

A-B 2元系の規則・不規則変態線

不規則相： Disorder (A,B)
 規則相： Order (A,B)_{0.5} (A,B)_{0.5}

対相互作用パラメータ -1000 J/mol
 第二近接相互作用 ゼロ

規則・不規則の境界を可視化させるために Dis 相を新規登録した

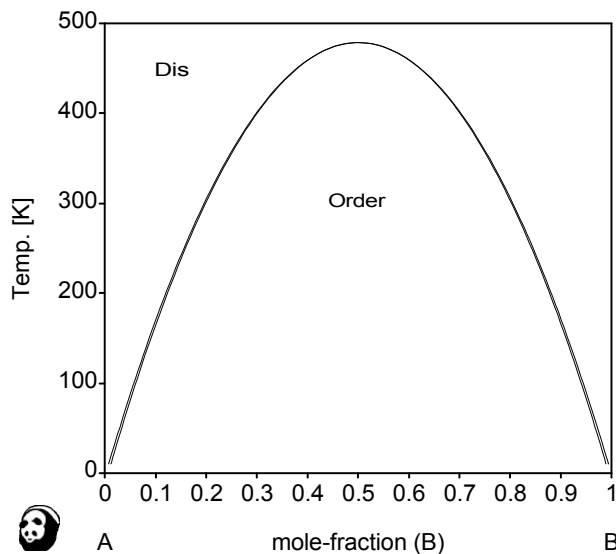


図1 2元系計算状態図

$$\begin{aligned}
 A\text{-}50\text{at}\%B \text{ における臨界温度は } T_c &= - (4/R)X_A X_B G(A:B) = - (16/R)X_A X_B \Omega (A:B) \\
 &= - 4 \Omega/R \\
 &= 481 \text{ K}
 \end{aligned}$$

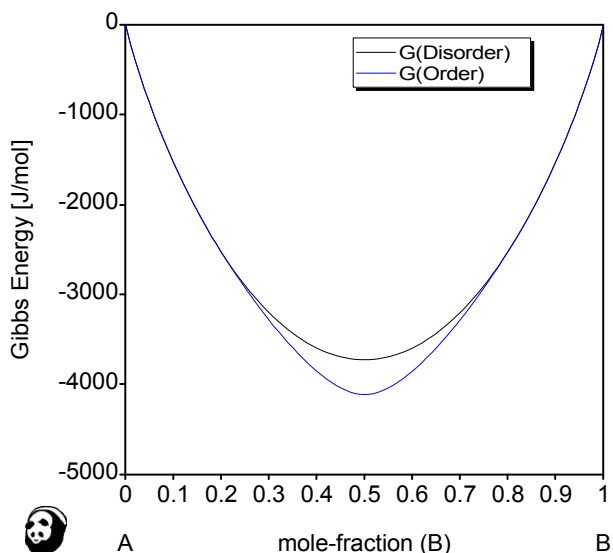


図2 T=300 K における自由エネルギー

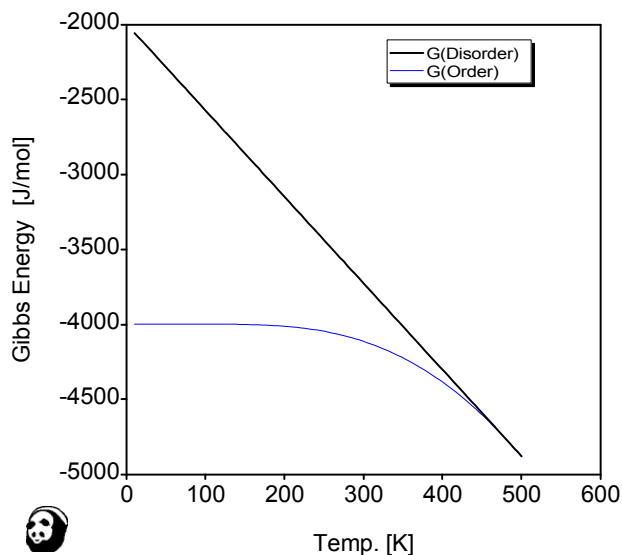


図3 50at%B における自由エネルギー

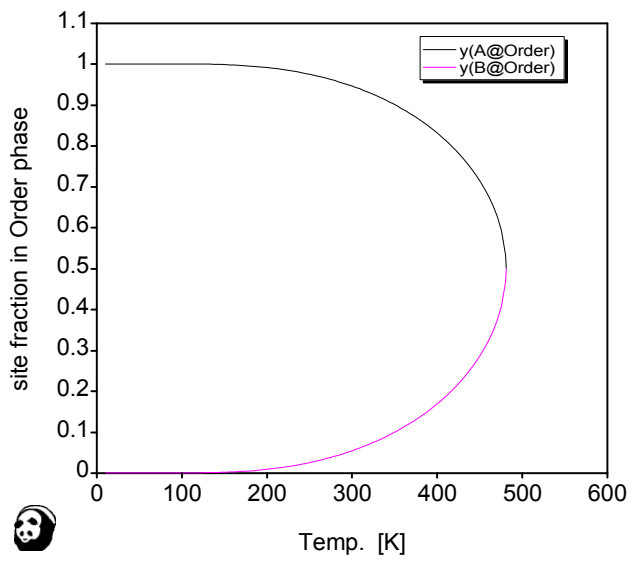


図4 50at%B における副格子濃度の温度依存性

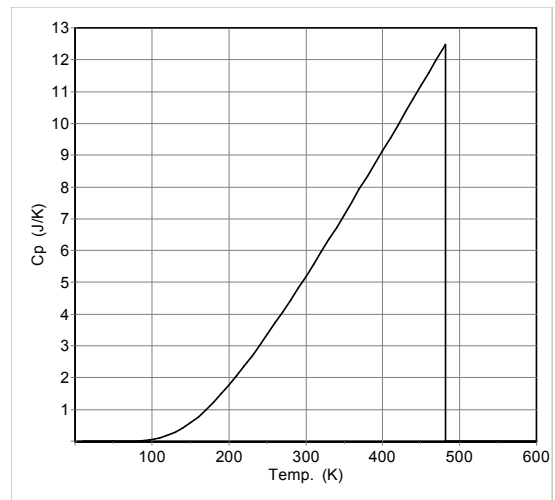


図5 50at%B におけるλ型熱容量

T_c における $C_p = (3/2)R = 12.47$

以上