Q：　スピノーダル線を計算できますか？

A：　計算できます。

2023 年 7 月 8 日

株式会社 材料設計技術研究所

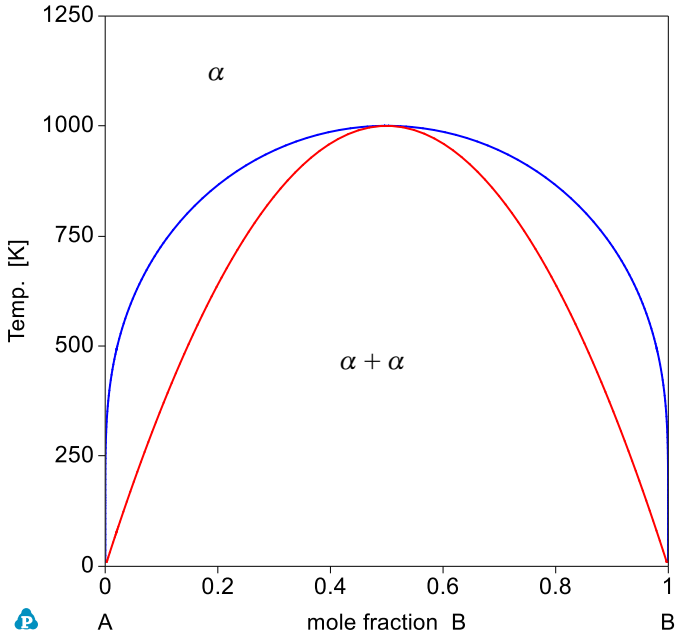


Fig. 4-14 (a)　　A-B 2 元系　2 相分離線（青色）とスピノーダル線（赤色）

相互作用パラメータ　$\Omega^{\alpha}_{AB} = +2000R$

臨界温度 $Tc = \Omega^{\alpha}_{AB} / 2R = 1000$ K

Pandat ソフトウェアは Hessian Matrix of Gibbs energy を装備しているため、
スピノーダル線を計算でき、スピノーダル線をプロットできる。

Pandat 標準インストール先のハードディスクに例題（バッチファイル）が用意されている。

C:ProgramFiles¥CompuThermLLC¥Pandat 2023¥Pandat 2023 Examples
¥PanPhaseDiagram¥User_Defined_Property¥

文献：

Pandat 2023 User's Guide manual.　　95, 99, 253-256 ページ.

ミクロ組織の熱力学、西澤泰二、日本金属学会、(2005).　　100 ページ.

本書では、Fig.4-14 (a), Fig.4-17 (d), Fig.4-17(e), Fig.4-24(c) にスピノーダル線を示す。

本書では、タイライン（共役線）を緑色線で示す。

本書は、シンプルな相分離を紹介するために、仮想元素 A-B、仮想元素 A-B-C を用いた計算事例を集めた。

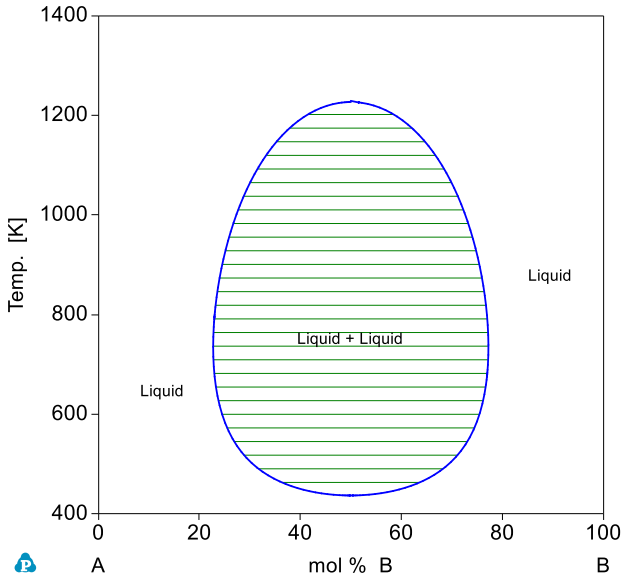
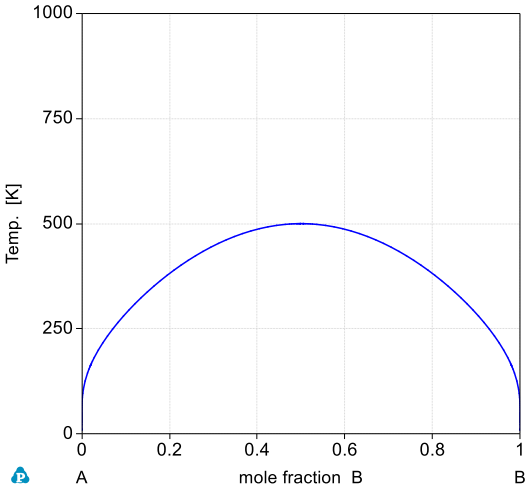


