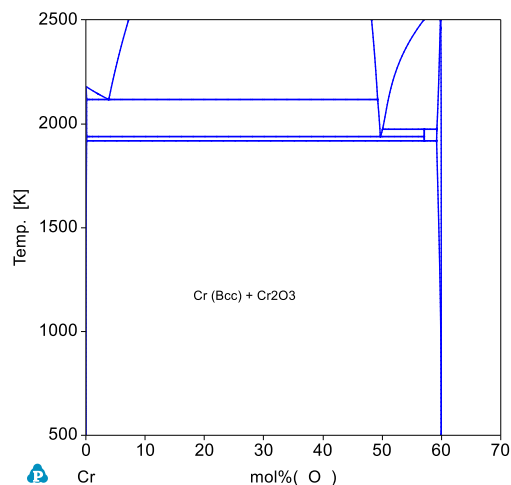


Pandat 2021 を起動する。

Cr-O 二元系平衡状態図を計算する。熱力学データベースファイルは公開文献 2006 のパラメータを利用した。液相は ionic モデル。



1. ポテンシャル図を計算する

Options にて、Pressure の単位を Bar にします。

圧力 $P(\text{bar}) = 1$ にして、Cr-O 二元系平衡状態図を計算します。

画面左側の Table, Default を選択し、数値表を表示します。

変数「 $\log_{10}(P)$ 」の単位は SI 固定です。Pascal となります。

	T	P	$\log_{10}(P)$	x(CR)	x(O)	phase_name
	K	bar	SI	%	%	
1	2,178.6444	1.000000	5.000000	99.999987	1.321124E-005	IONIC_LIQUID+BCC_A2
2	2,178.4330	1.000000	5.000000	99.988481	0.011519	IONIC_LIQUID+BCC_A2
3	2,178.2216	1.000000	5.000000	99.976973	0.023027	IONIC_LIQUID+BCC_A2
4	2,177.7991	1.000000	5.000000	99.953946	0.046054	IONIC_LIQUID+BCC_A2
5	2,176.9551	1.000000	5.000000	99.907846	0.092154	IONIC_LIQUID+BCC_A2

メニュー Table から「Add or Edit a Table」を選択します。

変数「 $-10000/T$ 」を手入力し、さらに、変数「 $P(*)$ 」を手入力し、OK ボタン

ガス分圧の単位は Pascal

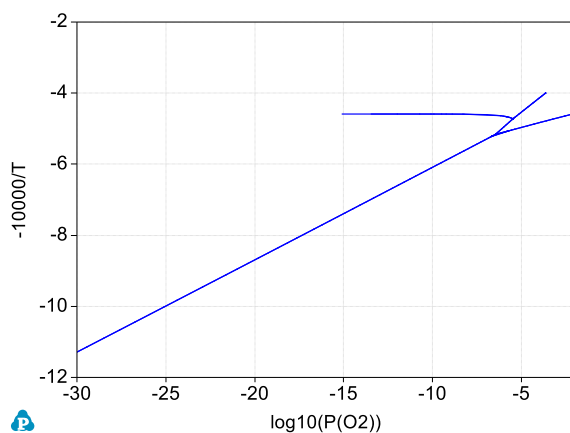
再度 「Add or Edit a Table」 を選択します。

P(O₂)の行を **log₁₀(P(O₂))** に変更して、OK ボタン

-10000/T
P(CR)
P(CR2)
P(CRO)
P(CRO2)
P(CRO3)
P(O)
▶ log ₁₀ (P(O ₂))
P(O3)
*

エクセルと同じ要領で、-10000/T 列を選択し、log₁₀(P(O₂))列を選択し、メニュー Table から 「Create Graph」 を選択します。

-10000/T	P(CR)	P(CR2)	P(CRO)	P(O)	log ₁₀ (P(O ₂))		
-4.590010	751.3976	0.054230	6.120848E-005	6.61	1.8E-008	-15.079010	
-4.590456	749.9205	0.054069	0.019202	6.52	609E-006	-10.085239	
-4.590901	748.4462	0.053909	0.038296	2.60	98E-005	-9.484912	
-4.591792	745.5070	0.053589	0.076238	1.03	63E-005	-8.885472	
-4.593572	739.6664	0.052956	0.151141	4.11	82E-005	-8.288230	
-4.607761	694.7084	0.048169	0.705157	0.000966	1.913552E-009	0.000241	-6.927930
-4.635820	613.6178	0.039930	1.596433	0.005753	2.908705E-008	0.000527	-6.173602
-4.649667	577.1283	0.036396	1.948023	0.009226	6.038927E-008	0.000632	-5.978649
-4.656539	559.8244	0.034759	2.103166	0.011158	8.120159E-008	0.000676	-5.901125
-4.659962	551.3991	0.033972	2.175904	0.012164	9.293811E-008	0.000697	-5.866128



