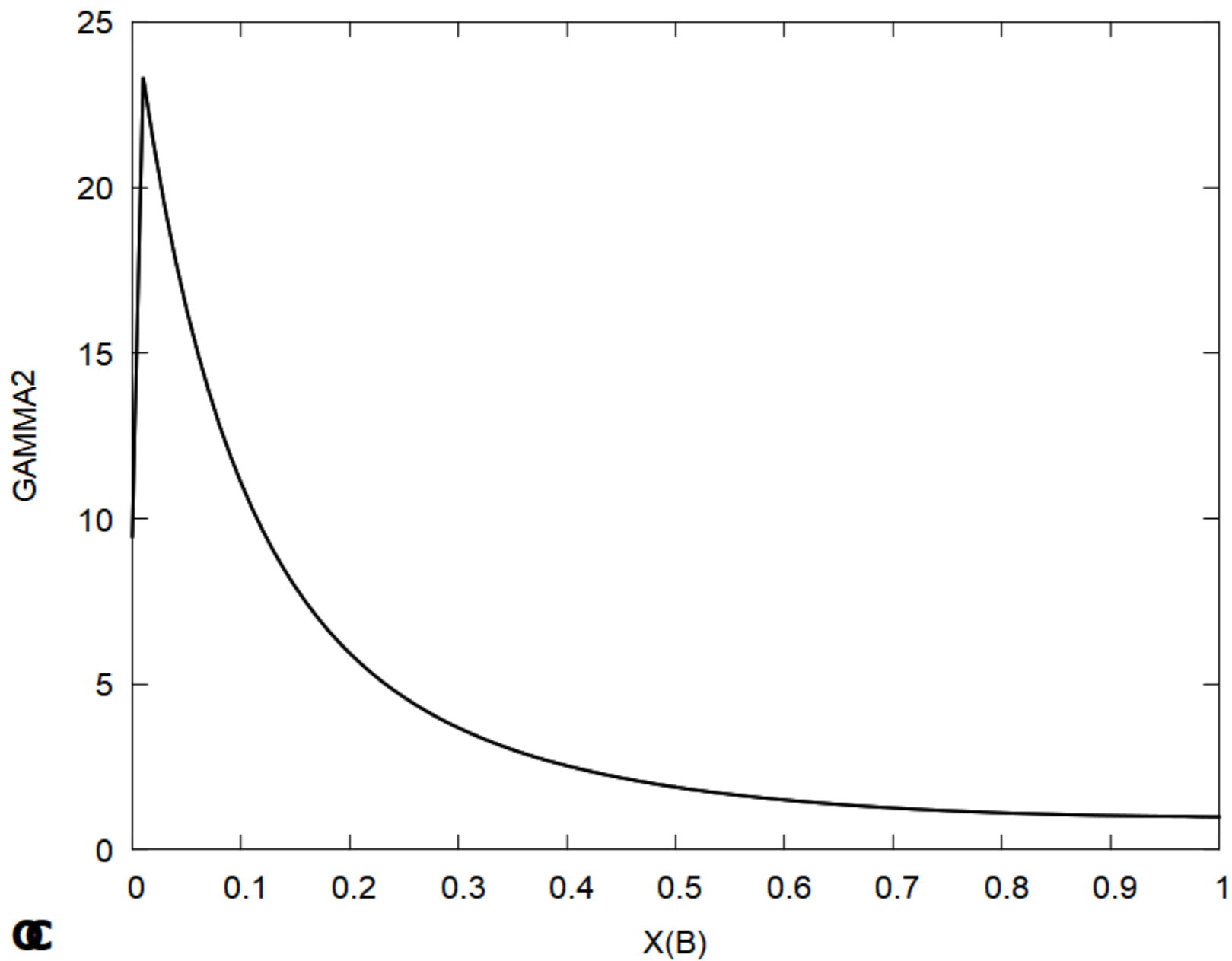


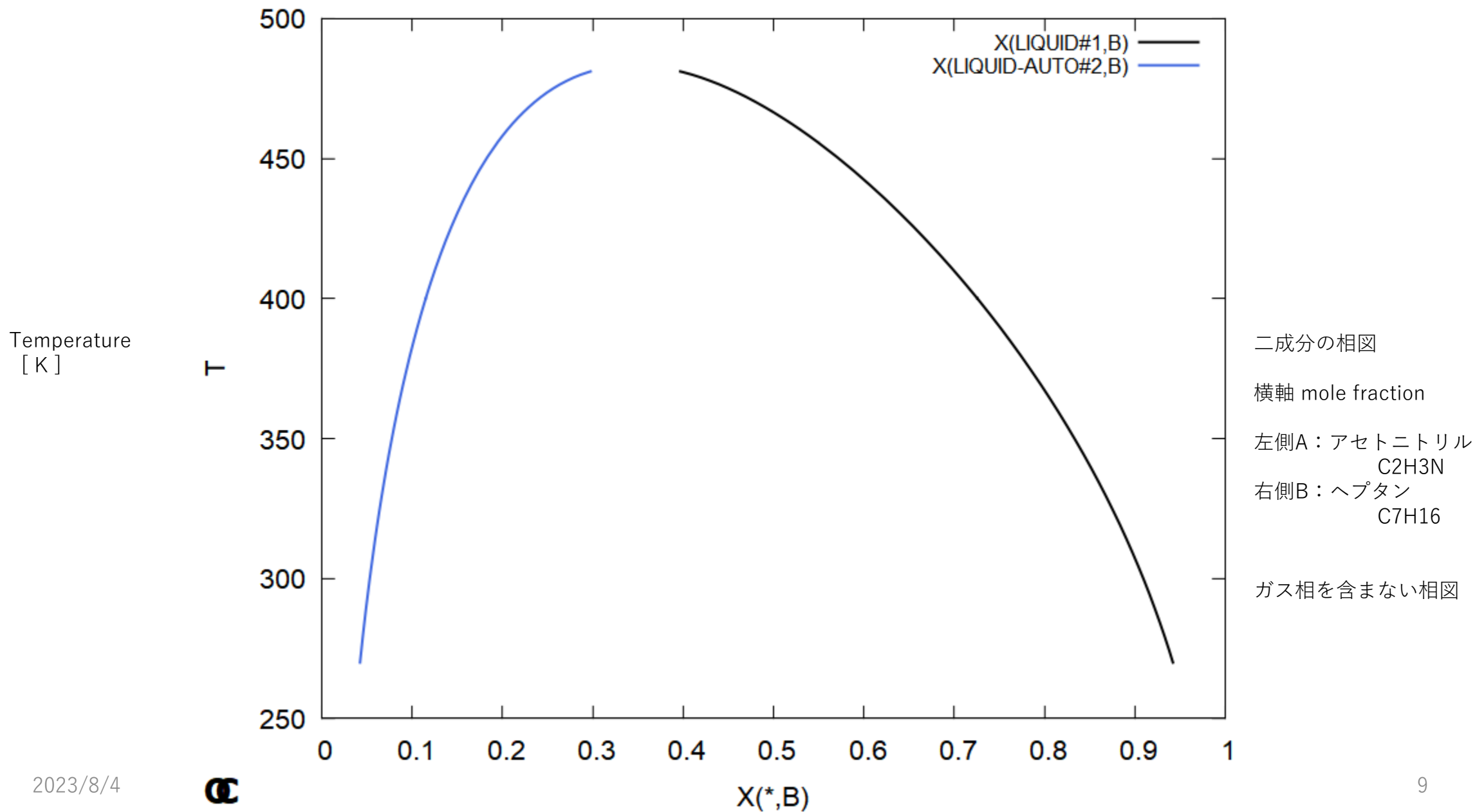
温度 320K における