Fig. 4-13 (c)　正常型２相分離線と倒立型２相分離線の両方を含む例
（相互作用パラメータをさらに最適化すれば
水（H2O）とニコチン（C10H14N2）の相図になる）
相互作用パラメータ　$\Omega_{AB} = -600R + 3RT + 1.3T\ln(T) - 0.011T^2$



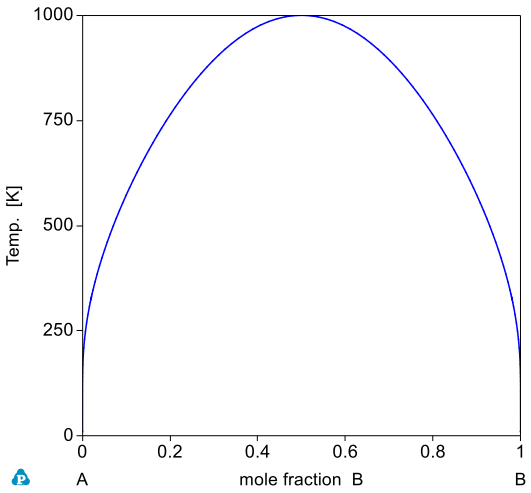


Fig. 4-16 (a)　2 相分離線　Ω=+500R+RT　　Ω=+1000R+RT

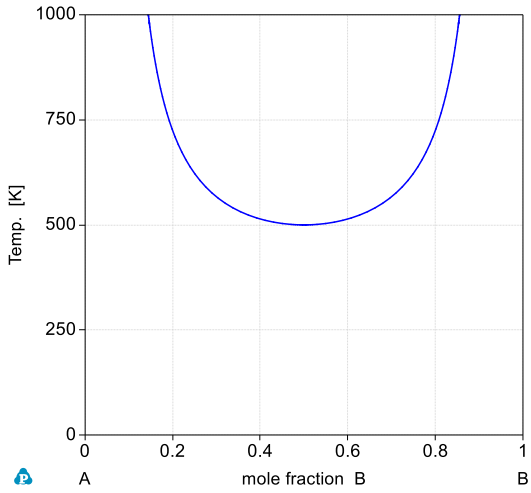


Fig. 4-16 (b)　2 相分離線　Ω=－500R+3RT

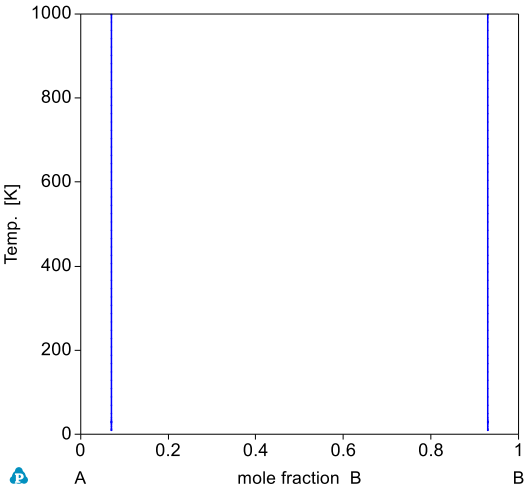


Fig. 4-16 (c)　2 相分離線　Ω=+0　+3RT

