

# 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, FToxid 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。

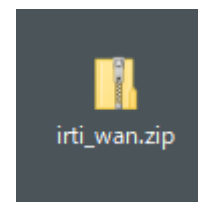
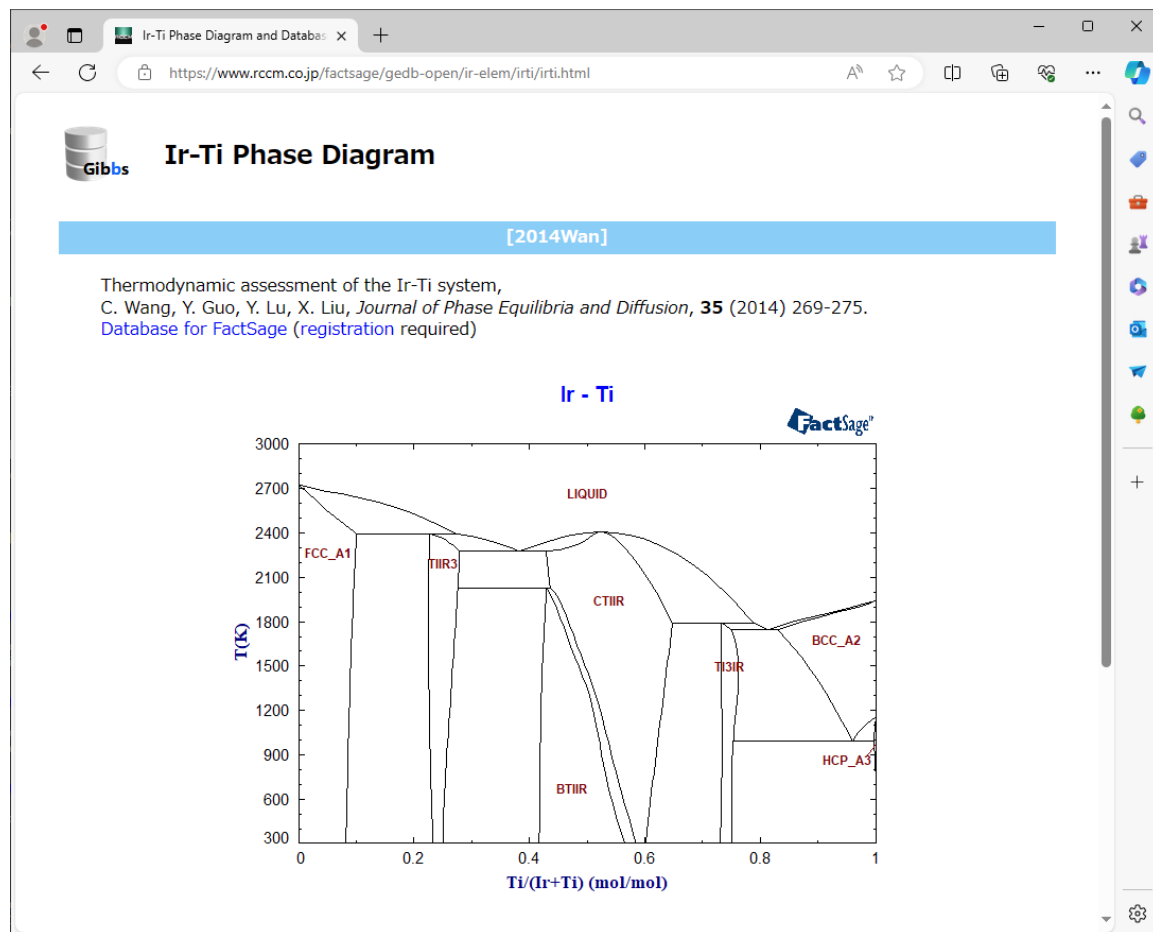
そして熱力学データベースのパラメーターは FactSage Education の Compound アプリと Solution アプリを使って編集することができます。パラメーターを少し変更して状態図計算すると、状態図はどのように変化するでしょうか。試してみてください。熱力学データベースをより深く理解できるようになるはずです。

