

# はじめて使う FactSage Education

(インストール・熱力学平衡計算・状態図計算)



(株)計算力学研究センター  
FactSage サポートチーム

# まえがき

FactSage Education は FactSage の機能制限版です。教育機関での利用を想定していますが、どなたでも無料で FactSage の基本機能を試すことができます。

FactSage Education による手軽な数値実験は、「化学熱力学」や「状態図」をより深く理解する助けとなるはずです。

この資料では FactSage Education Package のインストール手順と、熱力学平衡計算に使われる Equilib アプリ、それから状態図計算に使われる Phase Diagram アプリの基本操作を説明します。

FactSage と熱力学平衡計算の世界によこそ！

RCCM FactSage サポートチーム

# 目次

---

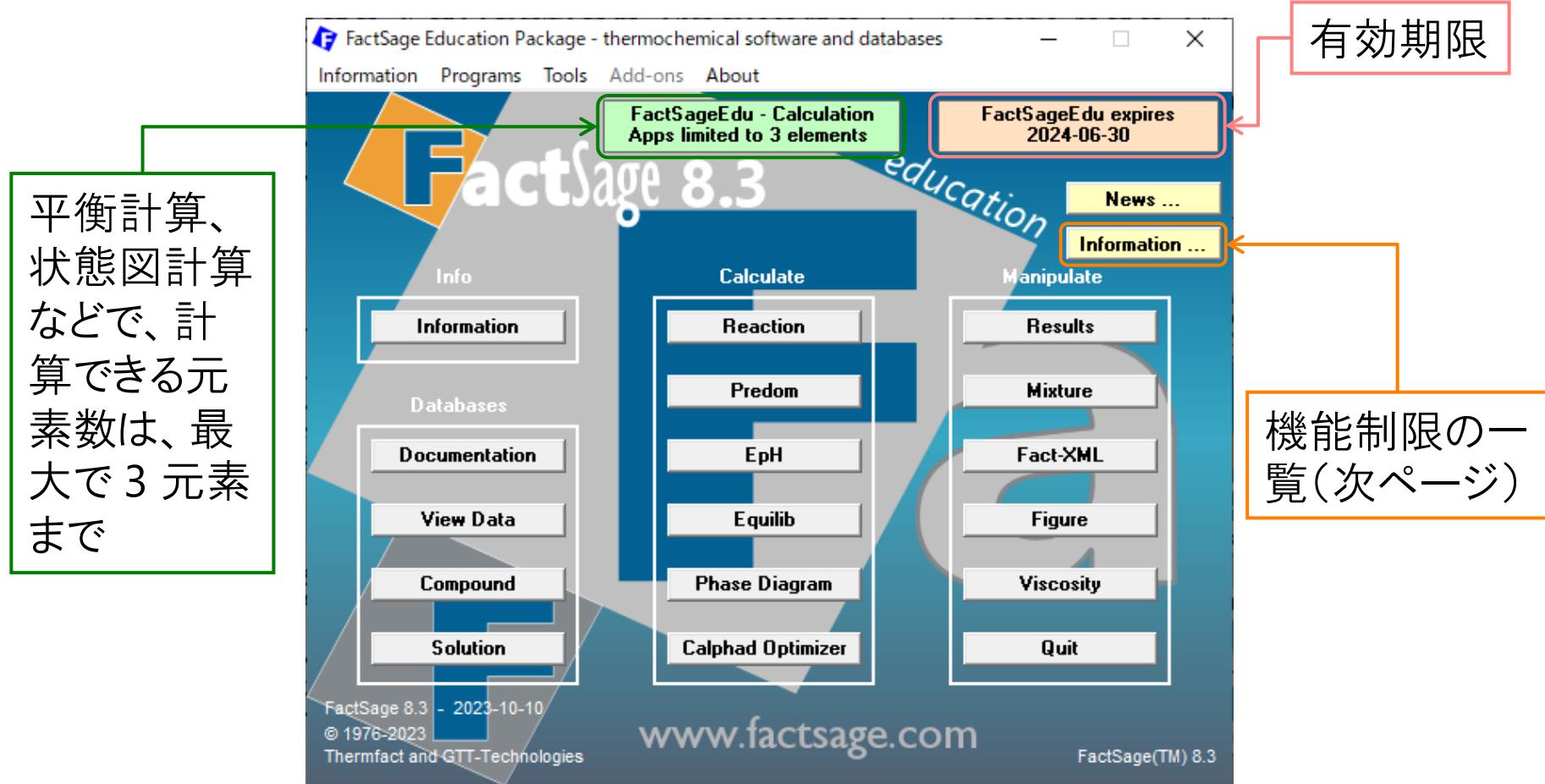
1. FactSage Education Package.....	4
2. ダウンロードとインストール.....	8
3. アンインストール.....	20
4. 熱力学平衡計算(Equilib).....	22
5. 状態図計算(Phase Diagram).....	76

---

# 1. FactSage Education Package

# FactSage Education Package

FactSage Education Package は FactSage の機能制限版である。インターネットに接続していれば使用可能である。無料であり、教育機関での利用を想定している。



# FactSage Education Package

The screenshot shows a web browser window with the title "FactSageEdu Info" and the URL "https://www.factsag...". The page content is titled "FactSageEdu - Restrictions". It states that FactSageEdu gives free access to most of the FactSage 8.3 Apps and FACT (FT) databases but with certain restrictions. A bulleted list follows:

- With the 'Calculate Apps' - Reaction, EpH, Predom, Equilib, Phase Diagram - you can only enter up to 3 elements.
- Equilib and Phase Diagram can not be run simultaneously.
- Importing ChemSage files (\*.dat, \*.cst) is not permitted.
- Importing TDB files or translating TDB files into FactSage format is not permitted.
- There is no access to the following Apps due to restrictions on the elements:  
OptiSage, CalphadOPtimizer, Results, Viscosity.
- There is no access to Macro Processing.
- There is no access to ChemApp for Python.
- There is no access to the FactSage Add-ons Menu.
- There is no server or client option - the package must be installed as a single user **standalone installation** in the folder c:\FactSageEdu.
- Your computer must be connected to the Internet. If the program can NOT access [www.factsage.com](http://www.factsage.com) then you can NOT run FactSageEdu.
- When you run FactSageEdu the program accesses [www.factsage.com](http://www.factsage.com) in order to validate the package. One or more text files are downloaded to c:\FactSageEdu. Depending on your settings, it may be necessary for you to give the program permission to download the files.

