

RCCM Gibbs energy Database for FactSage の使い方

(株)計算力学研究センター
FactSage サポートチーム



はじめに

RCCM Gibbs energy Database for FactSage (GeDb) は FactSage 専用の熱力学データベースです。すべて無料で配布しています。

GeDb は無料の FactSage Education でも使用可能です。FactSage Education では FTlite, FToxicd など人気のある熱力学データベースを利用できますが、それらの熱力学データベースに収録されていない系、例えば Nb-Re, Bi-Se, Ce-Pt, ... などの状態図計算や熱力学平衡計算に利用することができます。

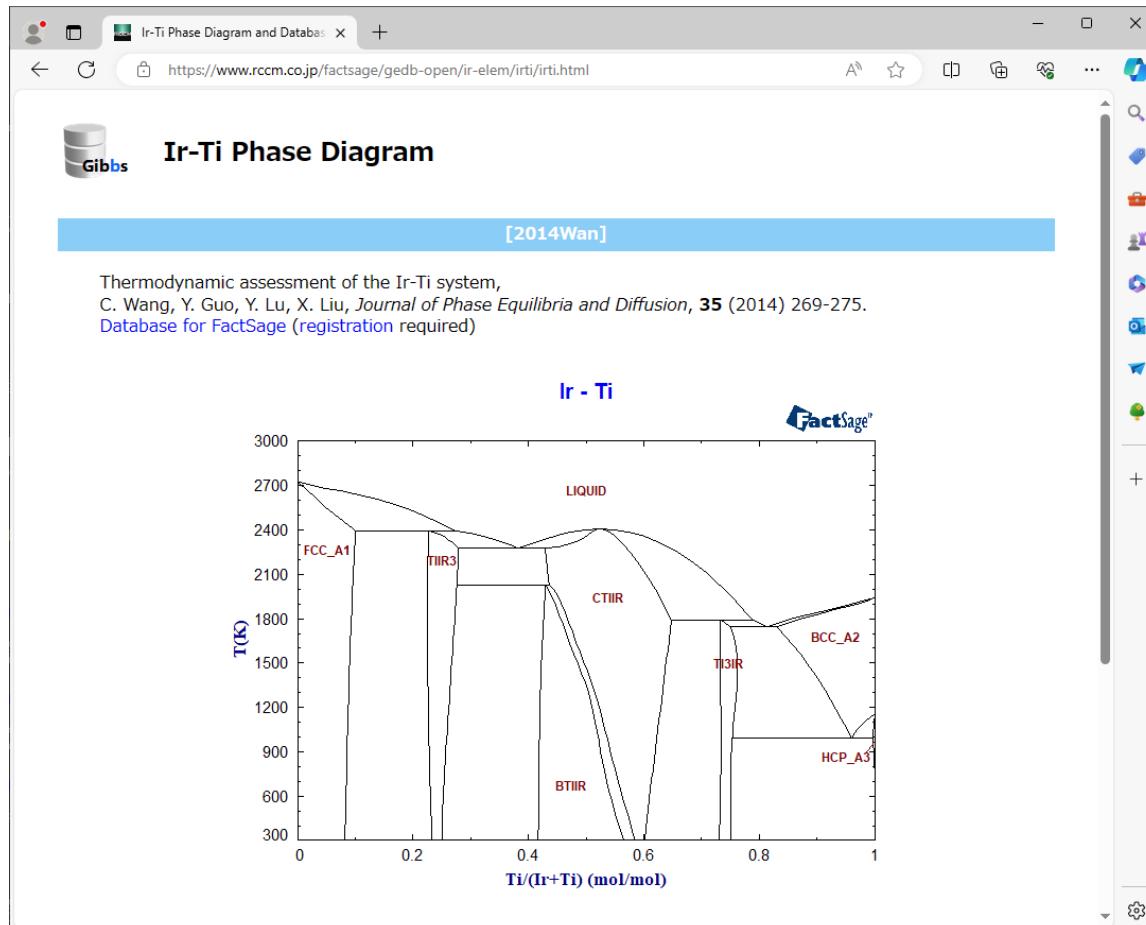
そして熱力学データベースのパラメーターは FactSage Education の Compound アプリと Solution アプリを使って編集することができます。パラメーターを少し変更して状態図計算すると、状態図はどのように変化するでしょうか。試してみてください。熱力学データベースをより深く理解できるようになるはずです。

RCCM FactSage サポートチーム

1. 热力学データベースのインストール

熱力学データベースのインストール

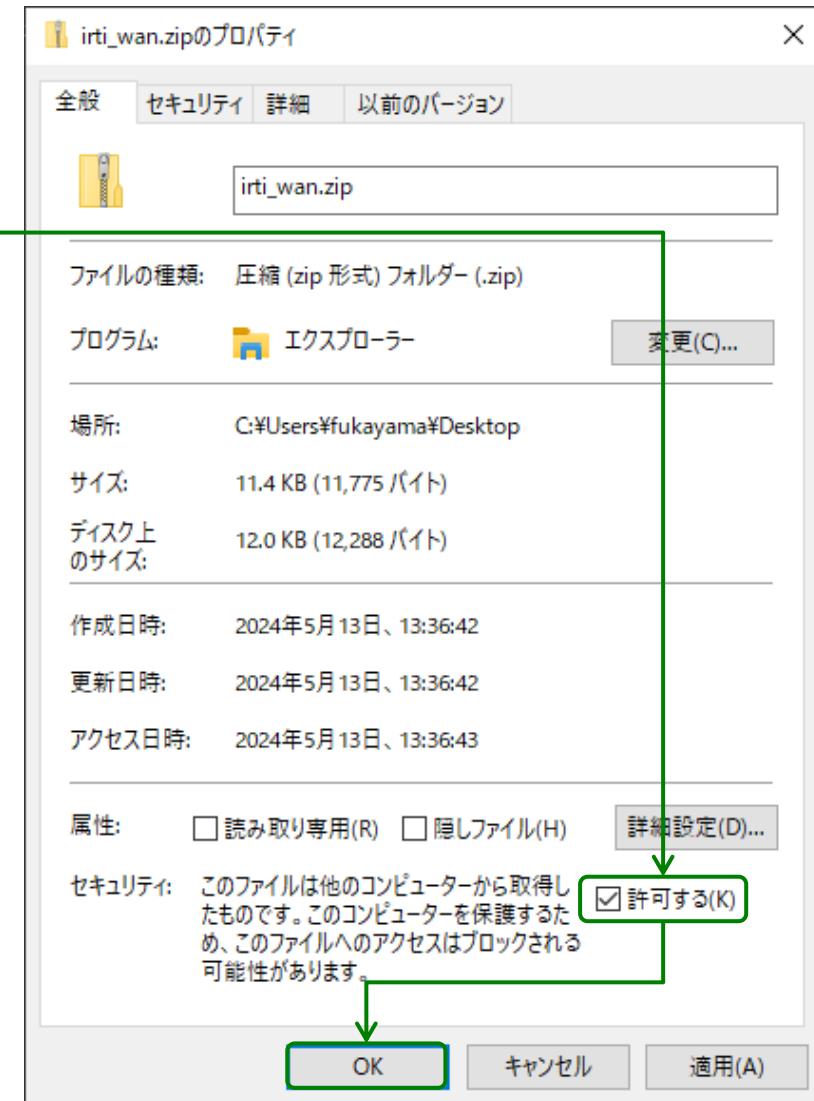
GeDb から Ir-Ti 系の熱力学データベースをデスクトップにダウンロードした。この熱力学データベースを FactSage Education に登録する手順を示す。FactSage に登録する手順も同じである