RCCM FactSage サポートチーム

# 1. 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



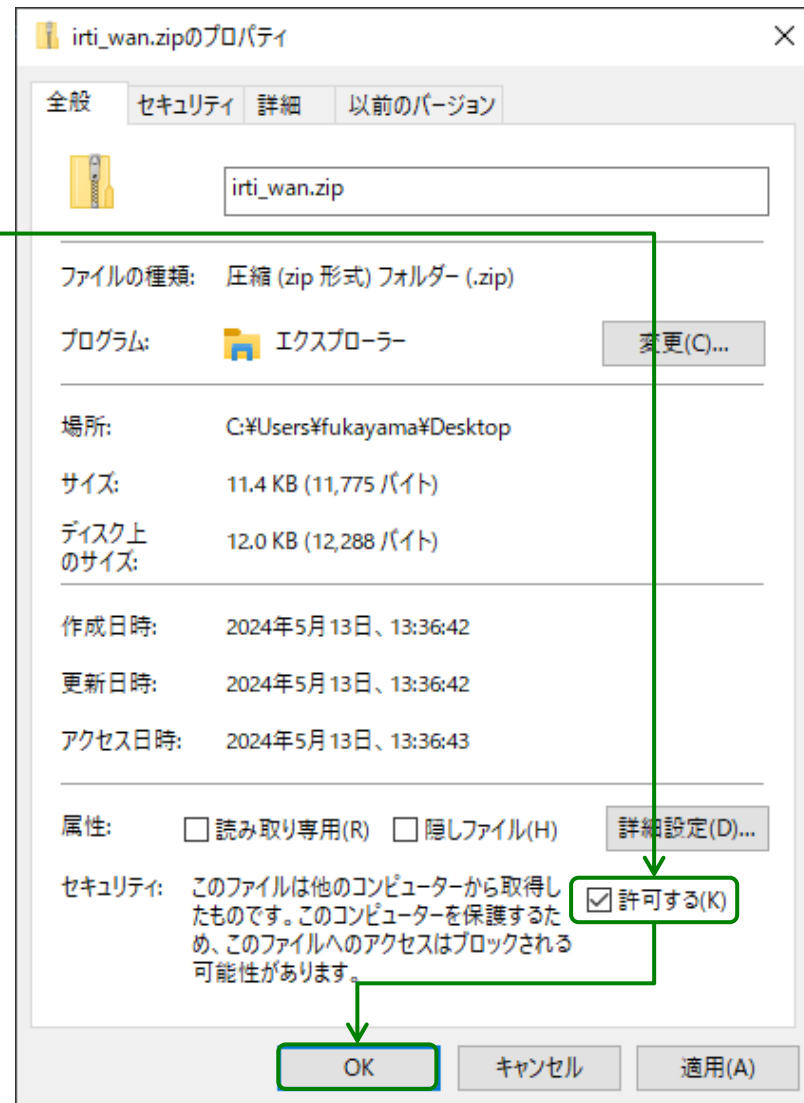
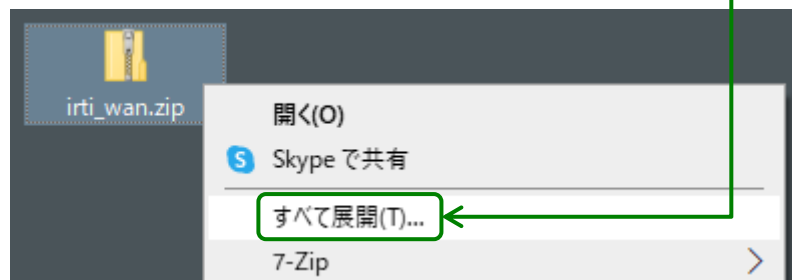
デスクトップに保存した Ir-Ti 系の熱力学データベース

# 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

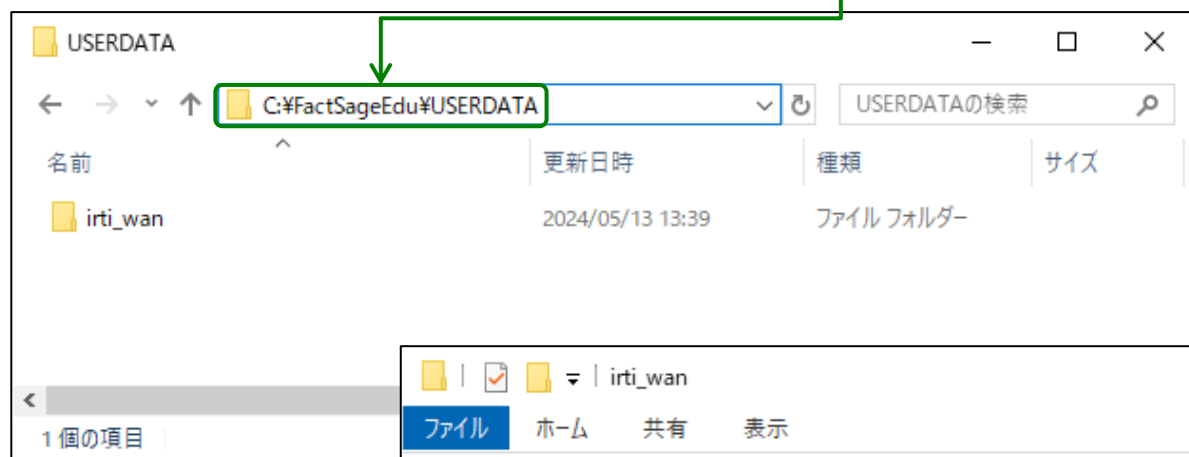
2. セキュリティの「許可する」にチェックを入れて OK をクリック

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。ただしフォルダー名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