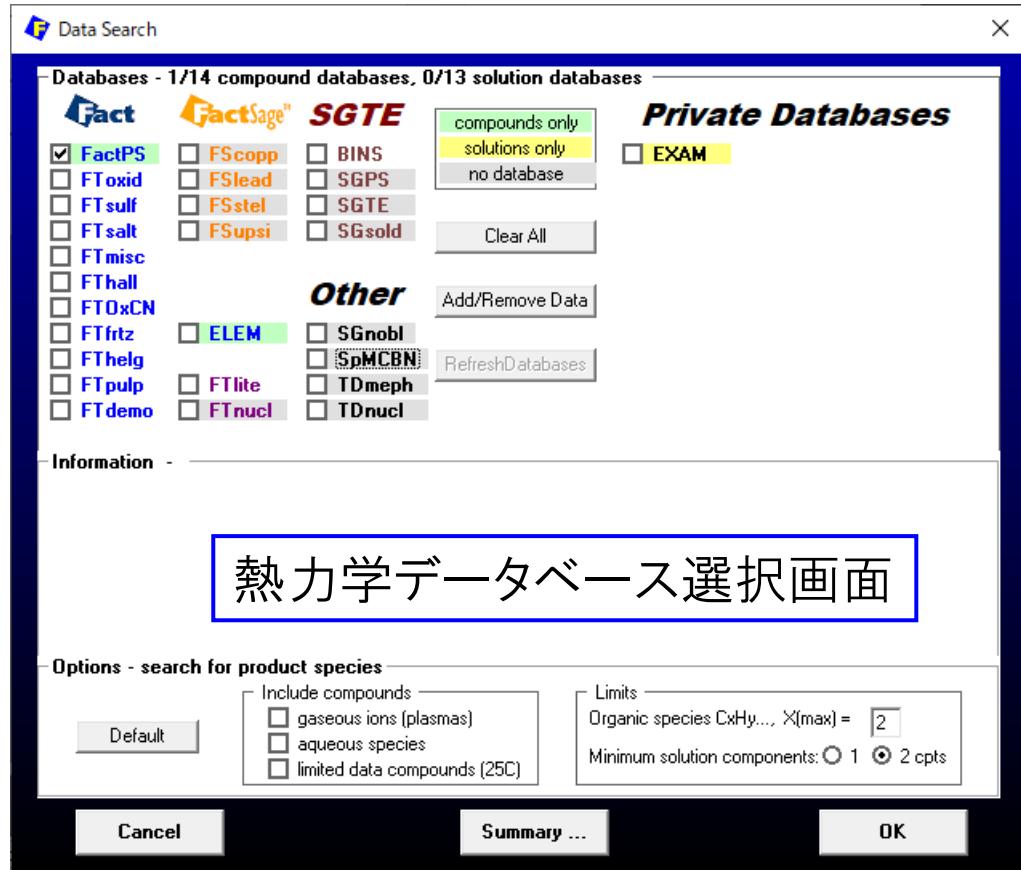
Note: there are no uploads - that is, no files are copied from your computer.

FactSageEdu expires at the end of June 2024. This expiration date (2024-06-30) may be revised.

- Reaction, EpH, Predom, Equilib, Phase Diagram: 最大で 3 元素まで入力できる
- Equilib と Phase Diagram は同時起動不可
- ChemSage ファイルの入出力は不可
- TDB ファイルの変換は不可
- OptiSage, Calphad Optimizer, Results, Viscosity は利用不可
- Macro, アドオン(Add-on) は利用不可
- ChemApp for Python は利用不可
- サーバー版・クライアント版は存在しない
- パソコンは [www.factsage.com](http://www.factsage.com) にアクセスできなければならぬ
- 起動時に、[www.factsage.com](http://www.factsage.com) にアクセスしていくつかのテキストファイルをダウンロードする。ダウンロードができるようにセキュリティの設定が必要な場合がある
- お使いのパソコンからファイルをアップロードすることはない
- 有効期限は 2024 年 6 月 30 日である。新バージョンがリリースされない場合は延長される見込み（新しいバージョンがリリースされた場合はそちらを使ってほしい）。

# FactSage Education の熱力学データベース

## 付属する熱力学データベースの一覧



名前	利用用途
FactPS	化合物、希薄水溶液、プラズマ
FTtoxic	酸化物(スラグ、ガラス、耐火物)
FTsulf	硫化物
FTsalt	塩
FTmisc	溶鋼(主成分が鉄、鉛など)、水溶液
FThall	ホールエル一法の解析
FTOxCN	高温の酸・炭・窒化物(セラミックスなど)
FTfrtz	化学肥料
FThelg	希薄水溶液
FTpulp	パルプ製造工程で排出される黒液の解析
FTlite	アルミニウム合金・マグネシウム合金
FTdemo	デモ用。ヘルプの例題で使用
BINS	二元系合金

---

## 2. ダウンロードとインストール

# ダウンロードとインストール

1. <https://www.factsage.com> にアクセス ⇒  
FREE FACTSAGE DEMO & EDUCATION VERSION をクリック

The screenshot shows a web browser window with the URL <https://www.factsage.com> in the address bar. The main content area displays the FactSage website, featuring a sidebar with various links and a central panel showing the FactSage 8.3 software interface. The sidebar includes a link labeled "FREE FACTSAGE DEMO & EDUCATION VERSION". The central panel shows the software's main menu with sections like Info, Calculate, and Manipulate, along with a phase diagram and thermodynamic modeling information.

# ダウンロードとインストール

2. ダウンロードとインストール方法が説明されている画面を表示

The screenshot shows a Microsoft Edge browser window with the following details:

- Title Bar:** FactSage Demonstration Version - 個人 - Microsoft Edge
- Address Bar:** https://www.factsage.com/FSEdu\_news.htm
- Page Content:**
  - Section Headers:** Free FactSage 8.3 Demonstration Version, FactSage Education 8.3 - FactSageEdu, ~ News ~
  - Text:** (Revised 2023-10-18)  
- refresh/reload the page to display the latest news
  - Description:** FactSage is a fully integrated database computing system in chemical thermodynamics and consists of a variety of information, database, calculation and manipulation modules that access various pure substances and solution databases. It is installed at hundreds of industrial, governmental and academic sites around the world.
  - Text:** FactSage is employed in materials science, pyrometallurgy, hydrometallurgy, electrometallurgy, corrosion, glass technology, combustion, ceramics, geology, etc. It is used internationally in graduate and undergraduate teaching and research. For details on the latest version FactSage 8.3 visit [www.FactSage.com](http://www.FactSage.com)
  - Description:** The FactSage Education 8.3 Package - FactSageEdu presented here is the Free FactSage 8.3 Demonstration Version. It is a demonstration package for those interested in finding out more about FactSage 8.3. It is ideally suited for teaching thermochemistry in universities.
  - Text:** FactSage Education 8.3 has been released. It replaces FactSage Education 8.2 (July 2022). In order to update FactSage Education 8.2 to FactSage Education 8.3 you must download and install the FactSage Education 8.3 Package.
  - Text:** For information on the package and details on how to download and install FactSage Education 8.3 on your computer visit [FactSage Education Package](#)
- Bottom Navigation:** FactSage Education 8.3 Report

有効期限を延長する方法、不具合の情報等が記載される

# ダウンロードとインストール

3. ダウンロードするには  
メールアドレスを開発元  
へ連絡する必要がある。  
クリックして申し込み画  
面を表示

FactSageEdu Information - 個人 - Microsoft Edge  
[https://www.factsage.com/FactSageEdu\\_Info.htm#246](https://www.factsage.com/FactSageEdu_Info.htm#246)

How to install FactSage Education 8.3 on your computer

In order to install FactSage Education 8.3 on your computer you must perform 3 tasks:

- [1. Download FactSage Education 8.3 Package](#)  
- download and save the file CD-FactSageEdu83.exe (approx. size 425 MB)
- [2. Extract the setup files](#)  
- run CD-FactSageEdu83.exe and extract the setup files
- [3. Install FactSage Education 8.3](#)  
- run Setup-FactSageEdu.exe and install the program in C:\FactSageEdu

[1. Download FactSage Education 8.3 Package](#)

Click on [Download FactSage Education 8.3 Package](#).

Enter your

- email address
- name (optional)
- affiliation (optional).

Click **Submit one time only** and wait for the message:

Thank you. An email will be sent to ...

We will then email you details on how to download the file CD-FactSageEdu83.exe.

If you do not receive an email from us it means you have entered an invalid email address or your mail server is blocking the email.

After downloading CD-FactSageEdu83.exe you are ready to extract the setup files.



FactSage®  
Download  
FactSage Education  
Package

e-mail address:

name (optional):

affiliation (optional):

Enter your email address.  
You are invited to include your name and affiliation.

We will then email you details on how to download and install the FactSage Education Package.

Privacy policy:  
Your email address will remain private - it will only be used for communications regarding FactSage.

Submit

Thank you. An email will be sent to john.smith@myworld.com with instructions on how to download and install FactSage Education Package.

# ダウンロードとインストール

FactSage™  
Download  
FactSage Education  
Package

e-mail address:	office@rccm.co.jp
name (optional):	Daigen Fukayama
affiliation (optional):	Research Center of Computational Mechanics, Inc.

Enter your email address.  
You are invited to include your name and affiliation.  
We will then email you details on how to download and install the FactSage Education Package.