デスクトップに保存した Ir-Ti 系の熱力学データベース

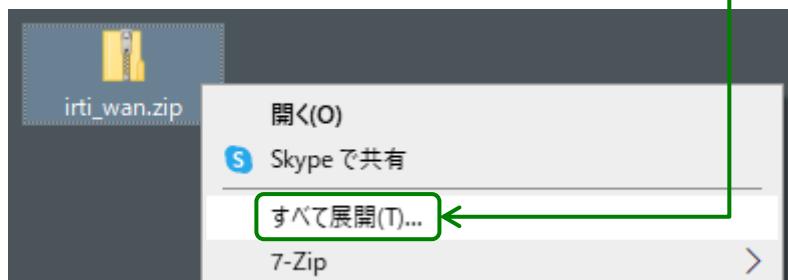
熱力学データベースのインストール

1. ダウンロードした zip ファイルを右クリック ⇒ プロパティ



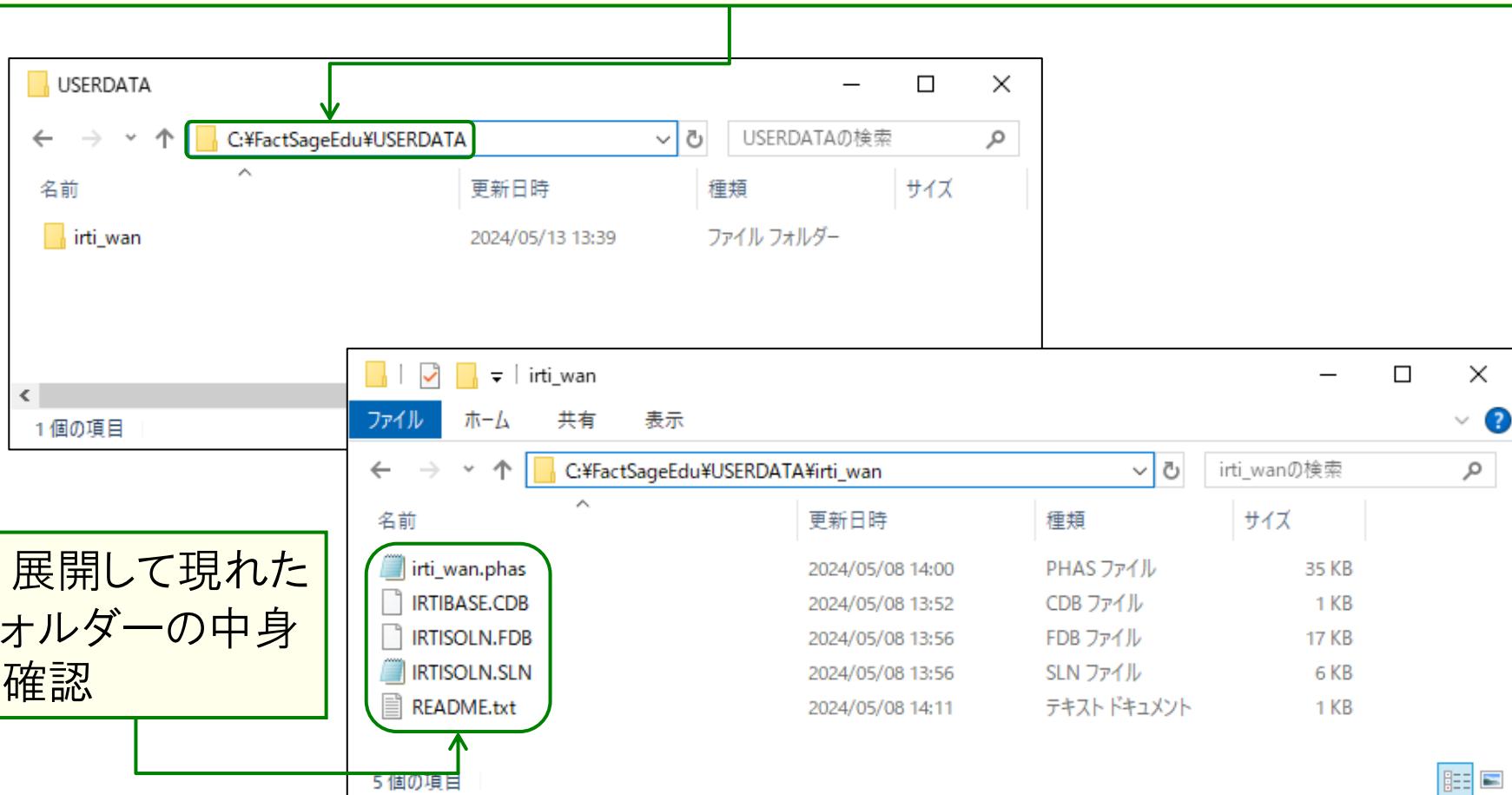
2. セキュリティの「許可する」に
チェックを入れて OK をクリック

3. ダウンロードした zip ファイルを
右クリック ⇒ すべて展開



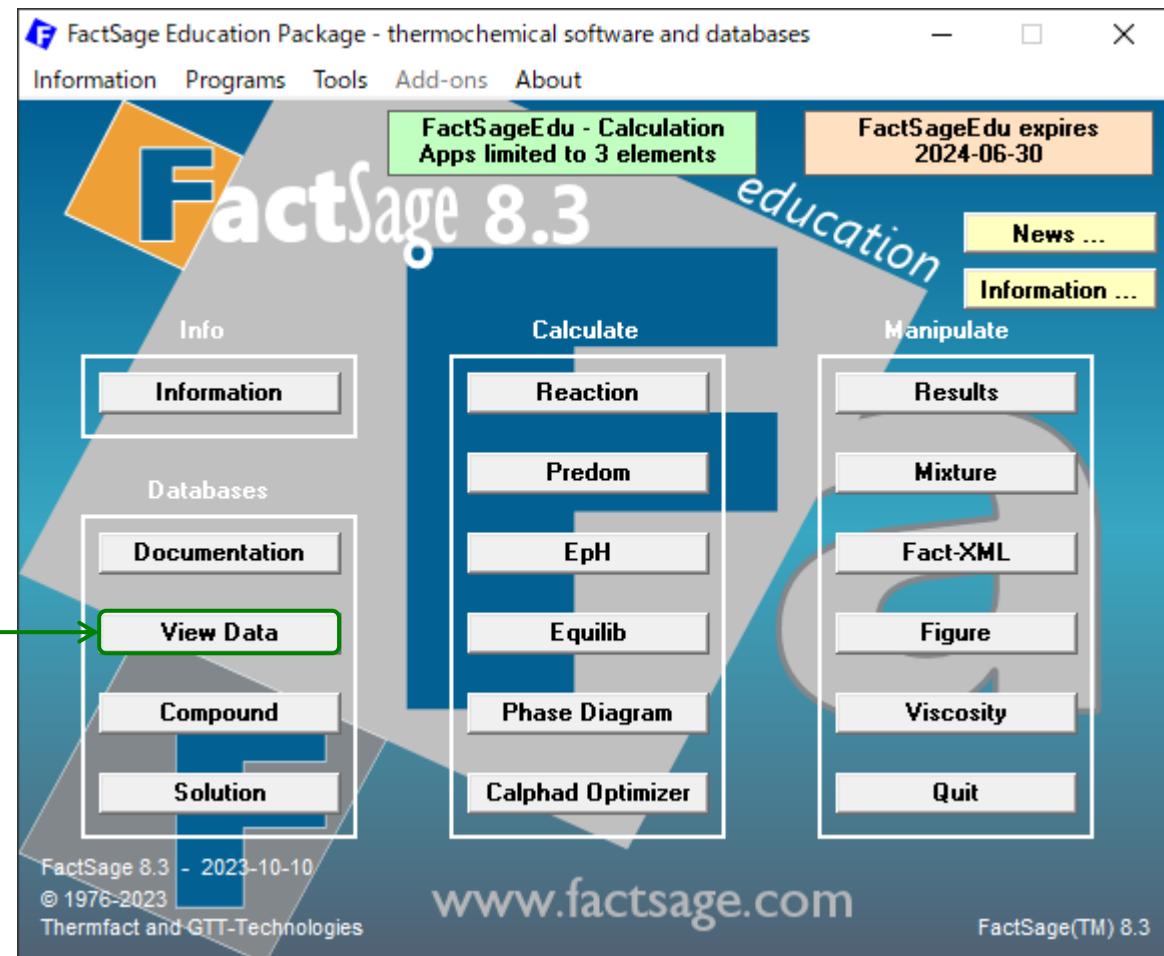
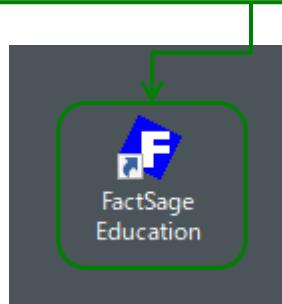
熱力学データベースのインストール

4. 展開して現れたフォルダーを FactSage あるいは FactSage Education のインストールフォルダーに保存する。インストールフォルダーにサブフォルダーを作成してもよい。ただしフォルダーナンバーは英数字にすること。下の例では USERDATA というサブフォルダーを新規作成して保存した