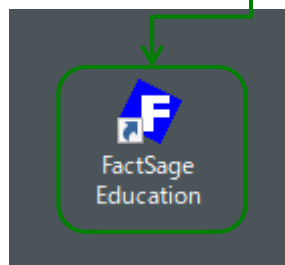


5. 展開して現れたフォルダーの中身を確認

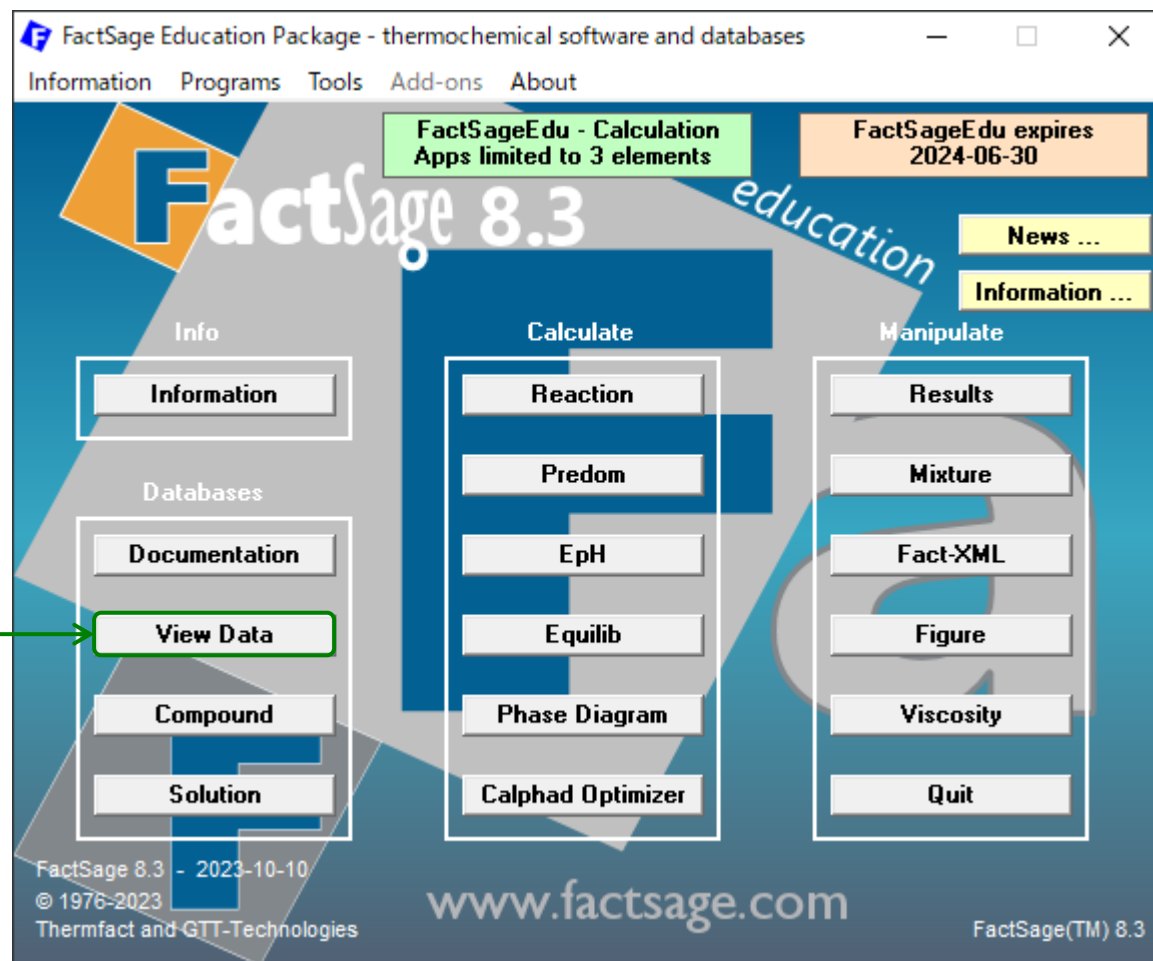


# 熱力学データベースのインストール

## 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

View Data

View compounds - enter a list of elements or a compound or ALL

Examples:

8. Add をクリック

- Cu[++] - cation
- OH[-] - anion
- ALL - all compounds
- ALL Fe - all compounds of Fe
- ALL SO4 - all compounds with SO4
- ALL Fe S O - all compounds with Fe, S and O

Pressure  
☒ atm  
☐ bar

Energy  
☒ J  
☐ cal

Data  
☒ compound ☐ solution  
minimum solution components  
☒ 1 ☐ 2 cpts

Compound Databases (14)

Summary ... **Add ...** Remove ... FactPS

C:\FactSageEdu\FACTDATA\F553base.cdb

FactPS - FACT pure substances database (2023)

Elements or Compound or ALL: Ca

Exit Assessments ... Information ... OK

9. both を選択

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

List of Databases

Database Type  
☐ compound  
☐ solution  
☒ both

Summary of files  
Click for a summary of all database files including those not on the FactSage list:  
Summary ...

Add database to the list

file: C:\FactSageEdu\USERDATA\virt\_wan\IRTIBASE.CDB

dir: C:\FactSageEdu\USERDATA\virt\_wan\...

nickname IRTI version 8.0

info: IRTI compound database

Click on 'OK' to add to the list.  
You may edit and change the info.

Quit

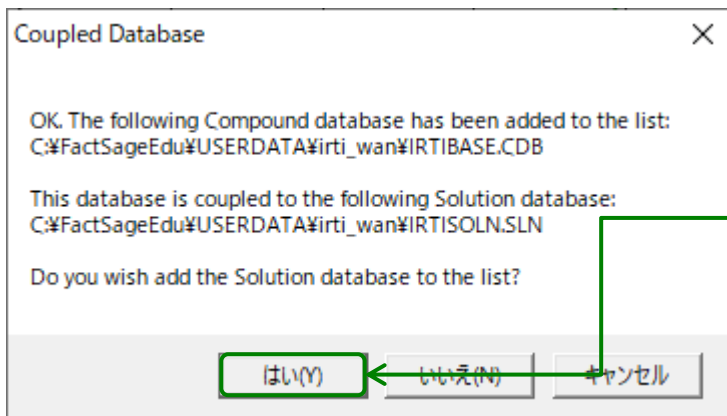
Browse ...

Scan ...