Privacy policy:  
Your email address will remain private - it will only be used for communications regarding FactSage.

Submit

Modified : April 17, 2024

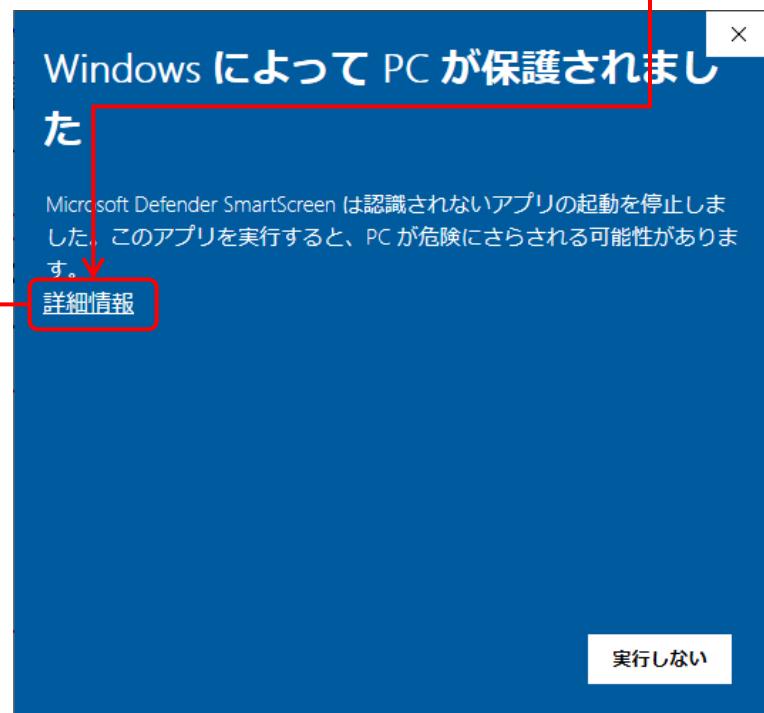
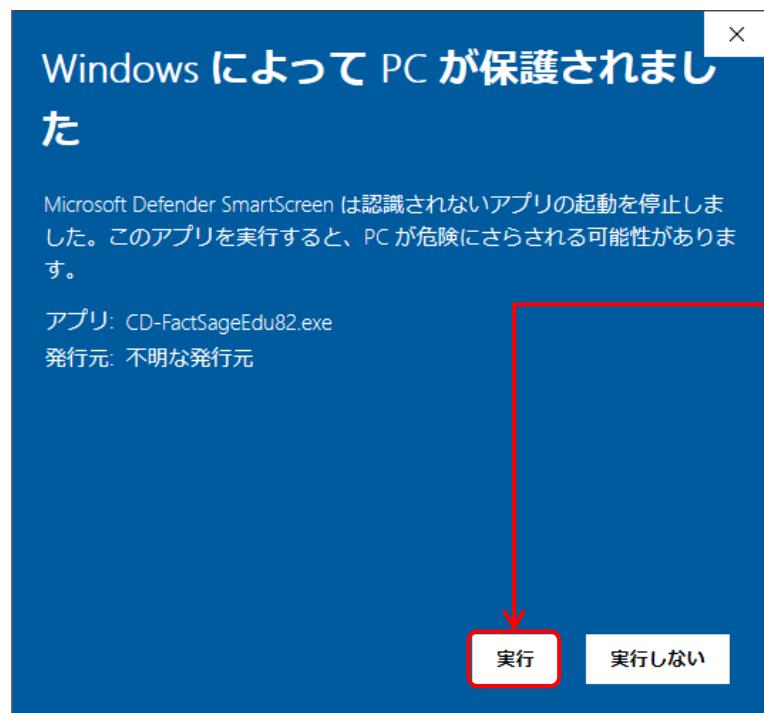
4. Privacy policy を確認してメールアドレスを入力。名前と所属も入力していただけないと開発者の励みになるだろう

5. Submit ボタンをクリックして情報を送信

# ダウンロードとインストール

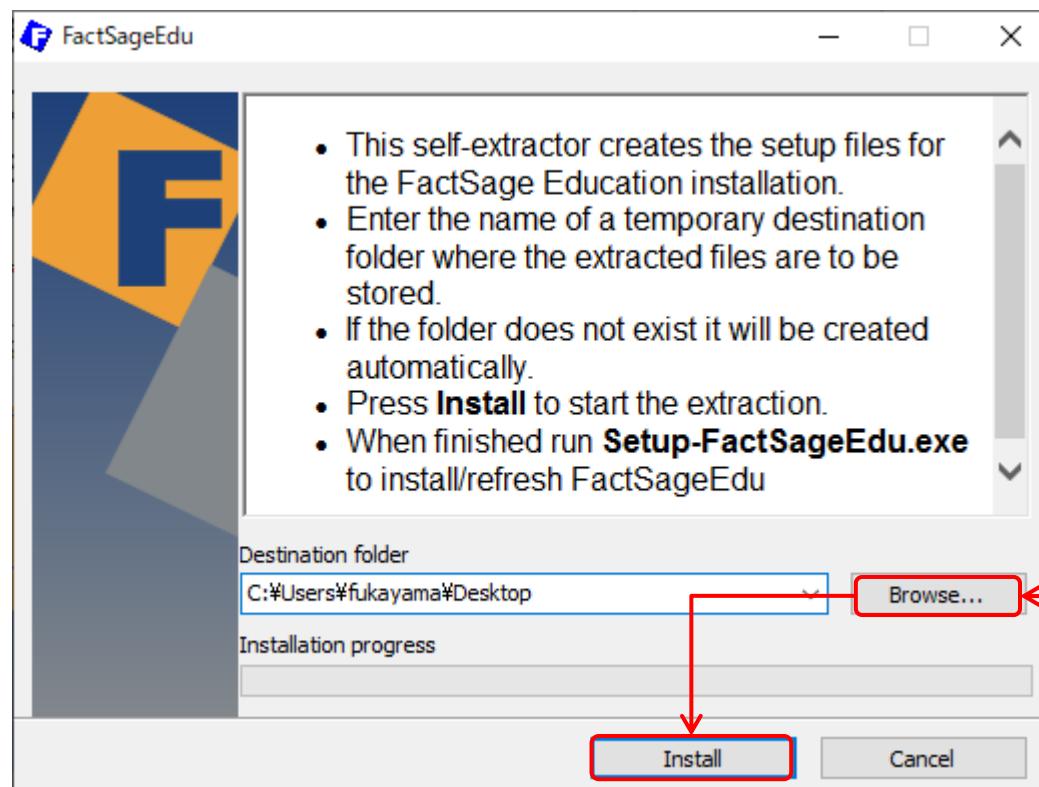
6. 開発元から英文メールが届く。メールに記載されているダウンロードリンクをクリックするとダウンロードがはじまる。はじまらない場合は弊社にご連絡ください。ファイル名は CD-FactSageEdu83.exe であり、ファイルサイズは 414 MB 程度である

7. ダウンロードした CD-FactSageEdu83.exe をダブルクリック等で起動すると、Windows かまたはお使いのセキュリティソフトから警告されることがあるが、信頼して実行する



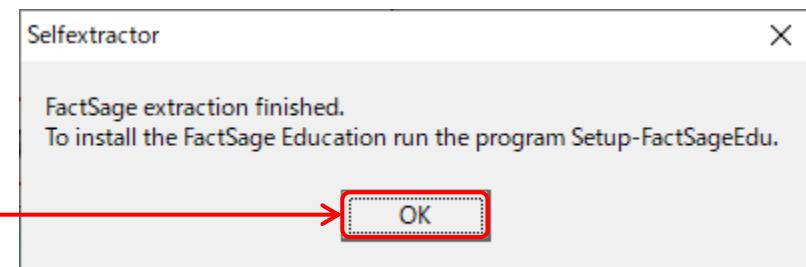
# ダウンロードとインストール

8. CD-FactSageEdu83.exe はインストールに必要なファイルがまとめられているファイルであり、最初に展開する必要がある。展開先のフォルダー（デスクトップでよい）を入力して Install ボタンをクリック。インストール作業終了後、デスクトップに展開されたフォルダーは削除してよい