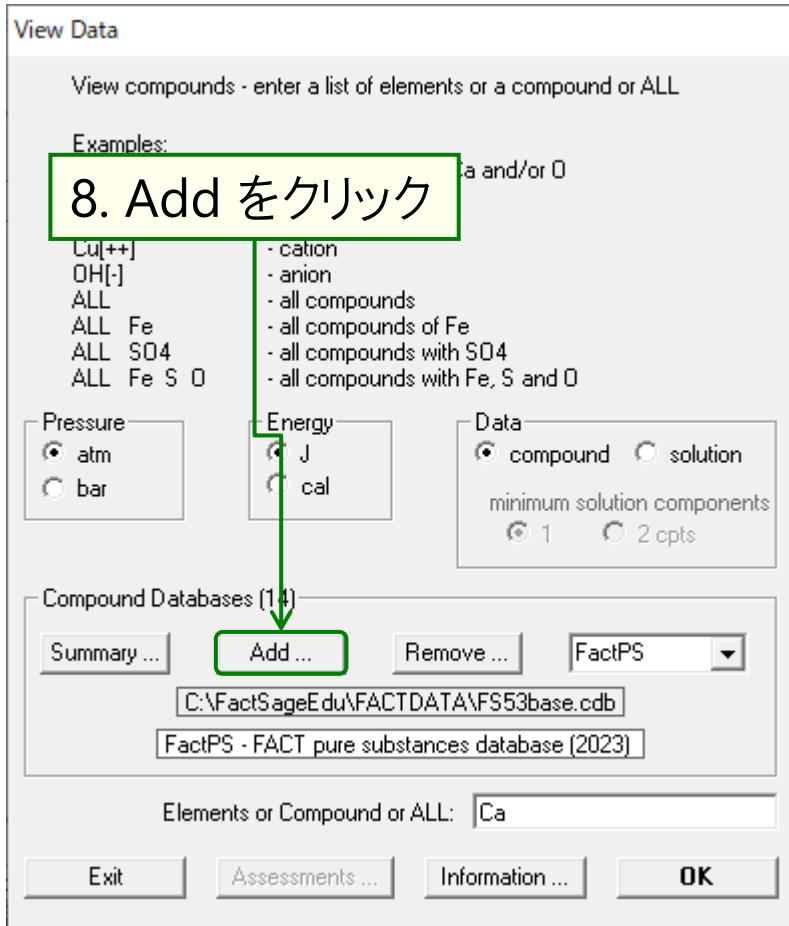
熱力学データベースのインストール

6. FactSage Education を起動

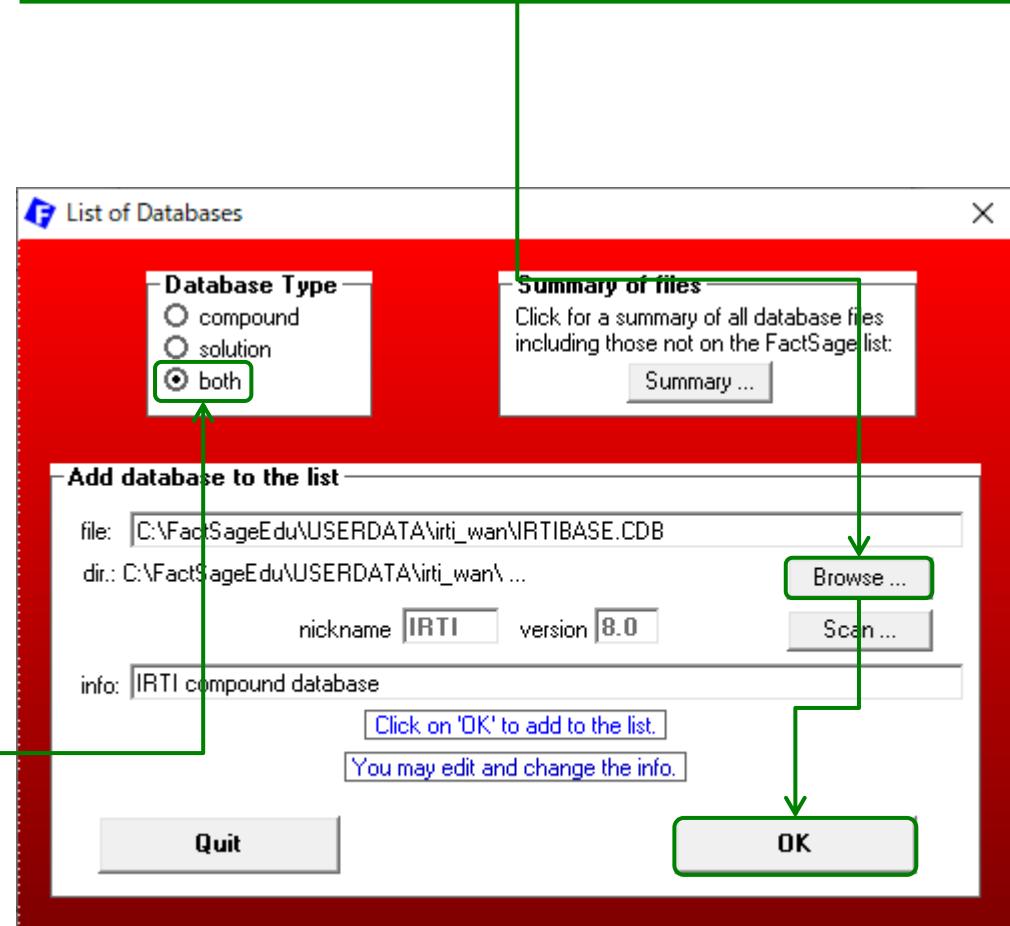


7. View Data を起動

熱力学データベースのインストール

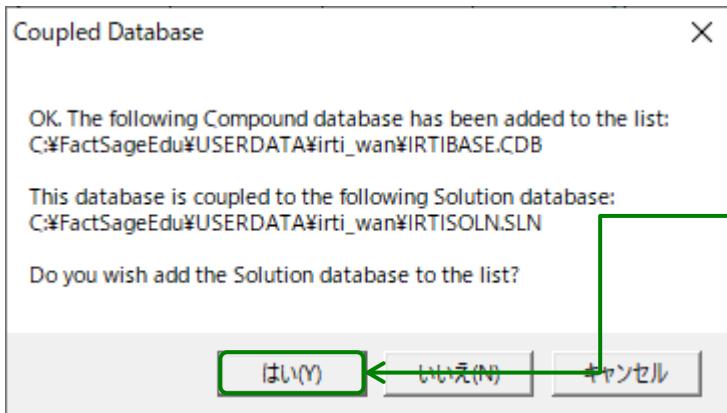