OK

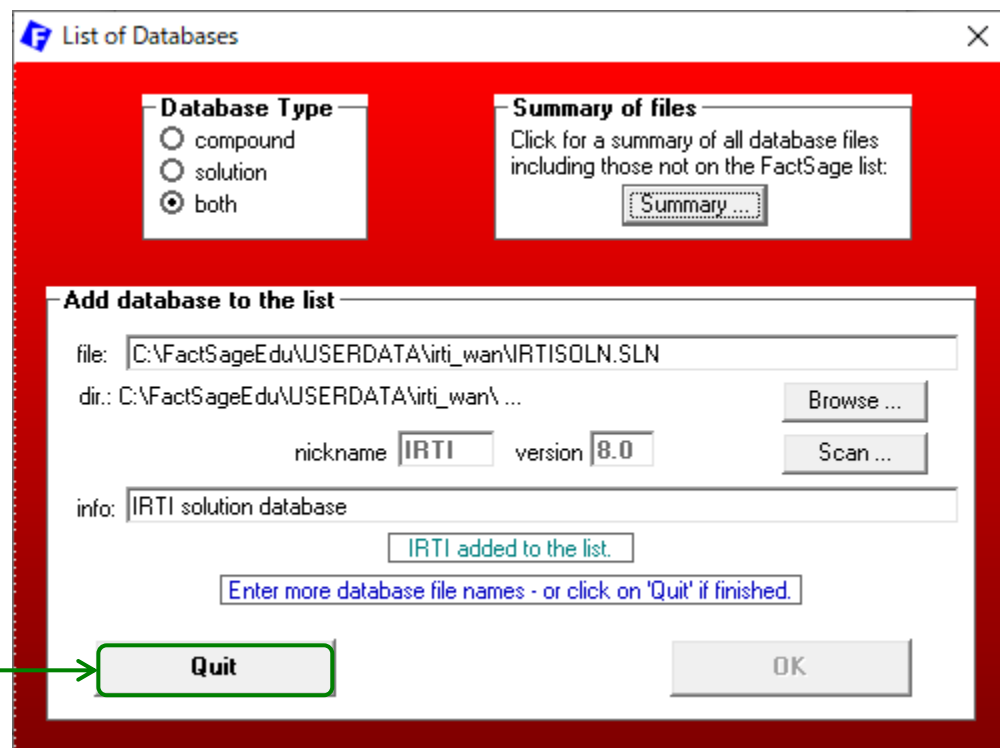


# 熱力学データベースのインストール



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

**View Data**

View compounds - enter a list of elements or a compound or ALL

Examples:

- Al Ca O - compounds of Al, Ca and/or O
- SiO<sub>2</sub> - compound
- Fe<sub>2</sub>(SO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> - compound
- Cu<sup>++</sup> - cation
- OH<sup>-</sup> - anion
- ALL - all compounds
- ALL Fe - all compounds of Fe
- ALL SO<sub>4</sub> - all compounds with SO<sub>4</sub>
- ALL Fe S O - all compounds with Fe, S and O

Pressure: ☒ atm ☐ bar

Energy: ☒ J ☐ cal

Data: ☒ compound ☐ solution

minimum solution components: ☒ 1 ☐ 2 cpts

Compound Databases (15)

Summary ... Add ... Remove ... **IRTI**

C:\FactSageEdu\USERDATA\irti\_wan\IRTIBASE.CDB

IRTI compound database

Elements or Compound or ALL: ALL

Exit Assessments ... Information ... **OK**

**View Data**

View solutions - enter a list of elements or ALL

Examples:

- Ca Al O S - solutions with Ca, Al, O and/or S
- H O Fe S - solutions (including aqueous) of H, O, Fe and/or S
- ALL - ALL solutions

Pressure: ☒ atm ☐ bar

Energy: ☒ J ☐ cal

Data: ☐ compound ☒ solution

minimum solution components: ☒ 1 ☐ 2 cpts

Solution Databases (14)