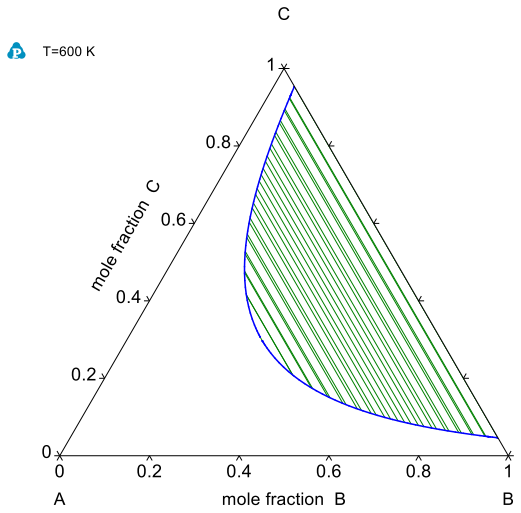


Fig. 4-17 (a)　　A-B-C　3 成分系の溶解度ギャップ等温断面図　T=600K　　Ω_{BC}=+2000R

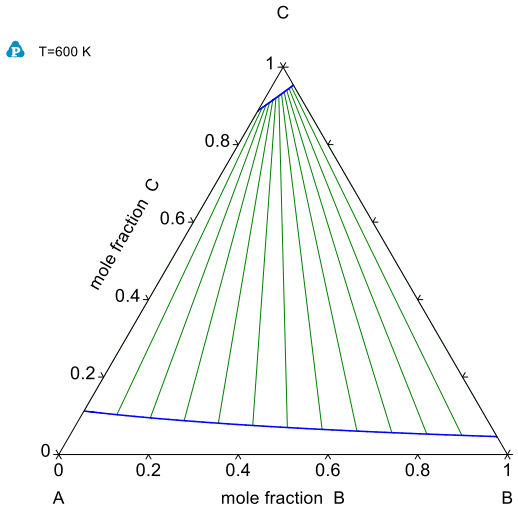


Fig. 4-17 (b)　　A-B-C　3 成分系の溶解度ギャップ等温断面図　T=600K　　Ω_{BC}=+2000R,
Ω_{AC}=+1600R,　Ω_{AB}=0

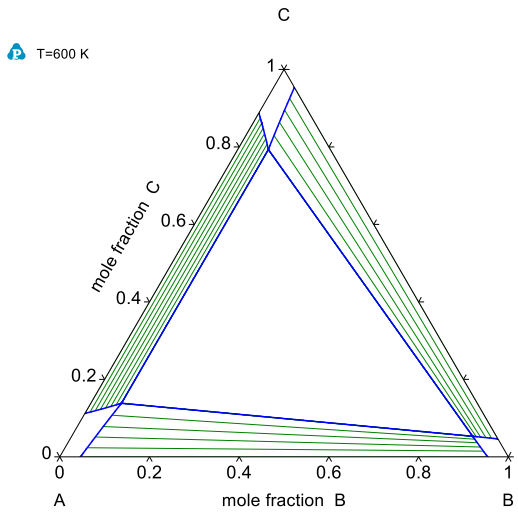


Fig. 4-17 (c)　　A-B-C　3 成分系の溶解度ギャップ等温断面図　T=600K　Ω_{BC}=+2000R,
Ω_{AC}=+1600R,　Ω_{AB}=+2000R