10. Browse をクリック ⇒ 登録したい熱力学データベースファイル(IRTIBASE.CDB)を選択して OK をクリック。IRTISOLN.SLN でもよい

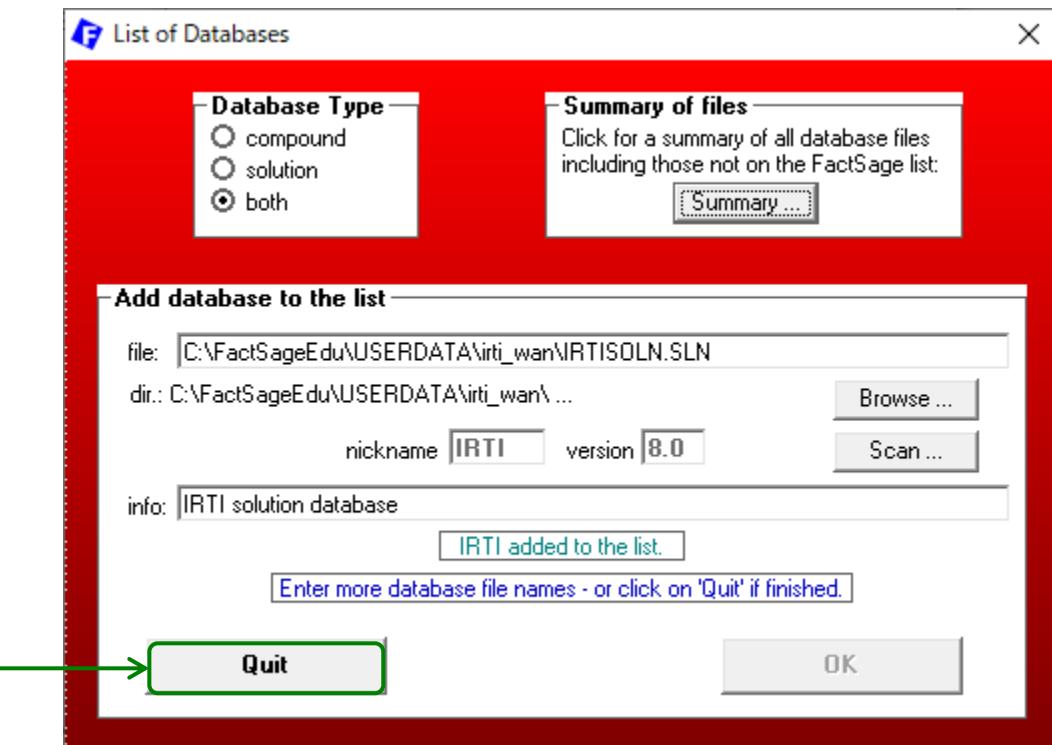


9. both を選択

熱力学データベースのインストール



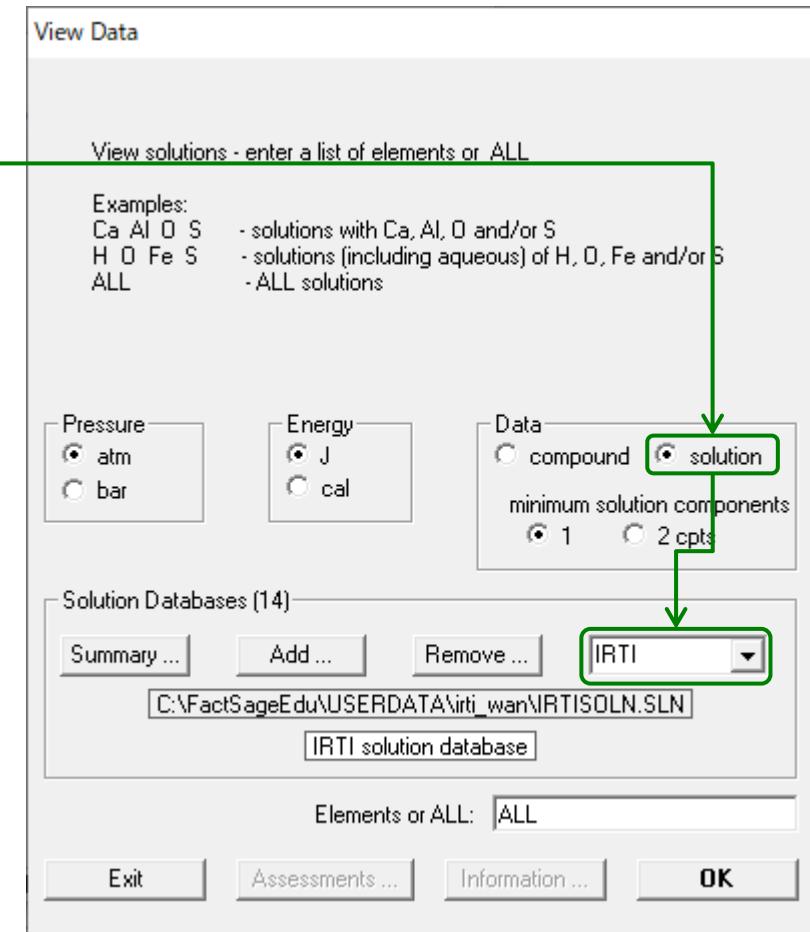
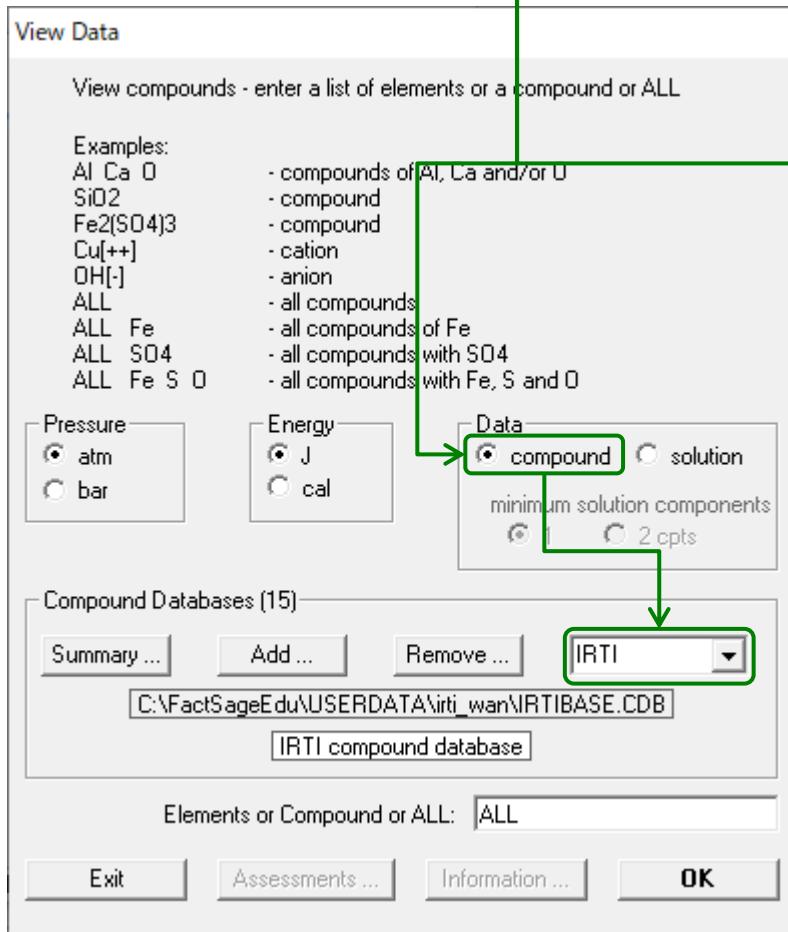
11. 溶体データベースと純物質データベースを同時に登録したいので「はい」をクリック。すぐ終わらない。数秒ほど待つ