Summary ... Add ... Remove ... **IRTI**

C:\FactSageEdu\USERDATA\irti\_wan\IRTISOLN.SLN

IRTI solution database

Elements or ALL: ALL

Exit Assessments ... Information ... **OK**

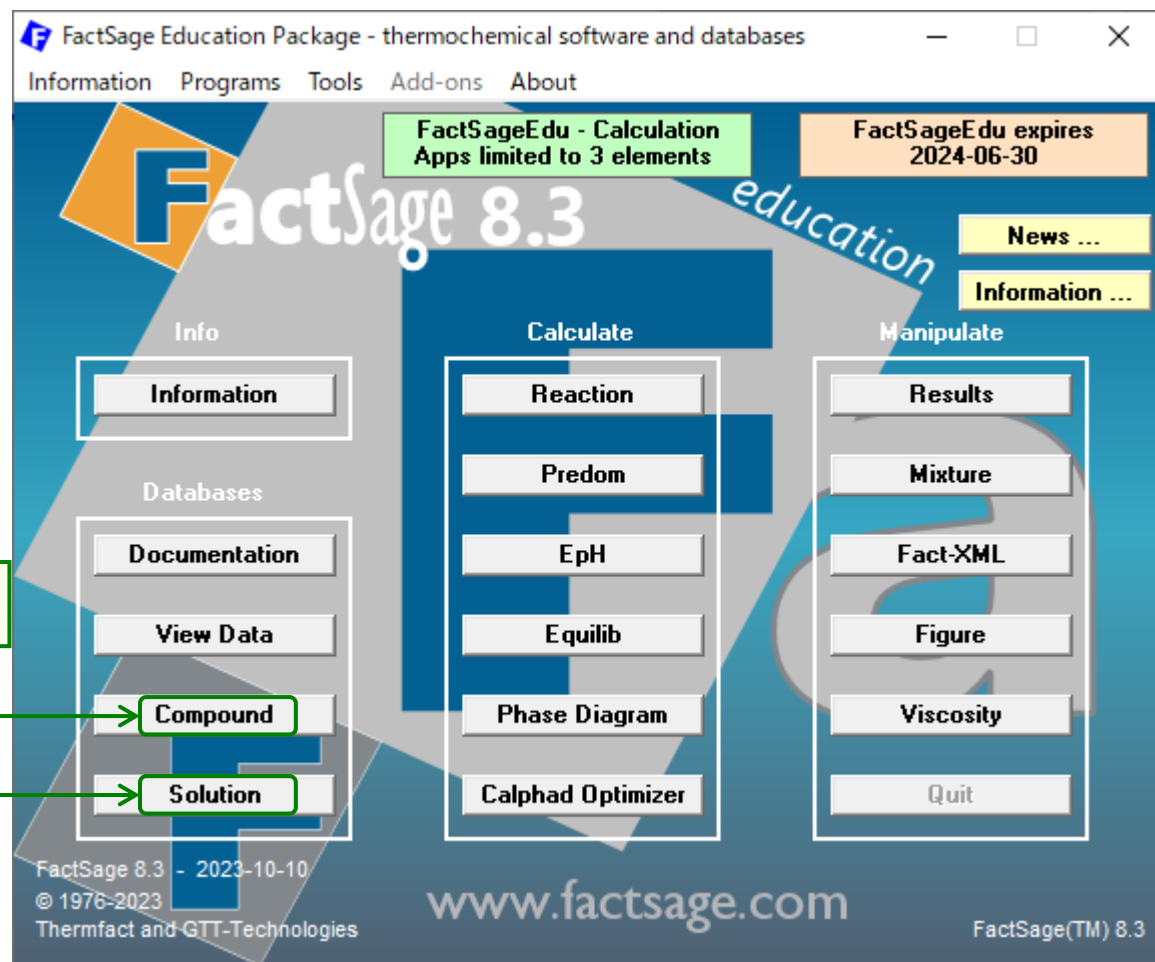
# 熱力学データベースのインストール

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