Cr-O 二元系 ポテンシャル図 横軸の単位は SI (Pascal)

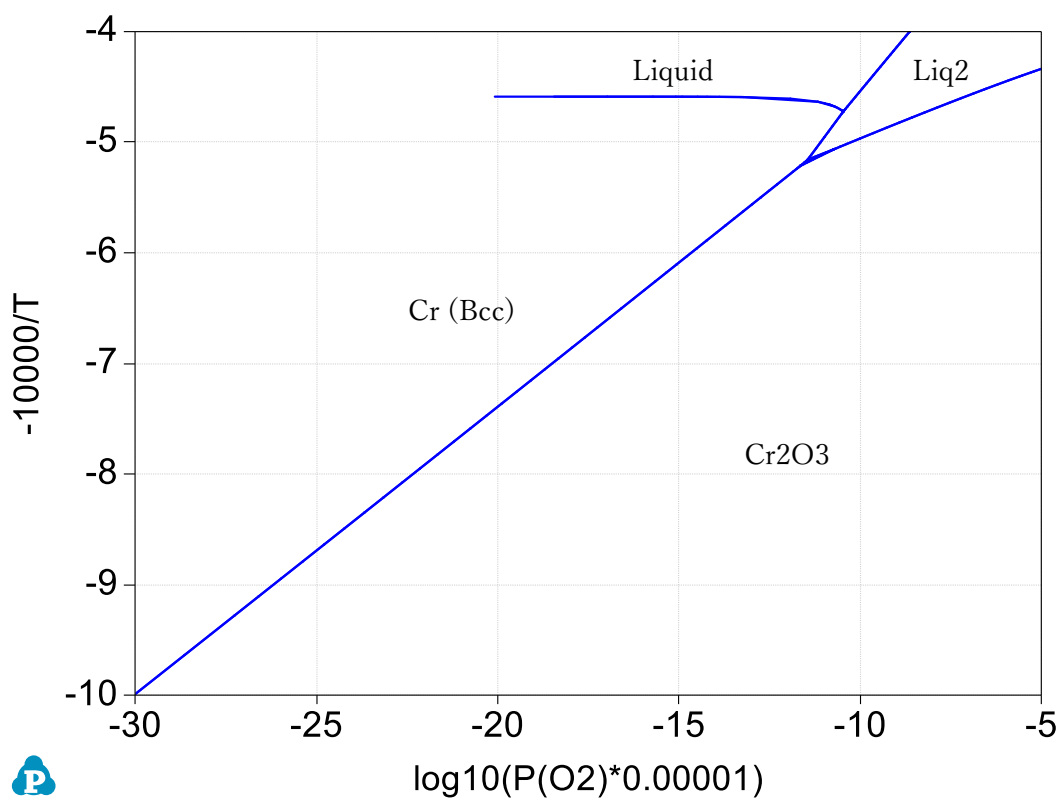
再度 「Add or Edit a Table」 を選択します。

Log10(P(O2))の行を **log10(P(O2)*0.00001)** に変更して、OK ボタン

エクセルと同じ要領で、-10000/T 列を選択し、log10(P(O2)*0.00001)列を選択し、

メニュー Table から 「Create Graph」 を選択します。

これで横軸の単位を 圧力単位 bar にできました。



Cr-O 二元系 ポテンシャル図

横軸の単位は bar

縦軸の単位は (1/K)

2. 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「 $4/3 \text{ Cr} + \text{O}_2 = 2/3 \text{ Cr}_2\text{O}_3$ 」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^{-39} と読み取れる。

温度 1000K にける酸素分圧を定規をあてて確認すると、約 10^{-30} 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「 $4/3 \text{ Cr} + \text{O}_2 = 2/3 \text{ Cr}_2\text{O}_3$ 」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^{-39} と読み取れる。

温度 1000K にける酸素分圧を定規をあてて確認すると、約 10^{-30} と読み取れる。