12. Quit をクリック

熱力学データベースのインストール

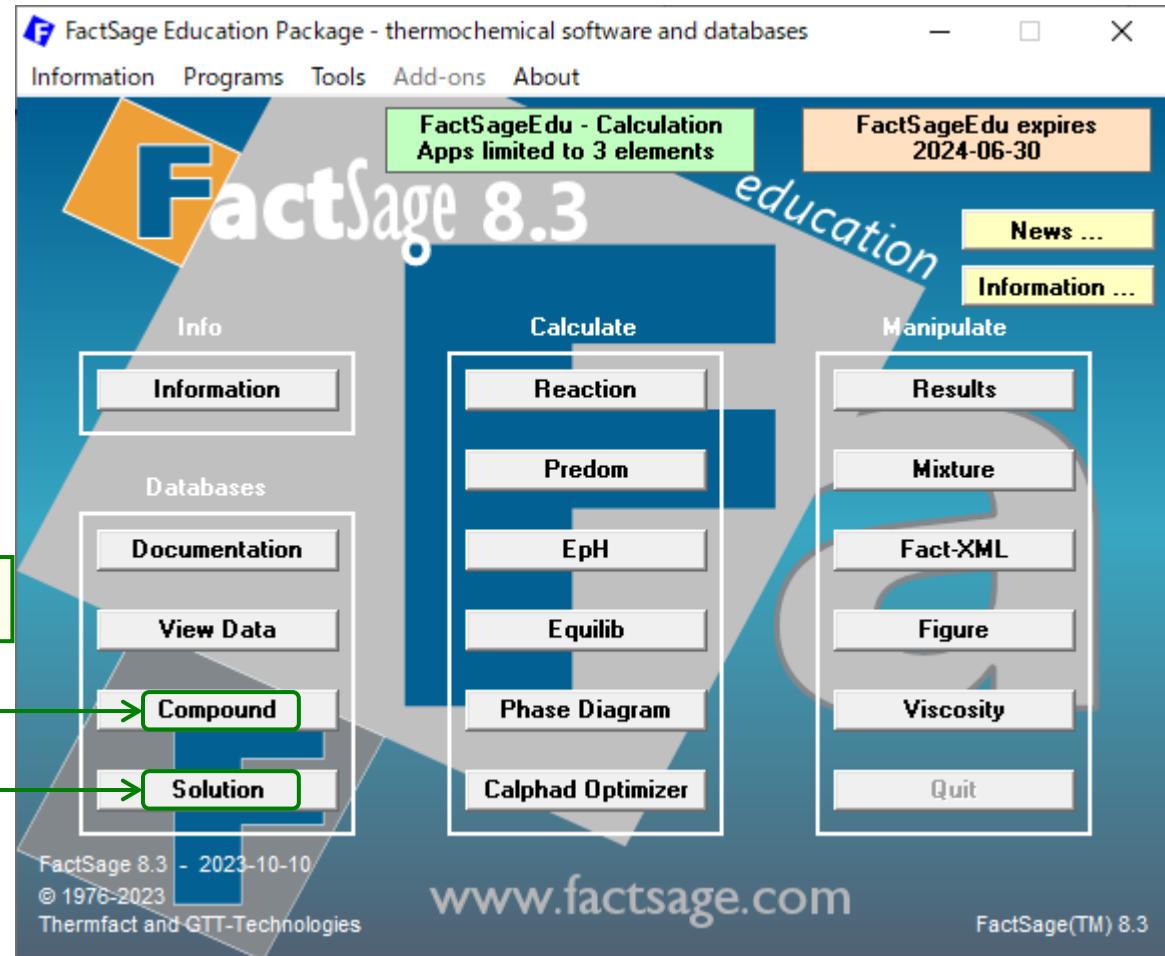
13. IRTI データベースが登録されていることを確認



熱力学データベースのインストール

熱力学データベースの編集に使うアプリは Compound と Solution である。アプリの使用方法はここでは説明しないが、起動してデータベースの内容を調べてみよう