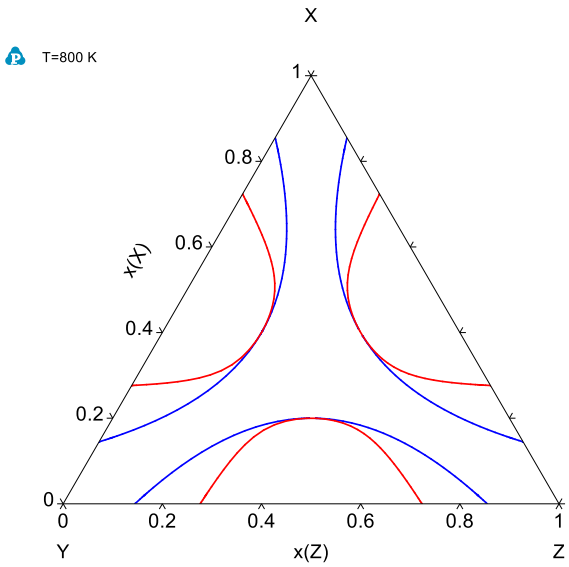


Fig. 4-17 (d)　　X-Y-Z　3 成分系の溶解度ギャップ等温断面図　スピノーダル線（赤色）
T=800K　Ω_{XY}=+2000R，Ω_{XZ}=+2000R，Ω_{YZ}=+2000R

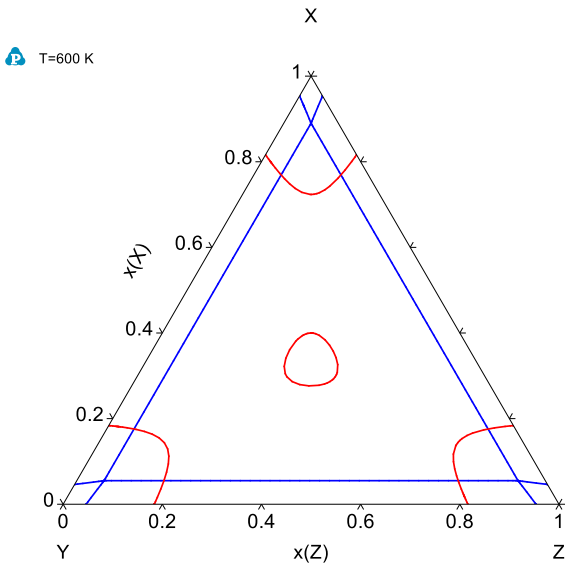
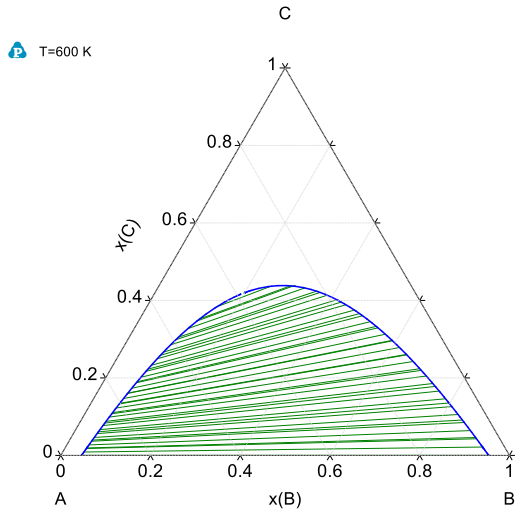
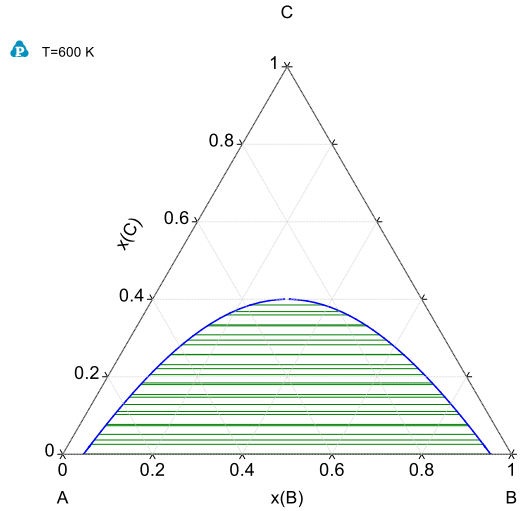


Fig. 4-17 (e)　　X-Y-Z　3 成分系の溶解度ギャップ等温断面図　スピノーダル線（赤色）
T=600K　Ω_{XY}=+2000R，Ω_{XZ}=+2000R，Ω_{YZ}=+2000R