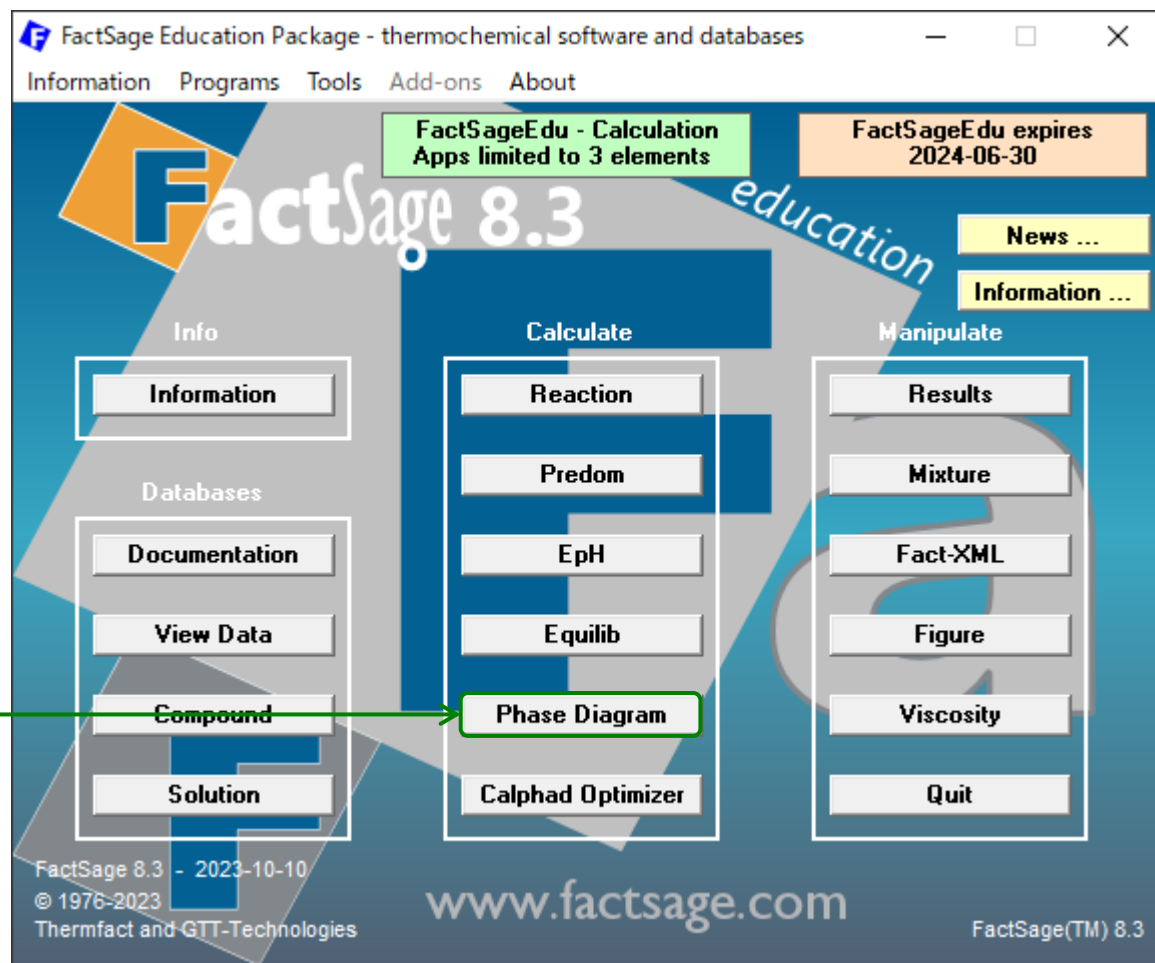


---

## 2. 計算状態図(設定ファイルの利用)

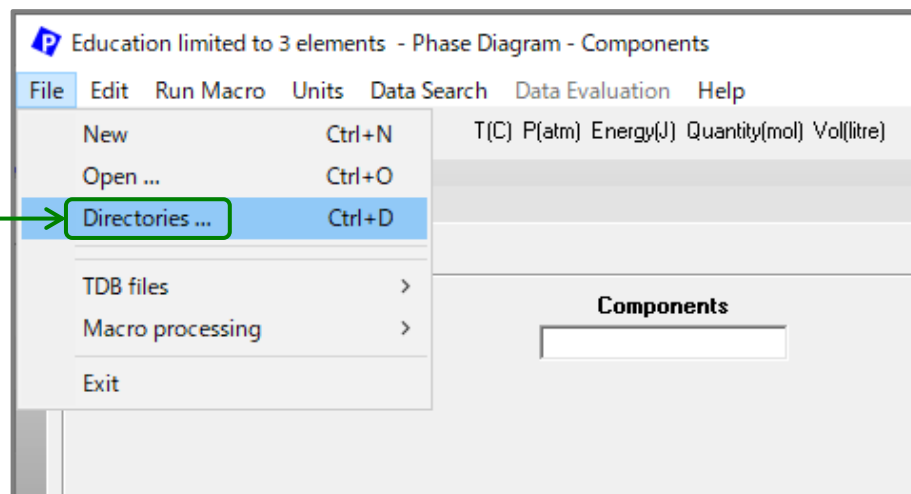
# 計算状態図(設定ファイルの利用)

## 1. Phase Diagram を起動

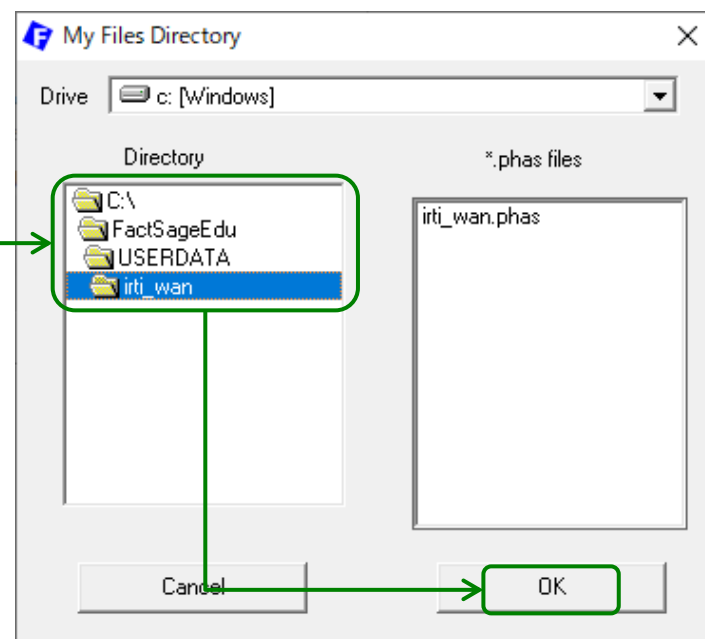
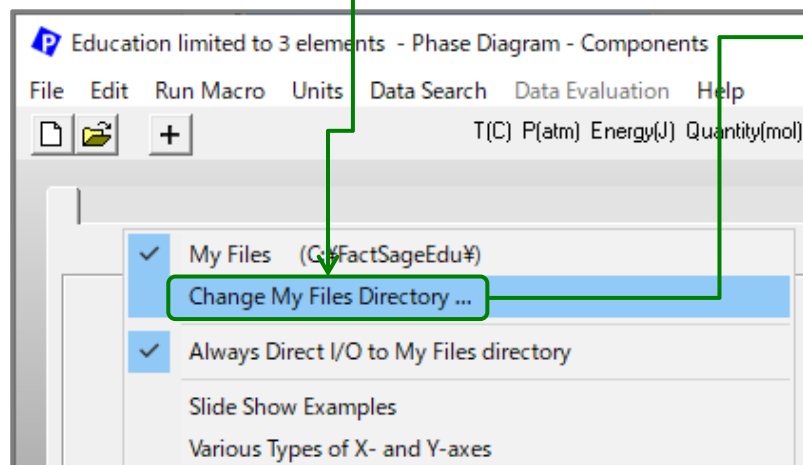