注意: IRTI データベースは溶体相のみで構成されていて、純物質データベースの中身は空である



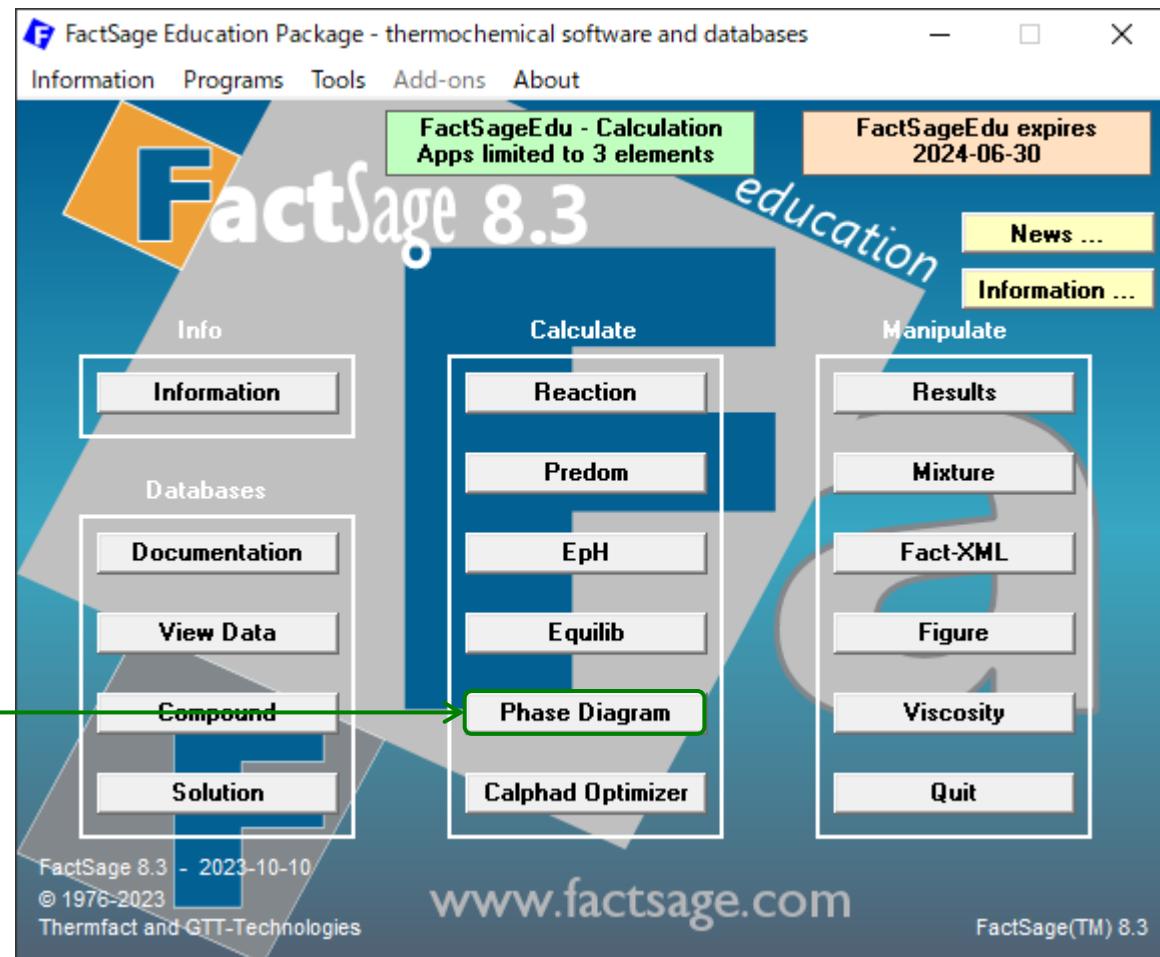
純物質データベースの編集

溶体データベースの編集

2. 計算状態図(設定ファイルの利用)

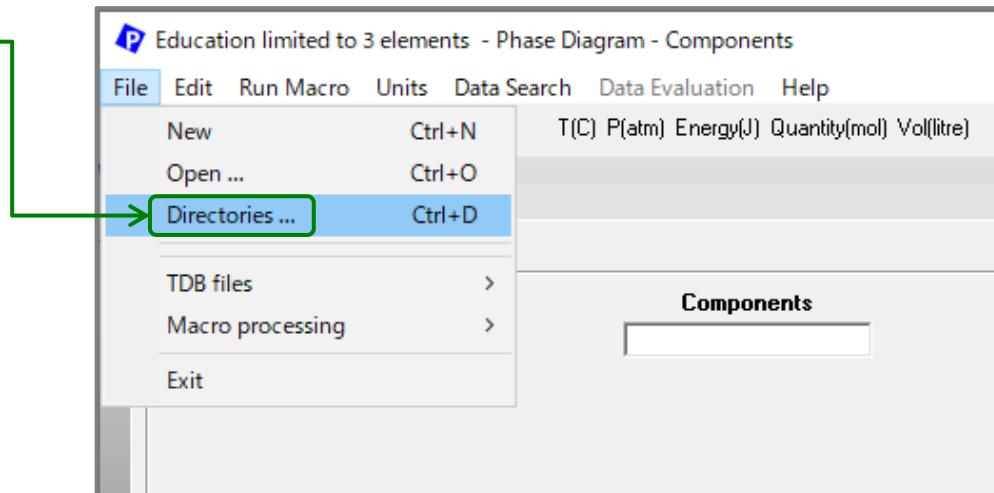
計算状態図(設定ファイルの利用)