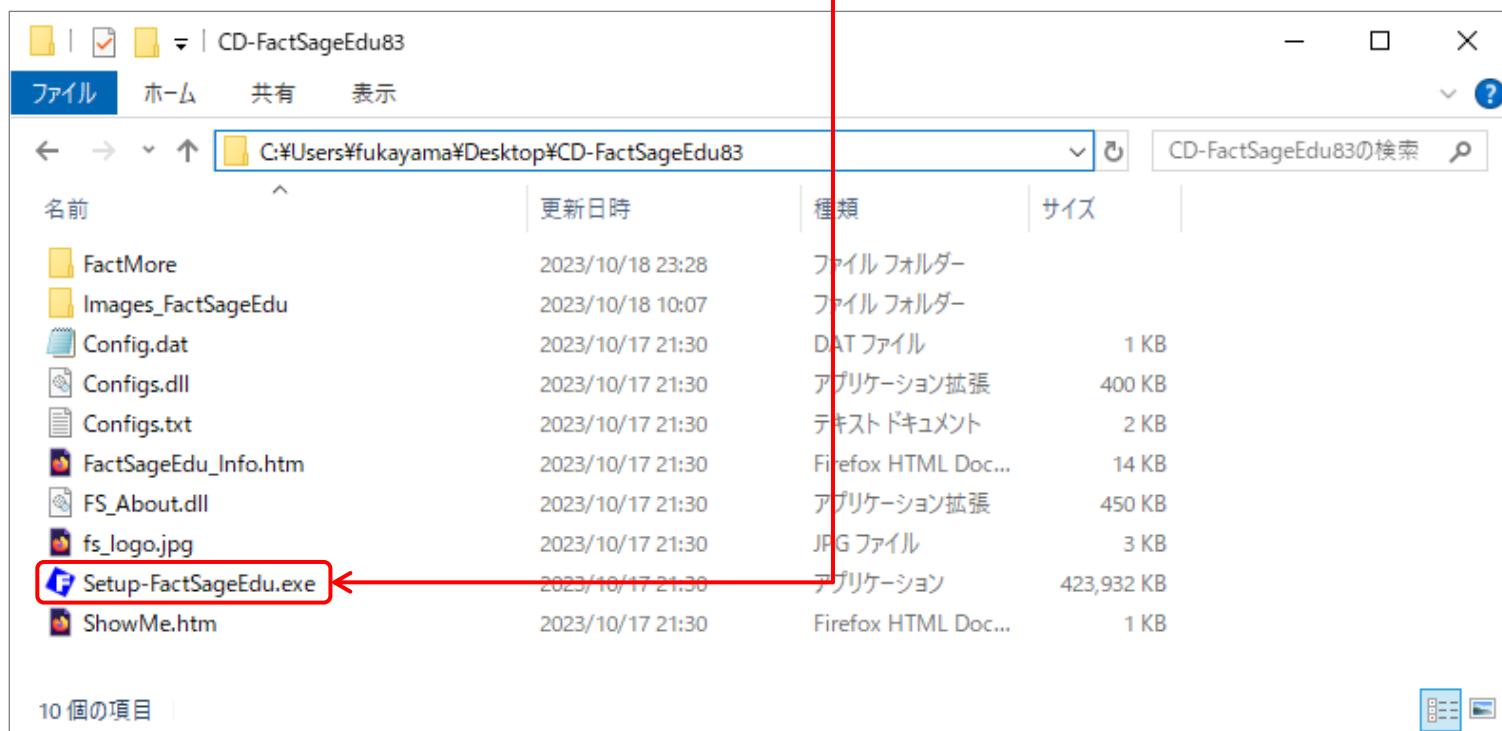


# ダウンロードとインストール

## 9. 展開終了のメッセージ。OK をクリック

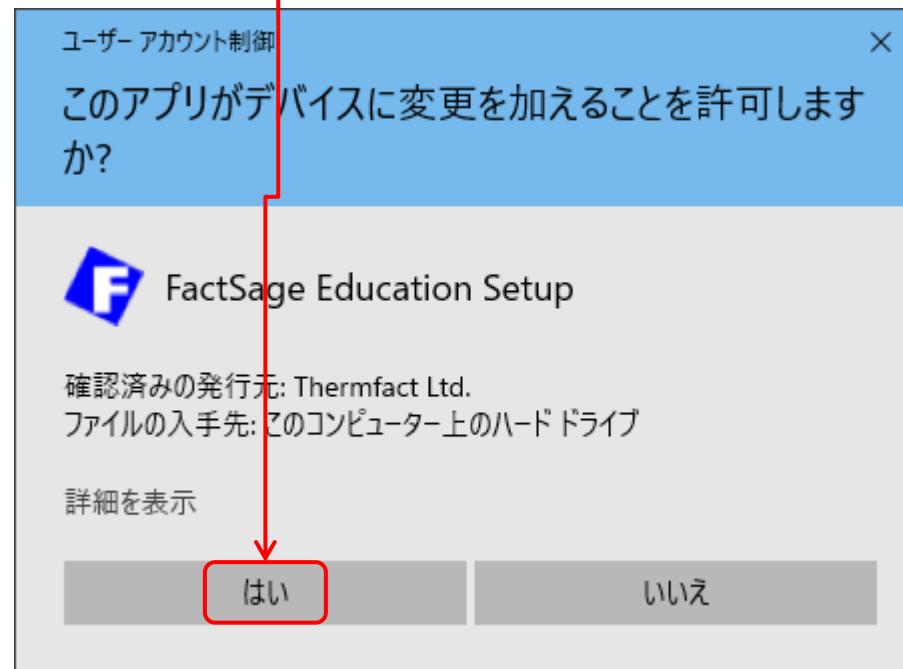


## 10. 展開して現れたフォルダーを開いて Setup-FactSageEdu.exe を起動

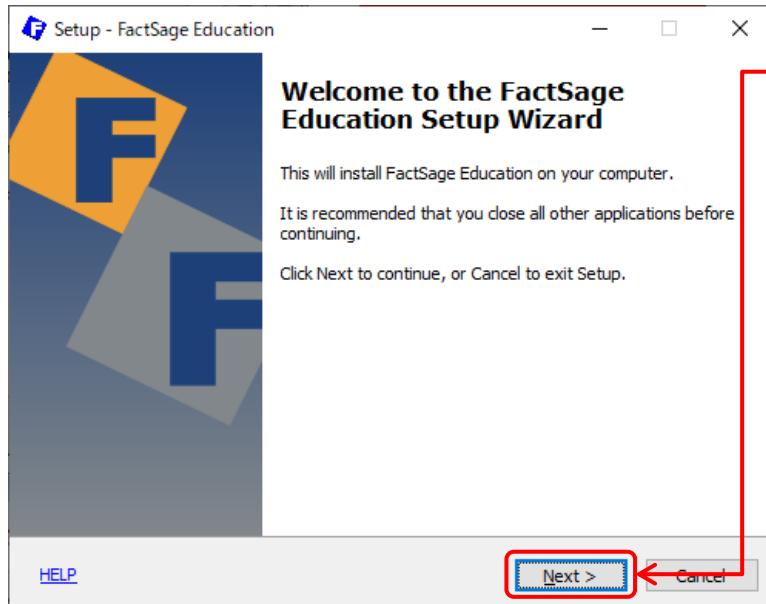


# ダウンロードとインストール

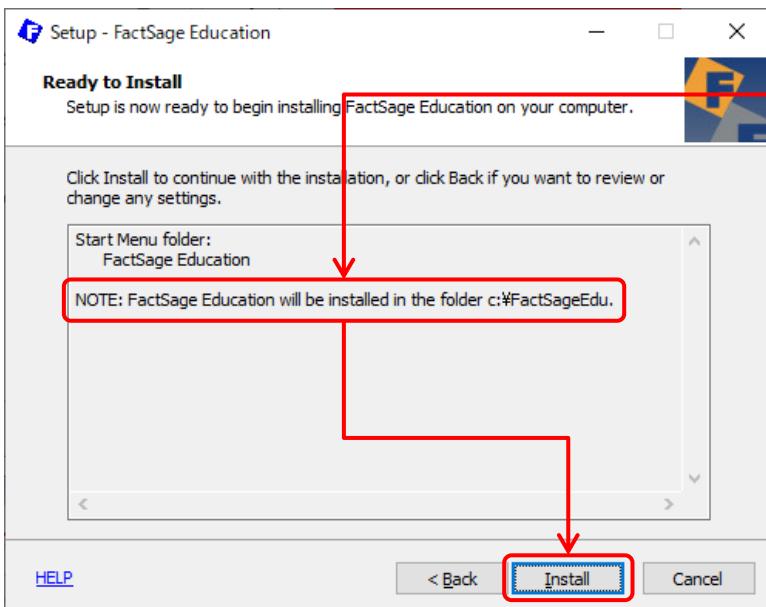
