2024年6月6日 株式会社材料設計技術研究所

平衡状態図は相境界線を図示する。 たとえば、Al-Cr-Ti 三元系 1573K 等温断面図を図 1 と 図 2 に示す。 α Ti_Hcp 相の単相領域はこの図から判読できる。しかし、 α Ti_Hcp 相の相比率 が 80%以上の領域はどの辺りになるか? をこの図から判読できない。

そこで本書は、「αTi_Hcp相の相比率が80%になる領域を知りたい」という要望に応えるため に、HTC(High Throughput Calculation)「連続計算・抽出」機能を紹介する。 これは状態図デジタルデータの応用例である。



概要: Ti-Al-Cr 三元系合金、温度 1573K の平衡計算を 441 回行う。

Al 濃度は 40 mol%から 50%まで 0.5%刻み

Cr 濃度は 0 mol%から 10%まで 0.5%刻み

441 個のデータから、 α Ti_Hcp 相の相比率値を抽出し、 α Ti_Hcp 相の相比率の分布を図示する。

図の横軸を Al 濃度、縦軸を Cr 濃度にする。

熱力学データベースは公開文献 2015Wit を用いた。

操作:

TDB ファイルを、日本語を含まないパス(フォルダ)内に置きます。

例えば C:¥temp2024¥

Pandat を起動します。 TDB ファイルを Load しておきます。

メニュー Batch から、HTC を選びます。

ОК
Cancel

図3 計算タイプ選択

Point Calculation X									
	Point								
			Start	End	# Steps	Run HTC			
		T(C)	1300	1300	0	Cancel			
	▶	P(bar)	1	1	0	Options			
		x%(AL)	40	50	20	Extra Outputs			
		x%(CR)	0	10	20				
		x%(TI)	-1	-1	-1				
						Select Phases			
						Select Comps			
						Mobile Comps.			
						Import Alloys			
						Stability 🗌			

図4 ポイント計算指示

「Run HTC」ボタンを押します。

441回の計算が自動的に連続して行なわれます。

メニュー File から、Save Current Workspace を選び、計算結果を保存します。

メニュー Batch から、Result Analysis を選びます。

抽出条件を入力して、右上の「Analyze」ボタンを押します。

ult Analysis -> Set F	lules							
Target Workspace:	C:¥temp2019¥TiAlCr1573¥default			Analyz				
				Cance				
Common Tables fo	mmon Tables for All Calculations: (only one table can be chosen for analysis at one time)							
.:#temp2U13#11AlCr15/3#default#Point Calculation#1able#Default.table								
Common Columns	for the Target Table: (drag and drop to change the oder)		Sel/Cir All					
P VI log10(P) VI x(AL) VI x(AL) VI x(AL) VI x(CR) VI x(TI) VI x(CR) VI x(CR)	3 w(AL) w(CR) J w(T)							
I. Set an Expressio	n to Select Rows: (choose a template text and insert)	Tout	Insert Selected Column Name					
f(@HCP_A3)>0	TEXL						
2. Get Min/Max Val T=MIN(T)	ue from Selected Row (choose a template text and insert)	Text						
Examples:	with values in a certain range: $f_{\rm c} < 1.0$ AND $f_{\rm c} > 0.0$		mpty Row Between Results					

図 5 抽出条件入力画面



抽出後のテーブルから、x(AL)列、x(CR)列、f(@HCP_A3)列の3つを選択(した状態で) メニュー Table から、「Create a Color Map Graph 」を選びます。図6が表示されます。 図6はαTi_Hcp相の相比率分布図になります。 相比率が80%になる領域がわかります。



図 6 Ti-Al-Cr 三元系 1573K における α Ti_Hcp 相の相比率分布

付録:

Pandat ソウトウェアには Contour 機能 が標準装備されている。 等高線計算

状態図を計算する前に「Contour Lines」ボタンを押す。

左窓の Pre-Defined Contour Types から、f(@*) を選択し、刻みを確認し、OK ボタンを押す。 相を指定する場合は、f(@HCP_A3) と入力する。

Set Contour Lines			×
Pre-Defined Contour Types:	Properties:		
User Custom Type Tc T0 G S f(@*) HSN(@*)	Contour Type Start Stop Step Constraints	f(@HCP_A3) 0.2 0.8 0.2 Contour Constraints	OK Cancel
Add Remove Contour Curves: Name Contour_((@HCP_A3)			
	Contour Type		
	Contour Type.		



図 A-1 Ti-Al-Cr 三元系 1573K 等温断面図

全ての相比率の等高線を 0.2 刻みで 表示する 図 A-2 Ti-Al-Cr 三元系 1573K 等温断面図 直交座標系表示
 α Ti_Hcp 相のみの相比率の等高線を
 0.2 刻みで赤線にて表示する