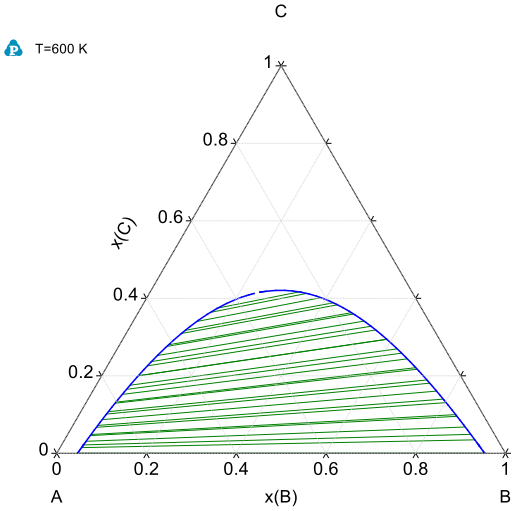
タイラインが
左側（A-C 側）に傾く。
頂点が 40%C を超える。

Fig. 4-17 (f)　　等温断面図　T=600K　　Ω_{AB}=+2000R,　　Ω_{AC}=+5000,　　Ω_{BC}=0



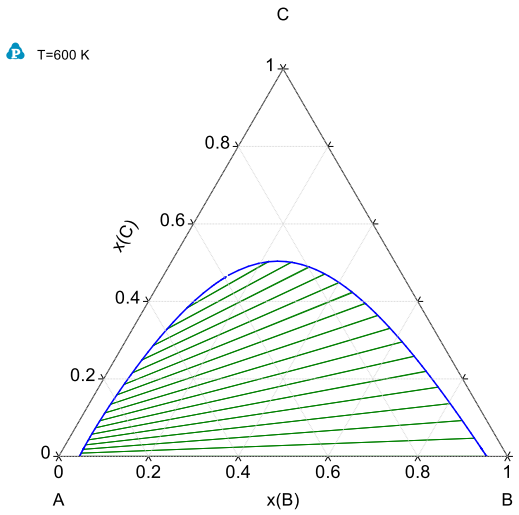
タイラインが水平になる。
頂点が 40%C に戻る。

Fig. 4-17 (g)　　等温断面図　T=600K　　Ω_{AB}=+2000R,　　Ω_{AC}=+5000,　　Ω_{BC}=+5000



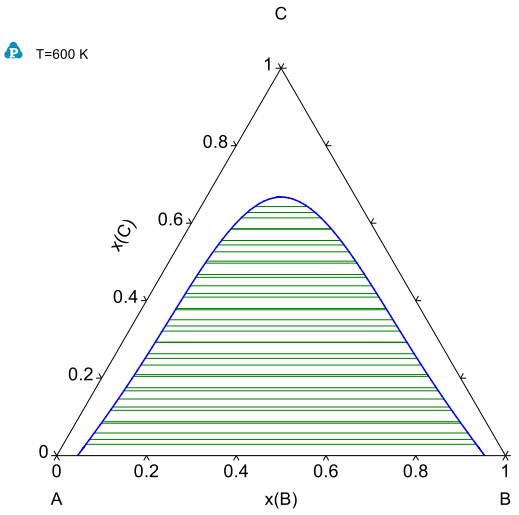
タイラインが
左側（A-C 側）に傾く。
頂点が 40%C を少し超える。

Fig. 4-17 (h)　　等温断面図　T=600K　　Ω_{AB}=+2000R,　　Ω_{AC}=+0,　　Ω_{BC}=－5000



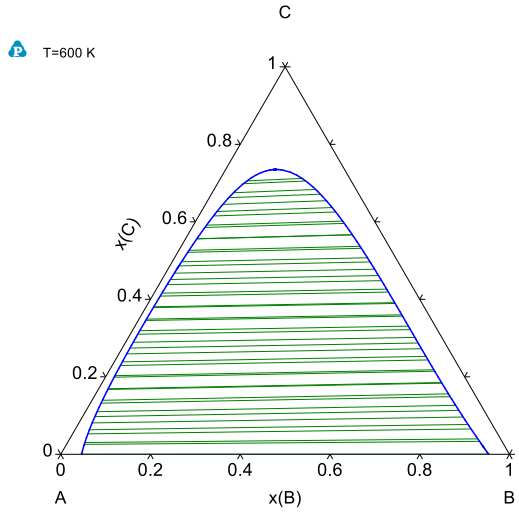
タイラインが
左側（A-C 側）に傾く。

Fig. 4-17 (i)　　等温断面図　T=600K　　Ω_{AB}=+2000R,　　Ω_{AC}=+5000,　　Ω_{BC}=－5000



元素 C 側の 3 元系相互作用
パラメータ=+30,000.

Fig. 4-17 (j)　　等温断面図　T=600K　　Ω_{AB}=+2000R,　　Ω_{AC}=0,　　Ω_{BC}=0
$\Omega_{ABC}(0)$=0,　　$\Omega_{ABC}(1)$=0,　　$\Omega_{ABC}(2)$=+30000



元素 A 側の 3 元系相互作用
パラメータ=+40,000. を足すと
左側（A-C 側）に拡がる。

Fig. 4-17 (k)　　等温断面図　T=600K　　Ω_{AB}=+2000R,　　Ω_{AC}=0,　　Ω_{BC}=0
$\Omega_{ABC}(0)$=+40000,　　$\Omega_{ABC}(1)$=0,　　$\Omega_{ABC}(2)$=+30000