## 11. ユーザーアカウント制御の画面が表示された場合、許可する



# ダウンロードとインストール

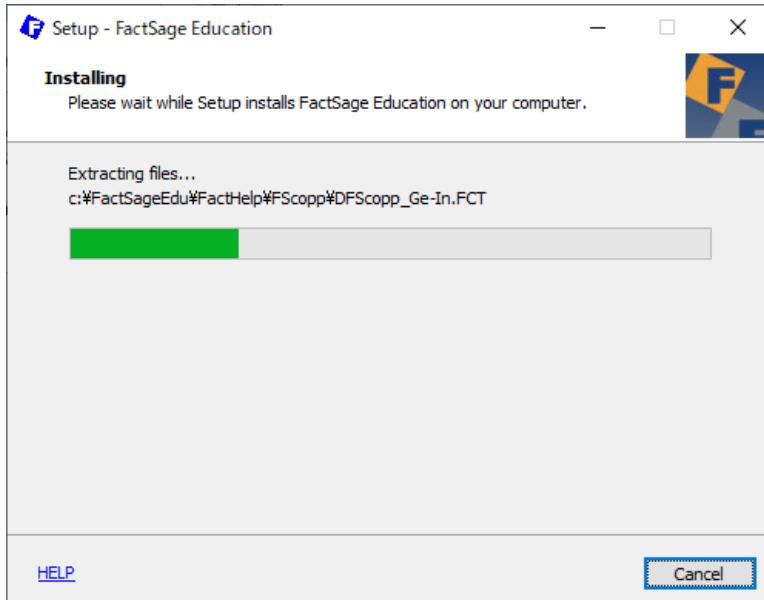


12. Next をクリック

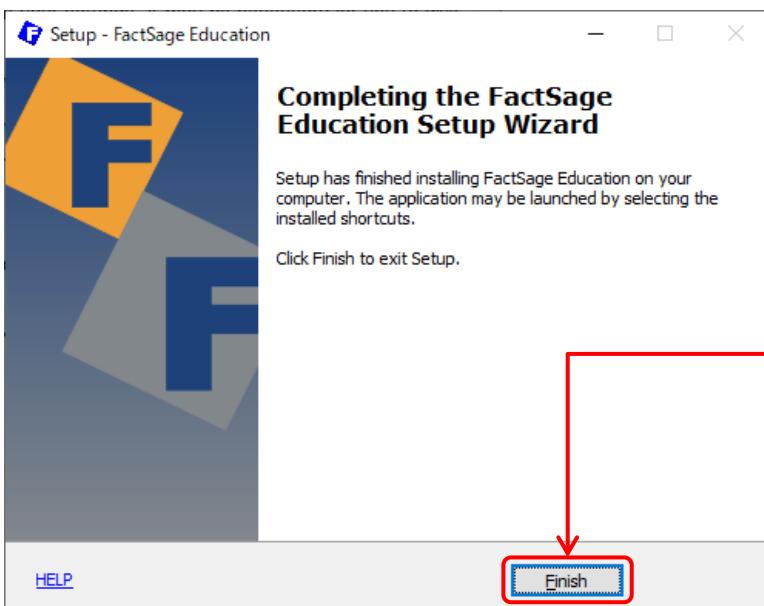


13. インストール先(c:\FactSageEdu)を確認して Install をクリック

# ダウンロードとインストール



インストール中の画面。インストール終了まで待つ。(PCの性能にもよるが数分程度)