1. Phase Diagram を起動

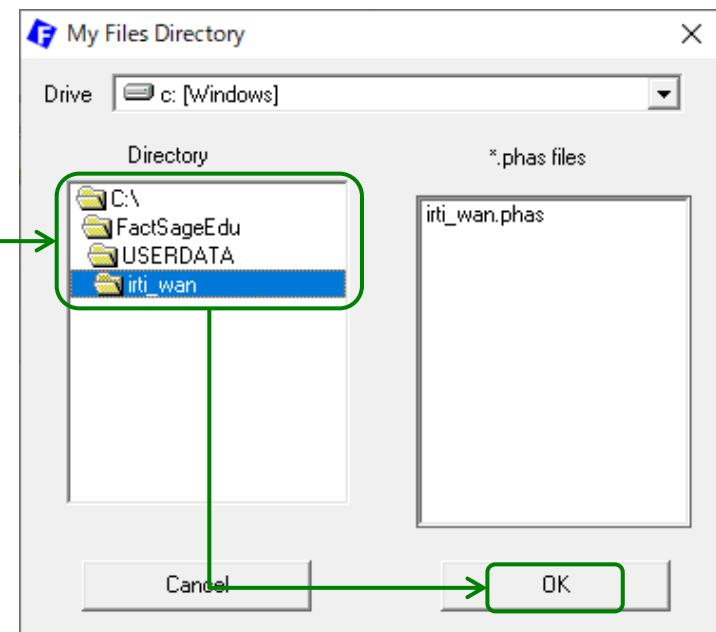
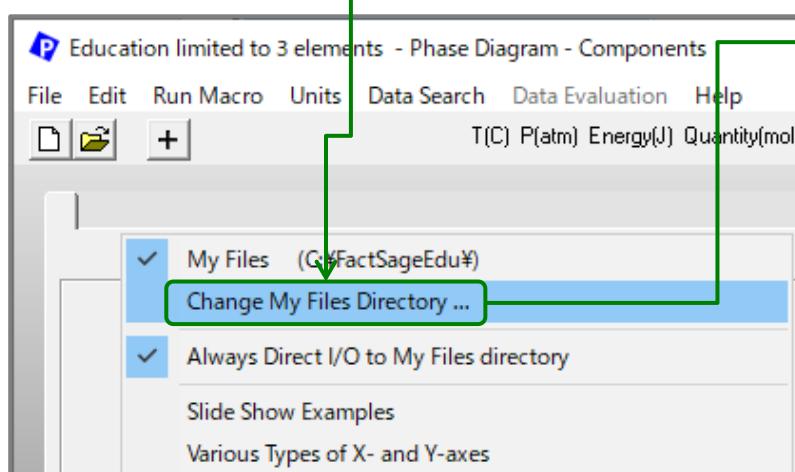


計算状態図(設定ファイルの利用)

2. File ⇒ Directories

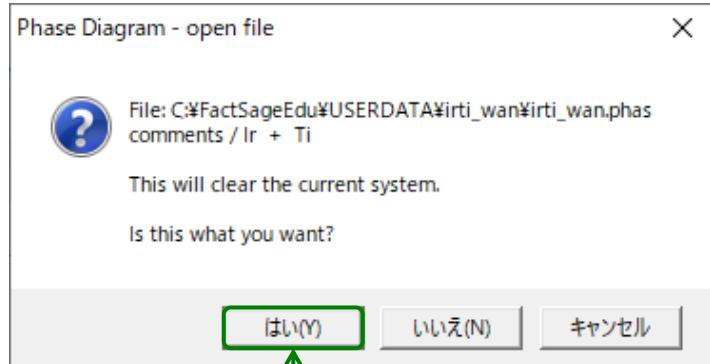
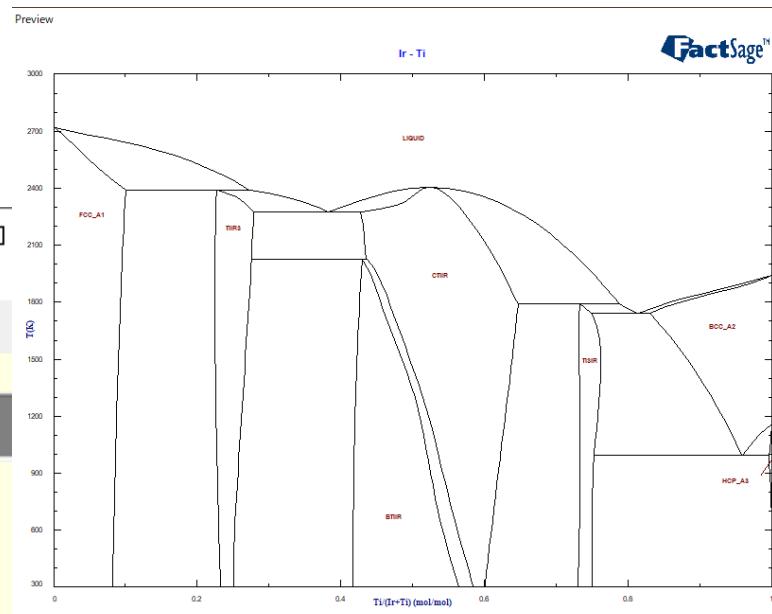
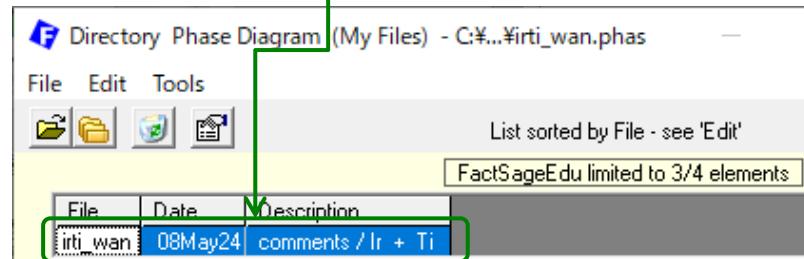


3. Change My Files Directory ... をクリックして熱力学データベースが保存されているフォルダーを探してダブルクリックしてOKをクリック



計算状態図(設定ファイルの利用)