# 計算状態図(設定ファイルの利用)

## 2. File ⇒ Directories

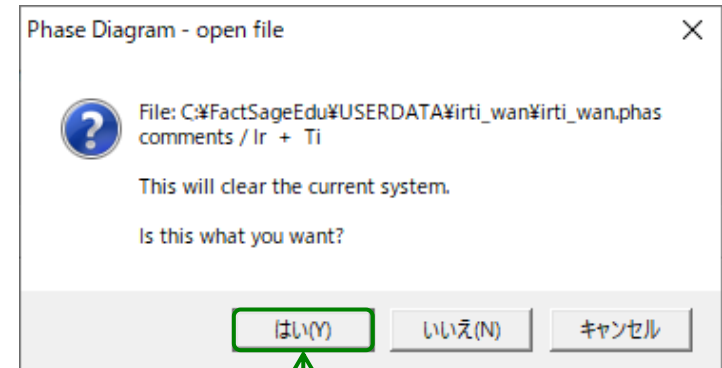
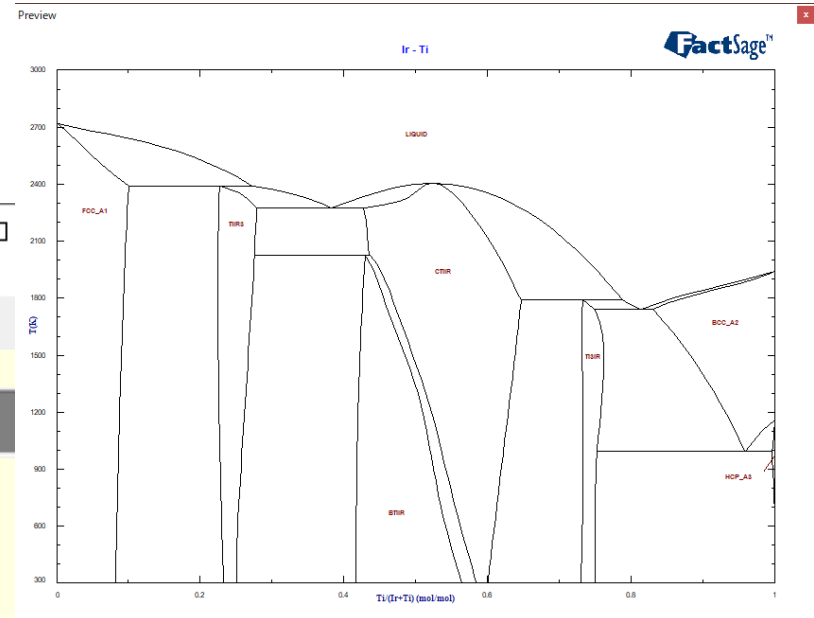
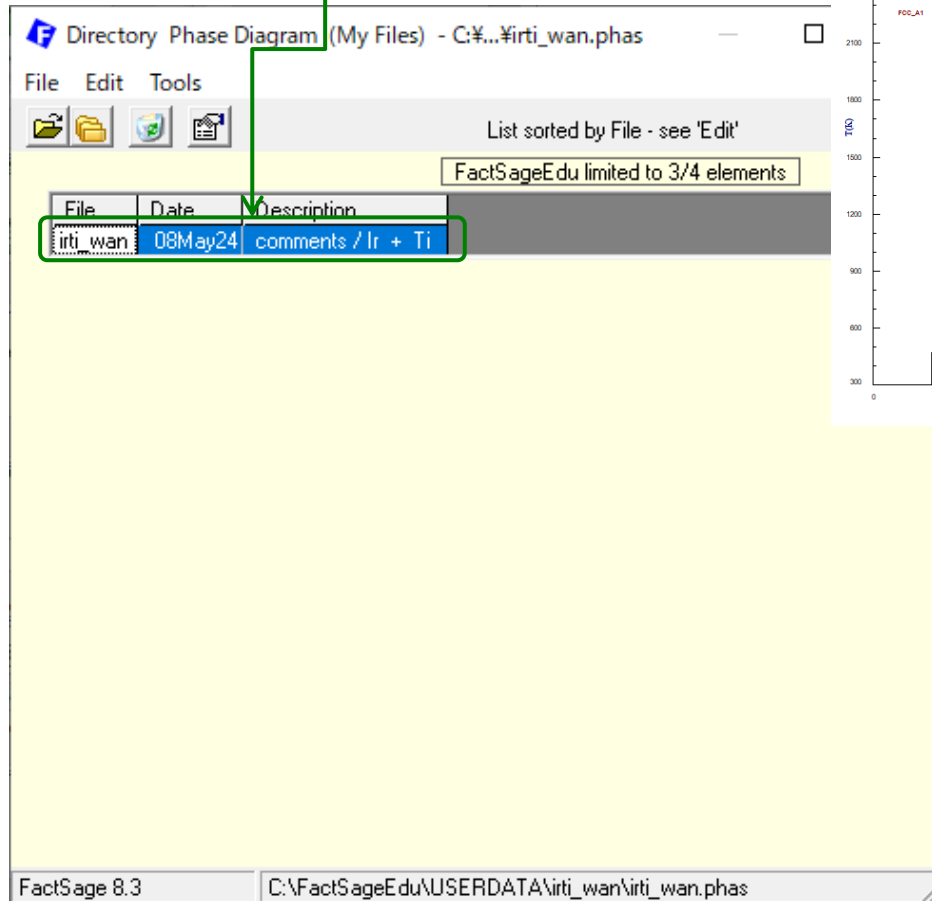


## 3. Change My Files Directory ... をクリックして熱力学データベースが保存されているフォルダーを探してダブルクリックしてOK をクリック



# 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

FactSageEdu limited to 3 elements - Phase Diagram - Menu: comments

File Units Parameters Variables Help

T(K) P(bar) Energy(J) Quantity(mol) Vol(litre)

Components (2)

Ir + Ti

Products

Compound species

gas ☒ ideal ☐ real 0

aqueous 0

pure liquids 0

pure solids 0

species: 0

Target

- none -

Estimate T(K): 1000

Solution phases

| * | + | Base-Phase | Full Name |
|---|---|------------|-----------|
|   | + | IRTI-LIQU  | LIQUID    |

Phase Diagram

Show the figure calculated last time?