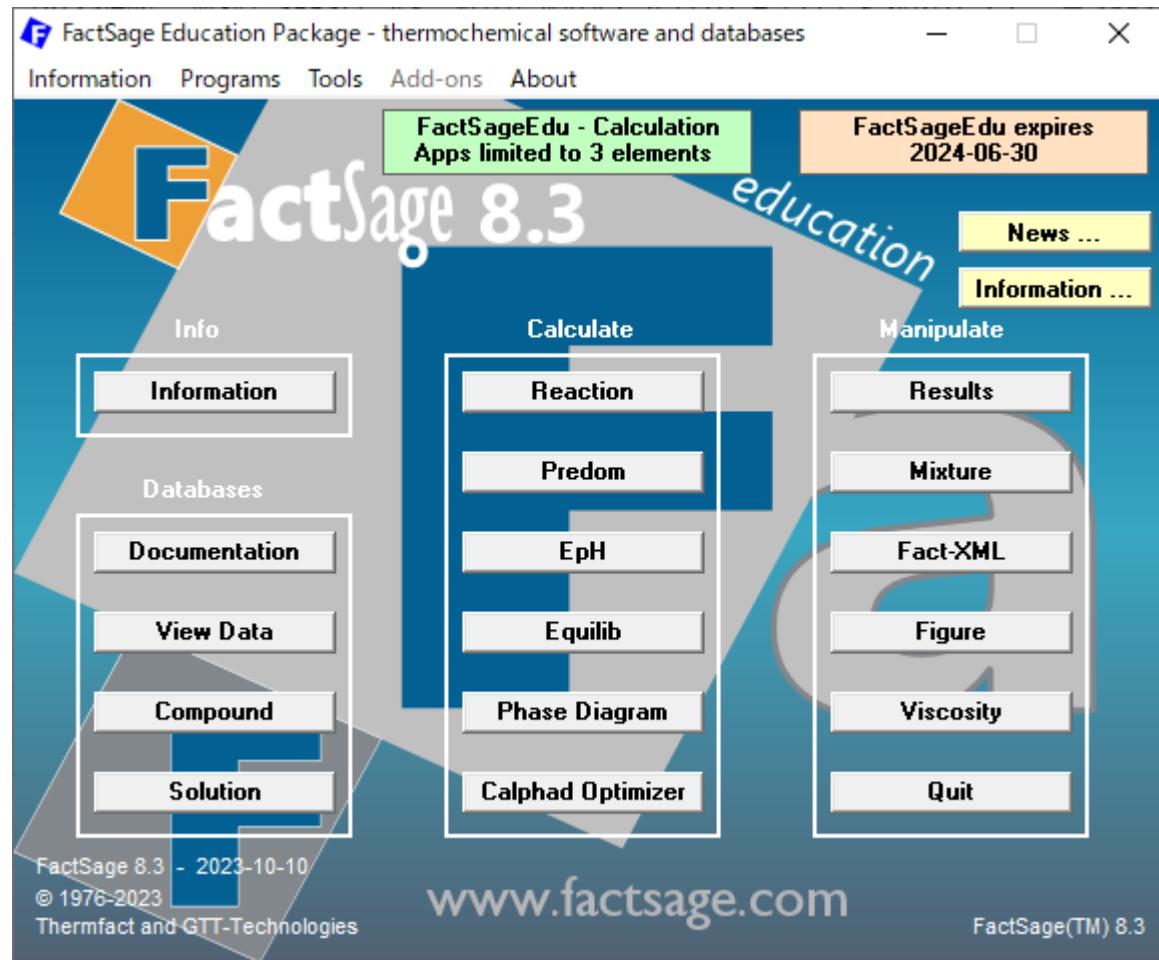
14. Finish をクリック

# ダウンロードとインストール

15. デスクトップにショートカットが表示されるので、ダブルクリックして起動



青い画面が表示されれば成功。  
Equilib で H<sub>2</sub>O の平衡計算をしてみてください

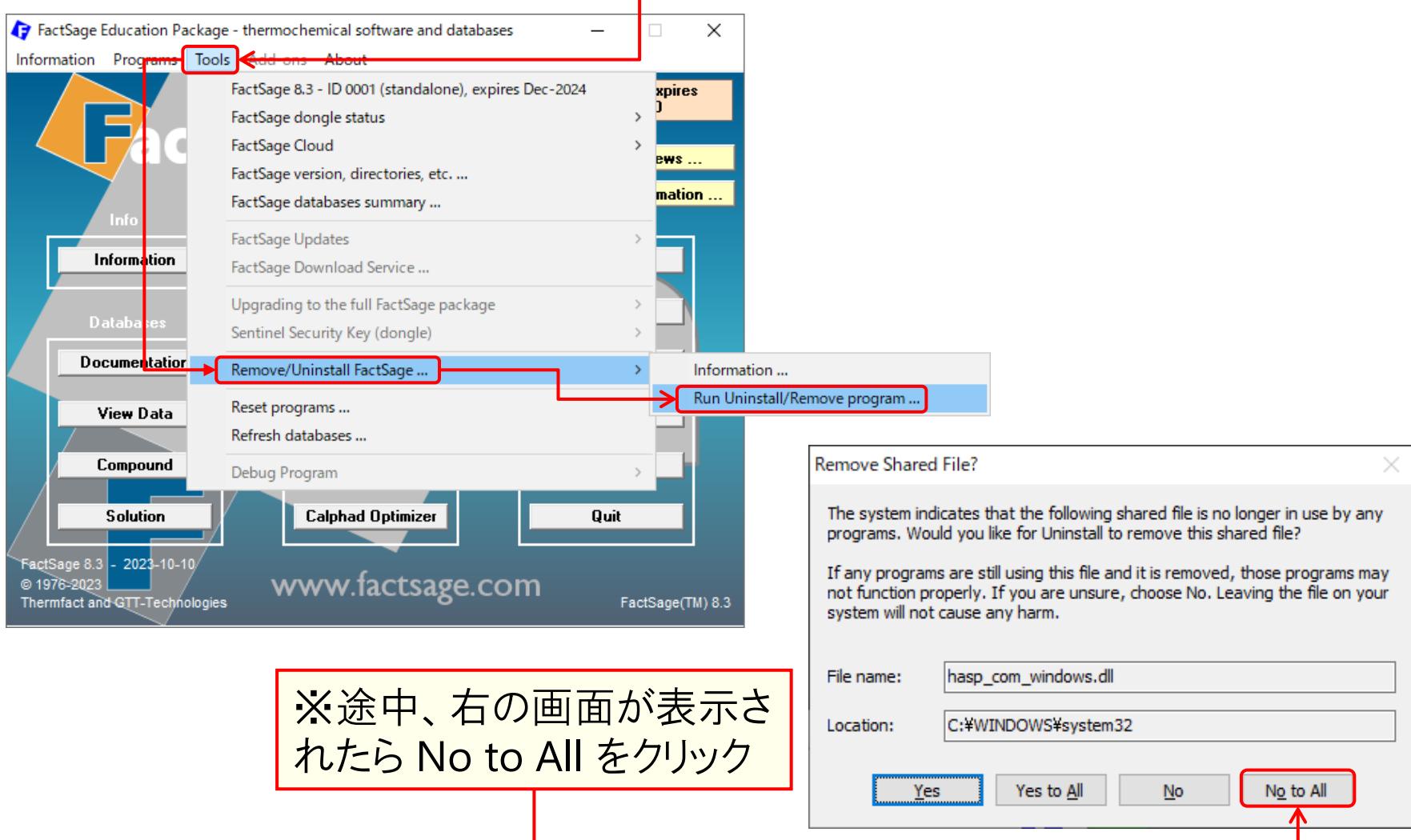


---

### 3. アンインストール

# アンインストール

■ アンインストールは Tools ⇒ Remove/Uninstall FactSage ... ⇒ Run Uninstall/Remove program ... をクリックして画面の指示にしたがう



---

## 4. 熱力学平衡計算 (Equilib)

# Equilib

Equilib は系の平衡状態を予測するときに使うアプリ(モジュール)である。

Equilib は平衡状態で存在する可能性のある物質の中から「平衡状態で存在する物質とその量」をギブズエネルギー最小化法により求める。

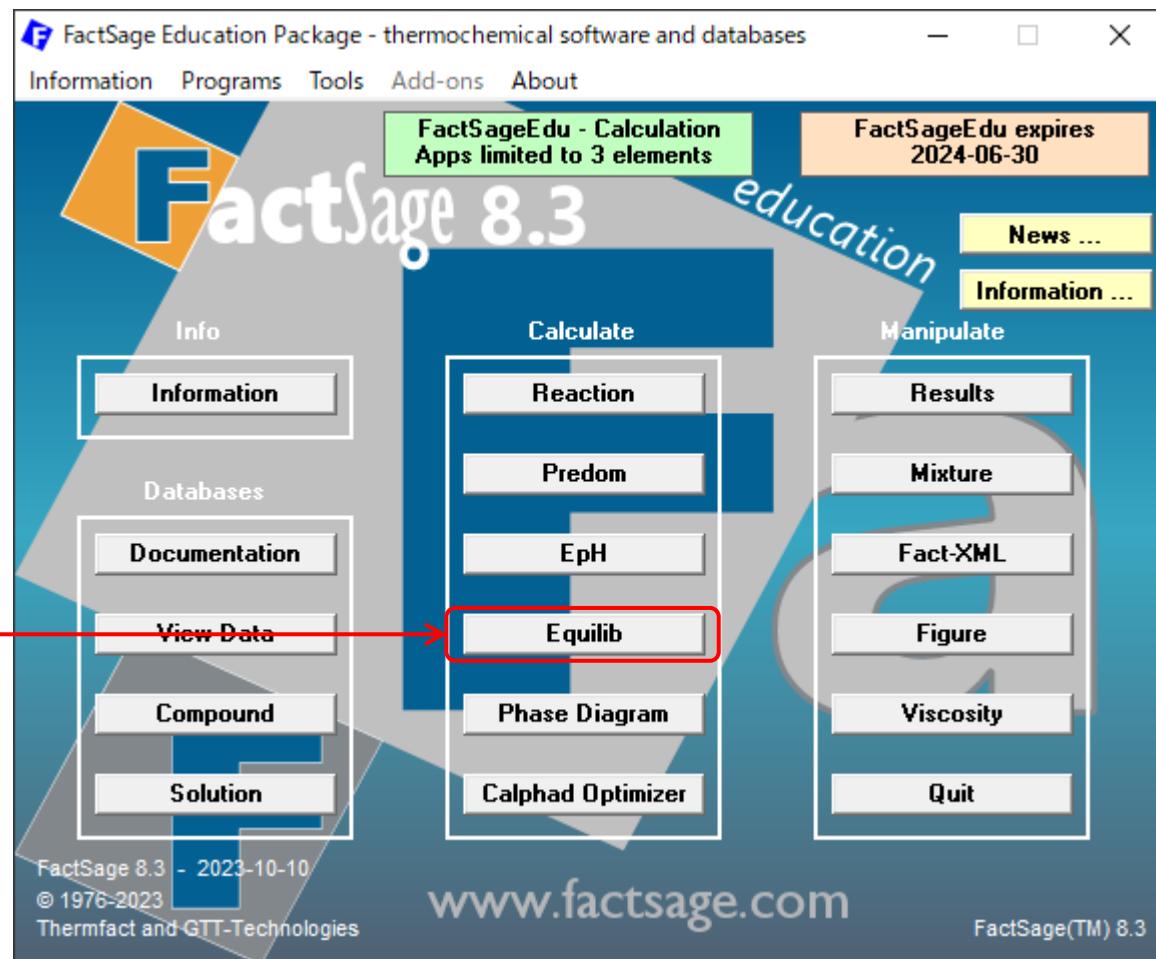
そのため Equilib の計算設定では「**平衡状態で存在する可能性のある物質**」を熱力学データベースに収録されている物質から適切に選択する必要がある。