4. 設定ファイルをダブルクリック



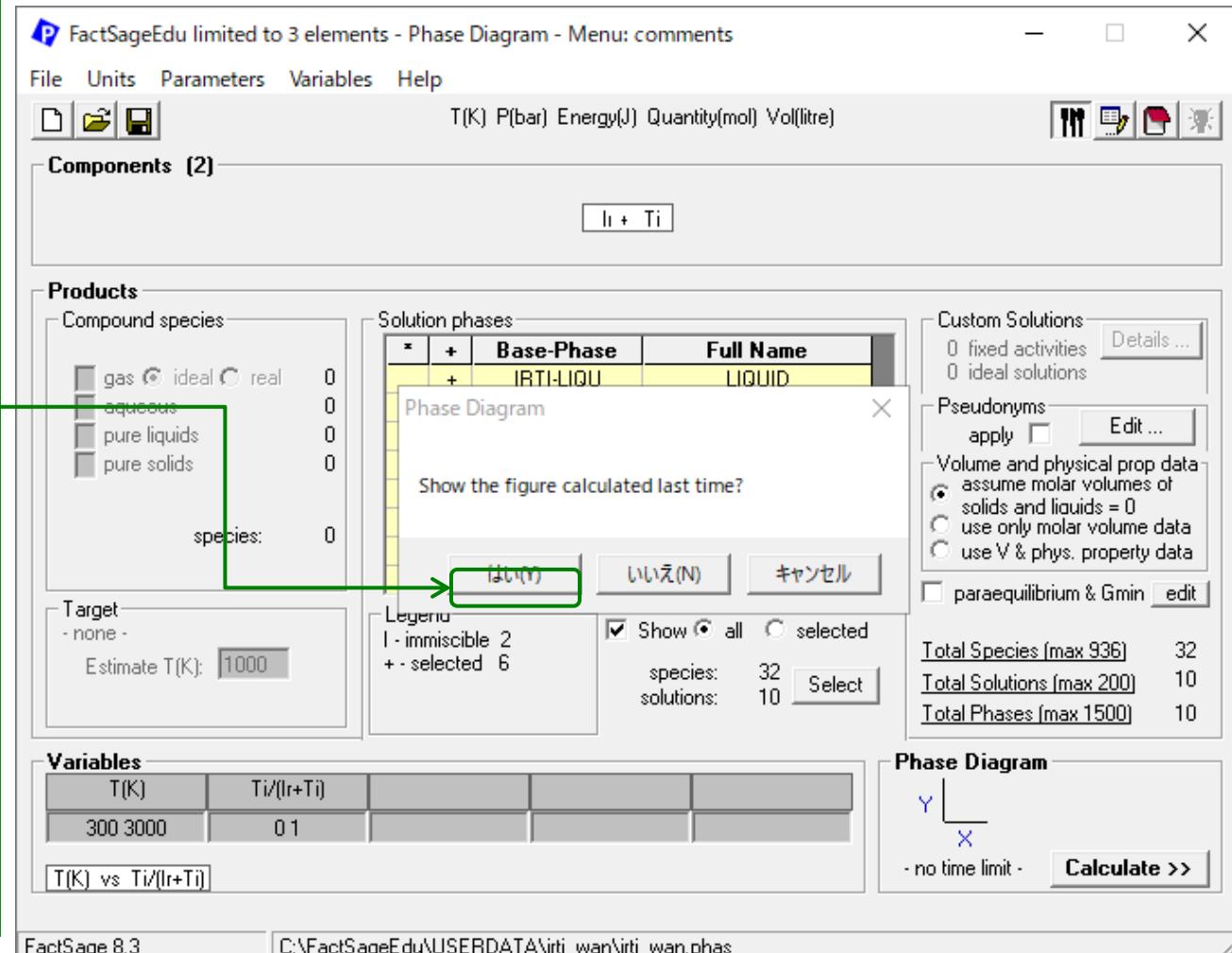
5. 現在の設定をクリアしていいか尋ねられるので「はい」をクリック

計算状態図(設定ファイルの利用)

6. 保存されている状態図を表示させたい場合は「はい」をクリック。

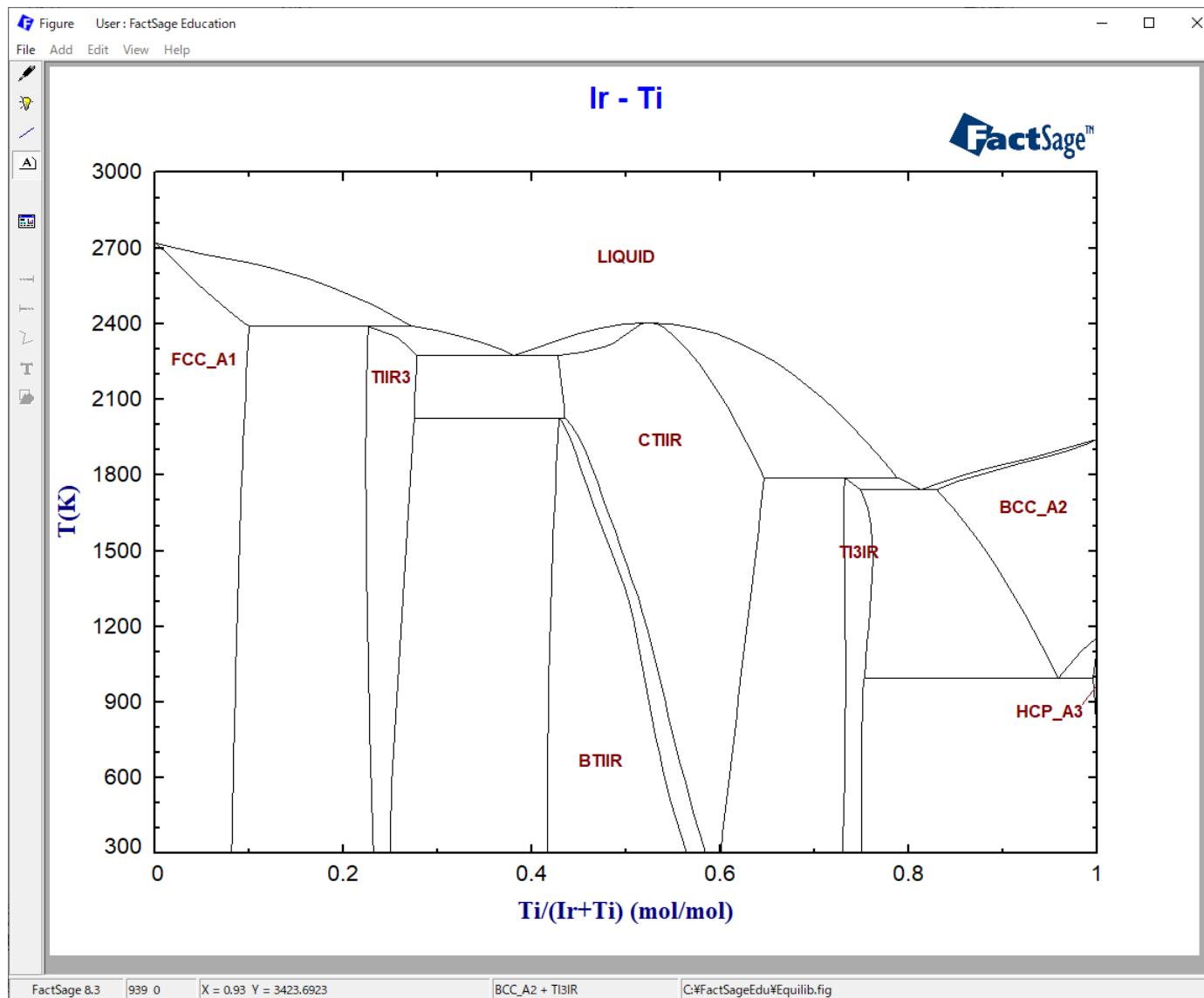
もし「- no product species selected.」のメッセージが表示されて、状態図が表示されない場合は、もう一度、File ⇒ Open をクリックして設定ファイルを読み込ませる。

Calculate ボタンをクリックして計算させてもよいだろう



計算状態図(設定ファイルの利用)

状態図を表示させた結果



RCCM Gibbs energy Database for FactSage の使い方

作成日 / 2024 年 5 月 30 日

著者

深山 大元



Research Center of Computational Mechanics, Inc.

株式会社計算力学研究センター

- 〒142-0041 東京都品川区戸越 1-7-1 東急戸越ビル 8 階
- 03-3785-3033
- factsage-gedb@rccm.co.jp
- <https://www.rccm.co.jp/>