はい(Y) いいえ(N) キャンセル

Legend

I - immiscible 2

+ - selected 6

Species: 32

Solutions: 10

Custom Solutions

0 fixed activities

0 ideal solutions

Pseudonyms

apply ☐ Edit ...

Volume and physical prop data

☒ assume molar volumes of solids and liquids = 0

☐ use only molar volume data

☐ use V & phys. property data

☐ paraequilibrium & Gmin edit

Total Species (max 936) 32

Total Solutions (max 200) 10

Total Phases (max 1500) 10

Variables

| T(K) | Ti/(Ir+Ti) |   |   |  |
|------|------------|---|---|--|
| 300  | 3000       | 0 | 1 |  |

T(K) vs Ti/(Ir+Ti)

Phase Diagram

Y

X

- no time limit - Calculate >>

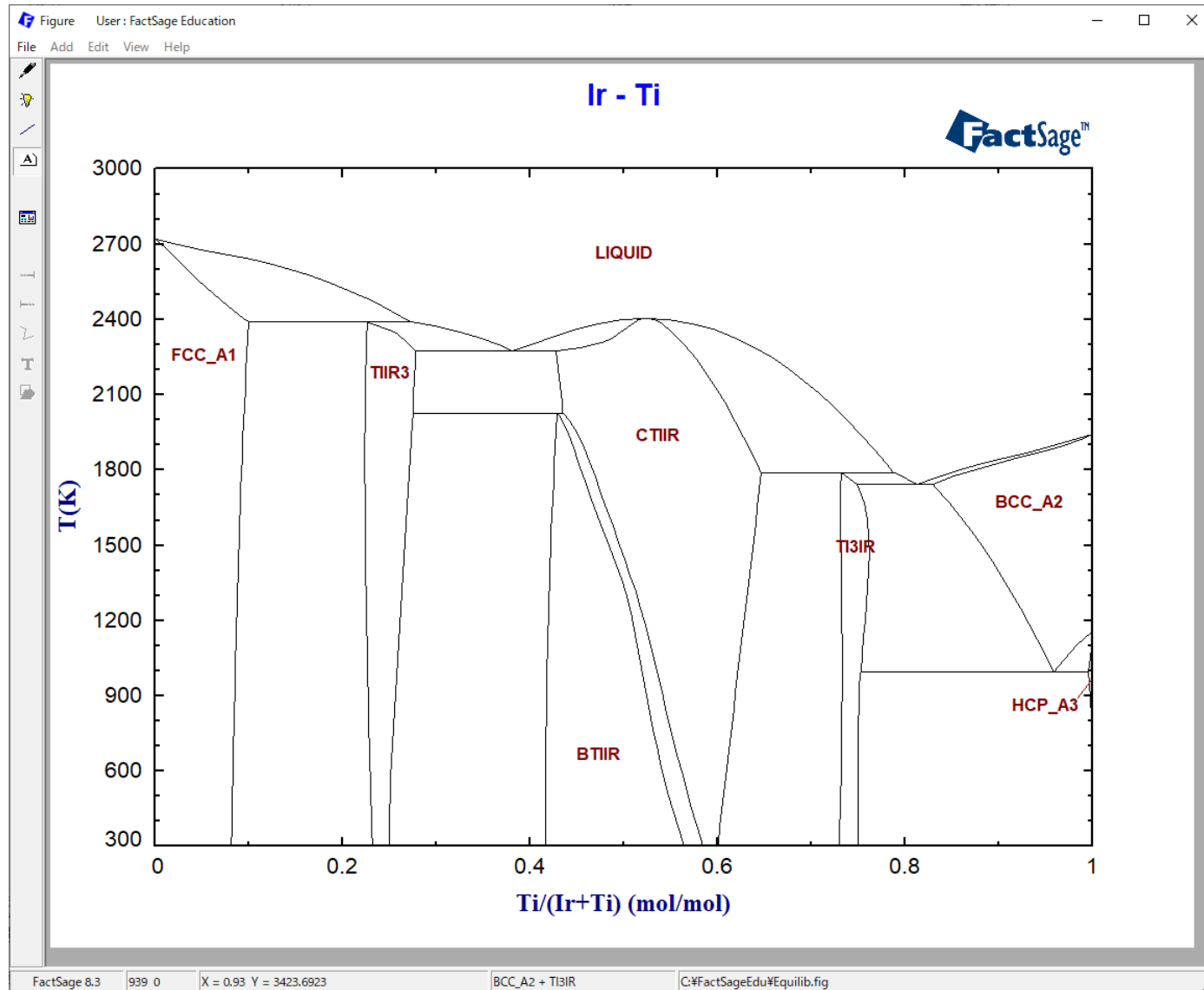
FactSage 8.3

C:\FactSageEdu\USERDATA\irti\_wan\irti\_wan.phas



# 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/>