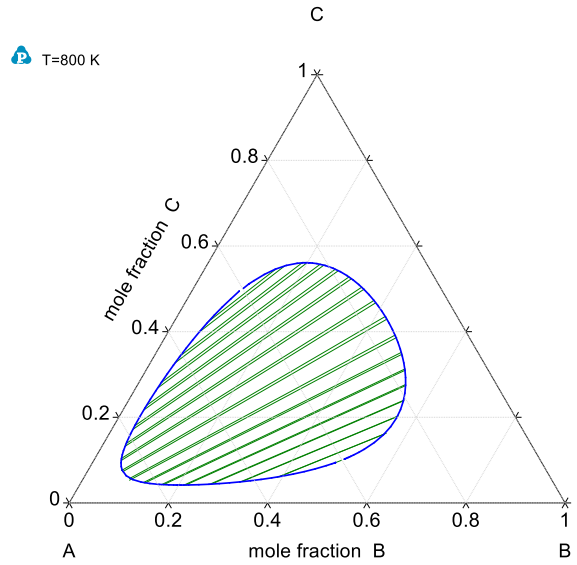


Fig. 4-18 (b)　　A-B-C　3 成分系の島状溶解度ギャップ等温断面図　T=800K

$\Omega_{AB}=0$,　　$\Omega_{AC}=0$,　　$\Omega_{BC}=-8000R$

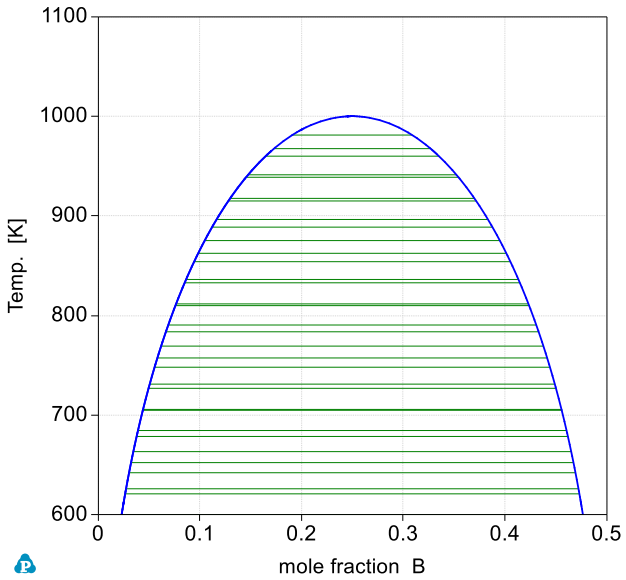


Fig. 4-18 (d)　　100A-50B50C 縦断面図

濃度 C = 濃度 B

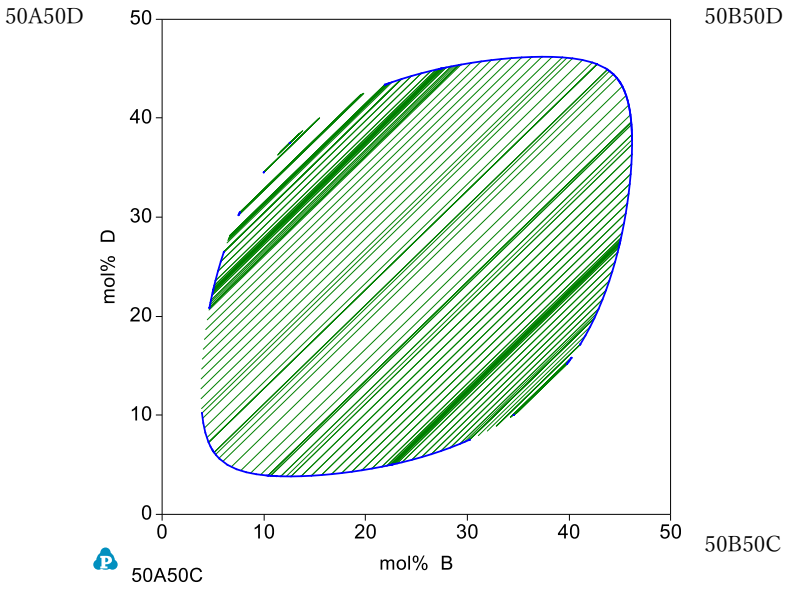


Fig. 4-20 (b)　　(extensive, linescan=4)