熱力学データベースに収録されている物質の数は、世界中の研究者が長年努力してきたにも関わらず数千種類に限られている。熱力学データが無いなどの理由で平衡状態で存在する物質を選択していない設定で計算すれば、当然ながら期待外れの予測結果になる。

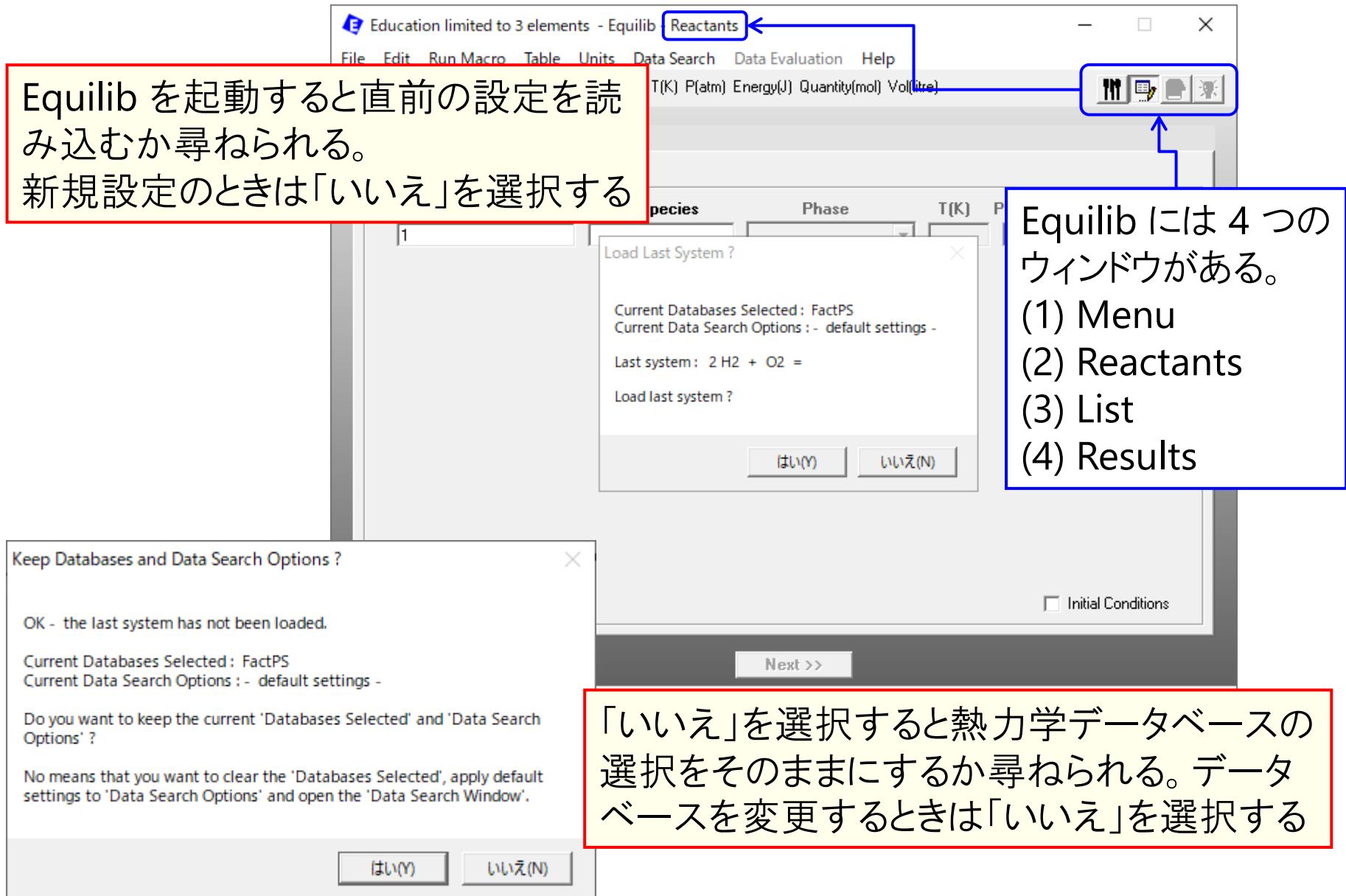
熱力学データベースは複数に分割されて提供されている。一つの純物質データベースのみを使って計算する場合については物質の選択を気にすることはないだろう。しかし複数の熱力学データベースを組み合わせて解析を行う場合は難しくなる。Database Documentation をよく読み、熱力学データベースに詳しくなろう。