各成分の活量
横軸 mole fraction
左側A : アセトニトリル
C2H3N
右側B : ヘプタン
C7H16

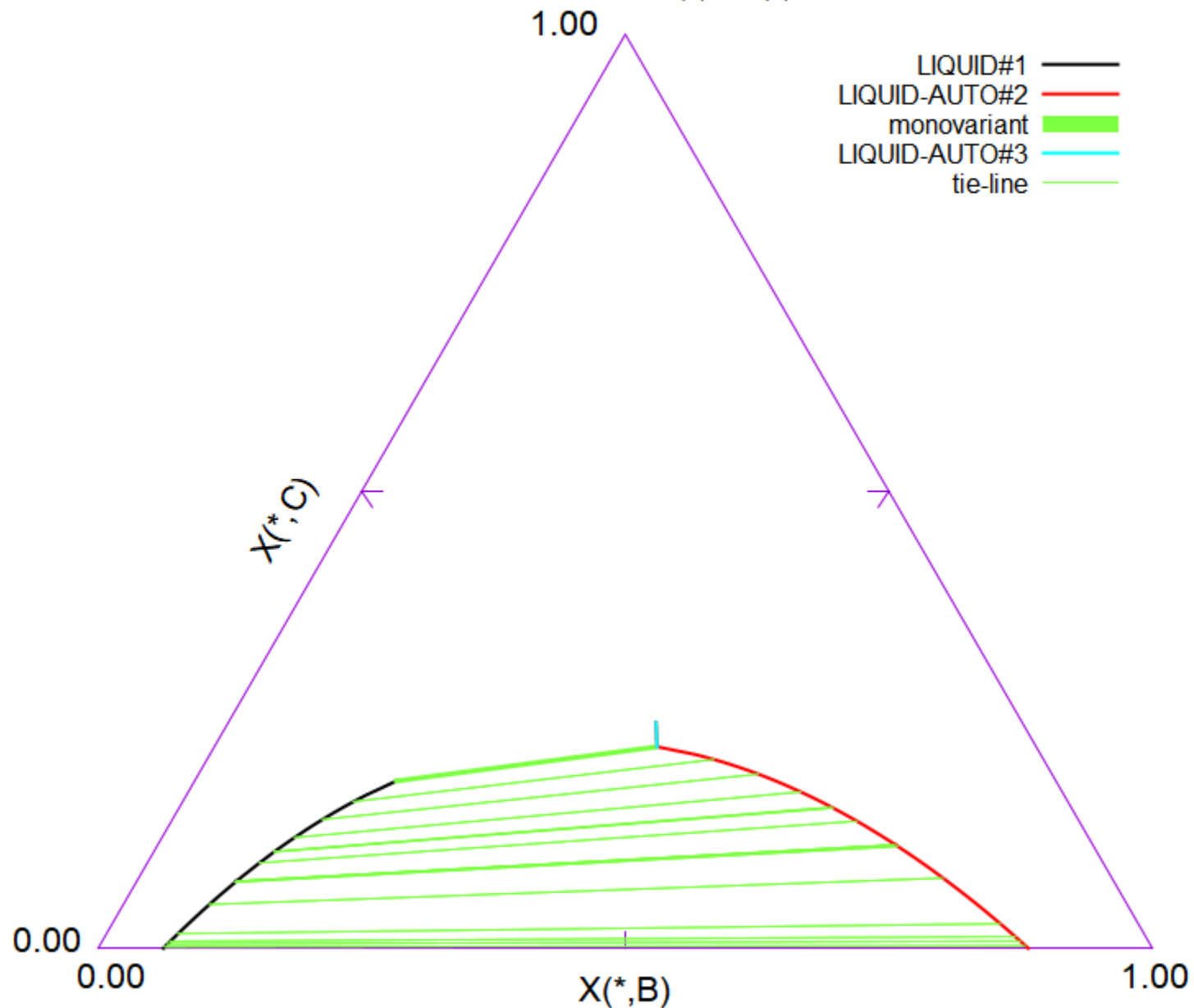
Windowsフォルダ内
Square.pdf











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