化合物の複合系における島状溶解度ギャップの解析

A-B-C-D　4 元系における T=750K 等温断面図

計算時には左下=50A50C、　左上=50A50D、右下=50B50C　3 点の濃度を指定する。

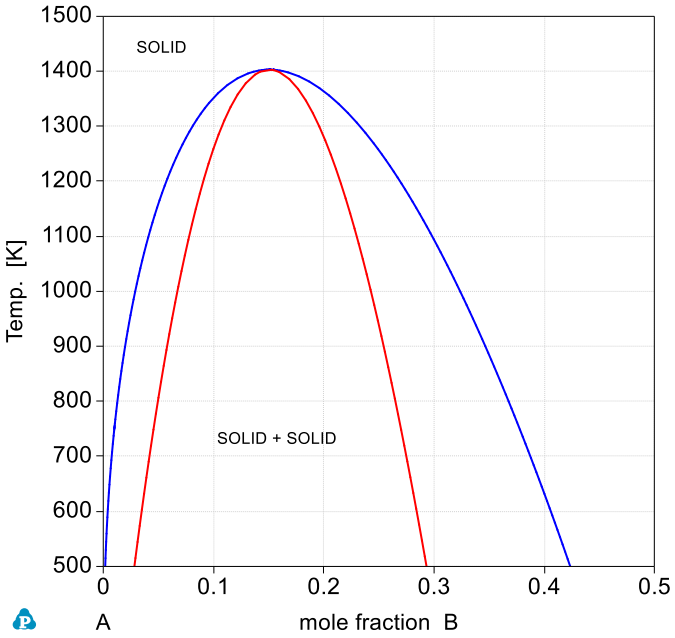


Fig.4-24 (c)　　A-B　2 元系　　$\Omega^{\alpha}_{AB} < 0$ のときの 2 相分離線

$\Omega^{\alpha}_{AB}(0) = -5000R$,　　$\Omega^{\alpha}_{AB}(1) = +5000R$

2 相分離線（青色）とスピノーダル線（赤色）