# Equilib の起動

- 平衡状態の予測(熱力学平衡計算)
- 純物質データベースと溶体データベースを使用

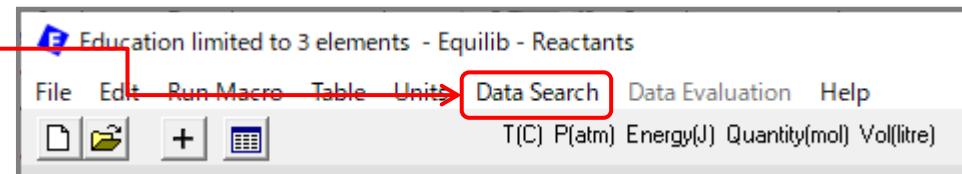


# Equilib の起動

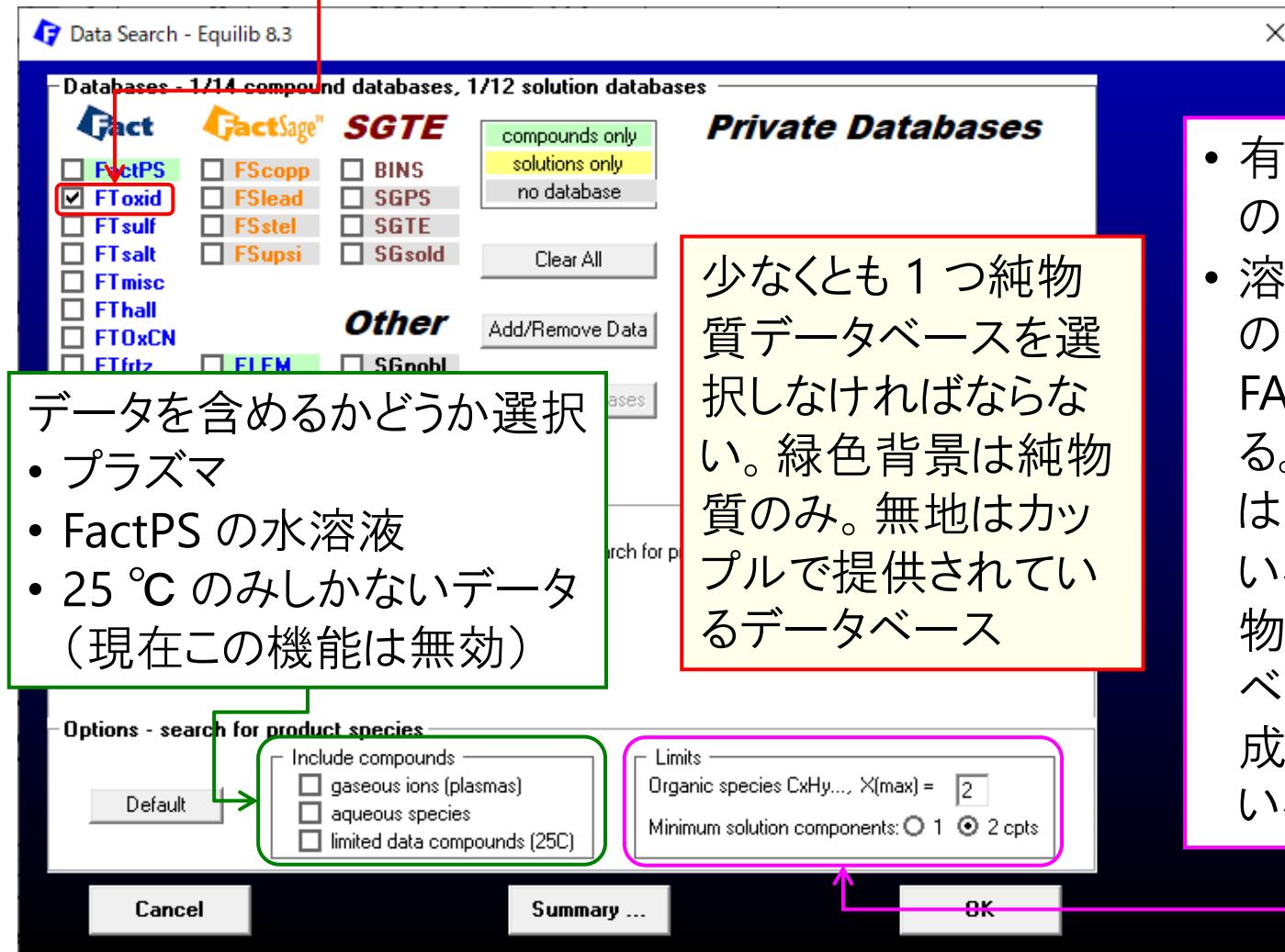


# 熱力学データベースの選択

Data Search をクリック



使用するデータベースを選択



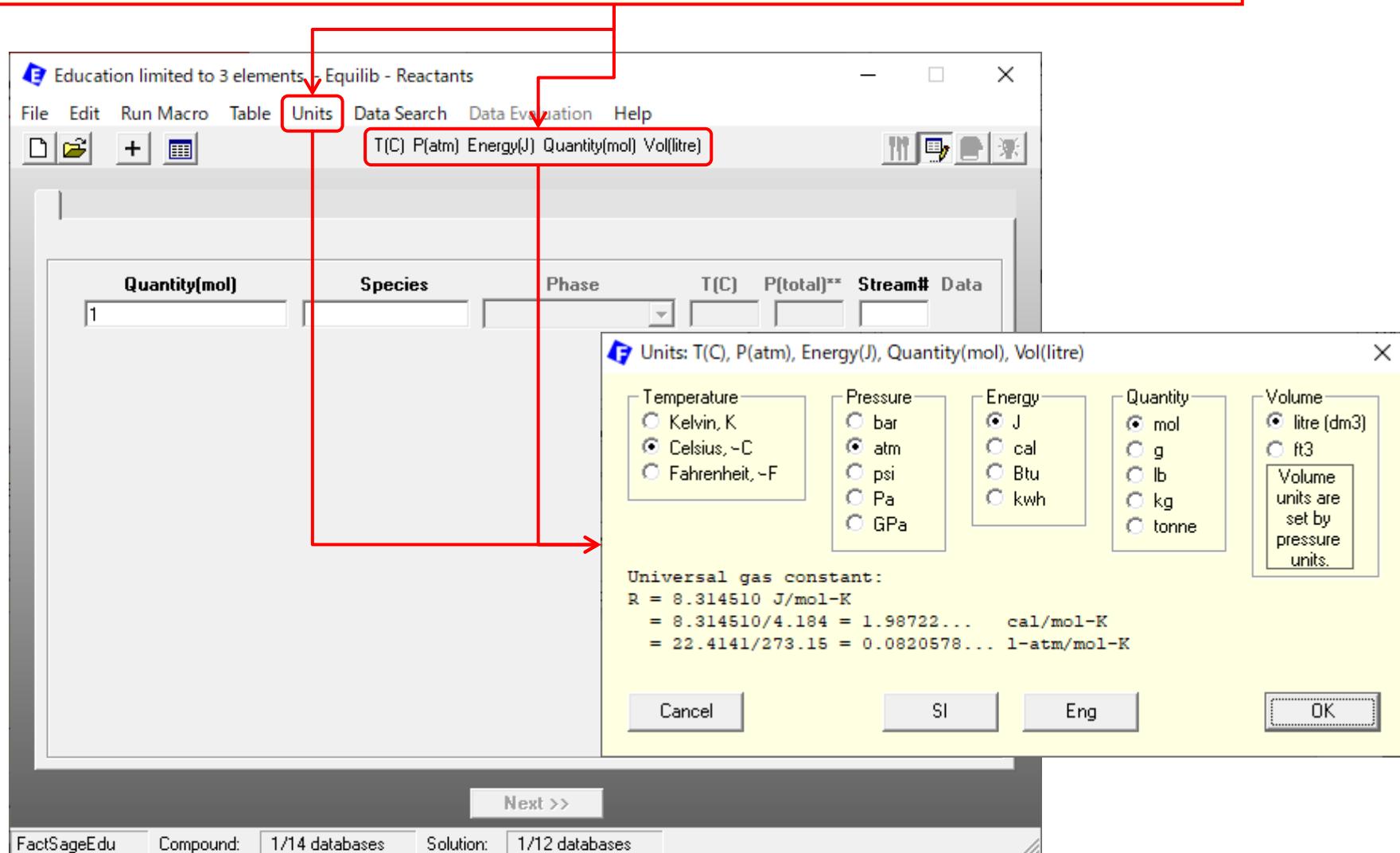
データを含めるかどうか選択

- プラズマ
- FactPS の水溶液
- 25 °C のみしかないデータ (現在この機能は無効)

- 有機化合物 CxHy... の X の上限
  - 溶体相の最小成分の数
- FACT 溶体は 2 とする。SGTE, TDnucl は 1 が推奨されている。金属間化合物が純物質データベースになく溶体の成分として扱われている場合は 1 とする

# 単位の設定

Units または T(C) P(atm) ... Vol(litre) をクリックして、Units 画面で設定



# $\text{H}_2\text{O}$ の平衡計算

$\text{H}_2\text{O}$  の平衡状態を解析する。Equilib の基本操作を学ぶ。

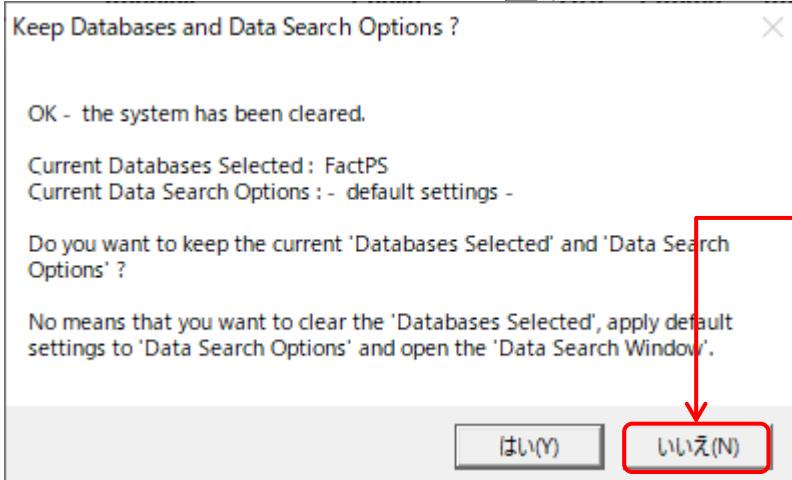
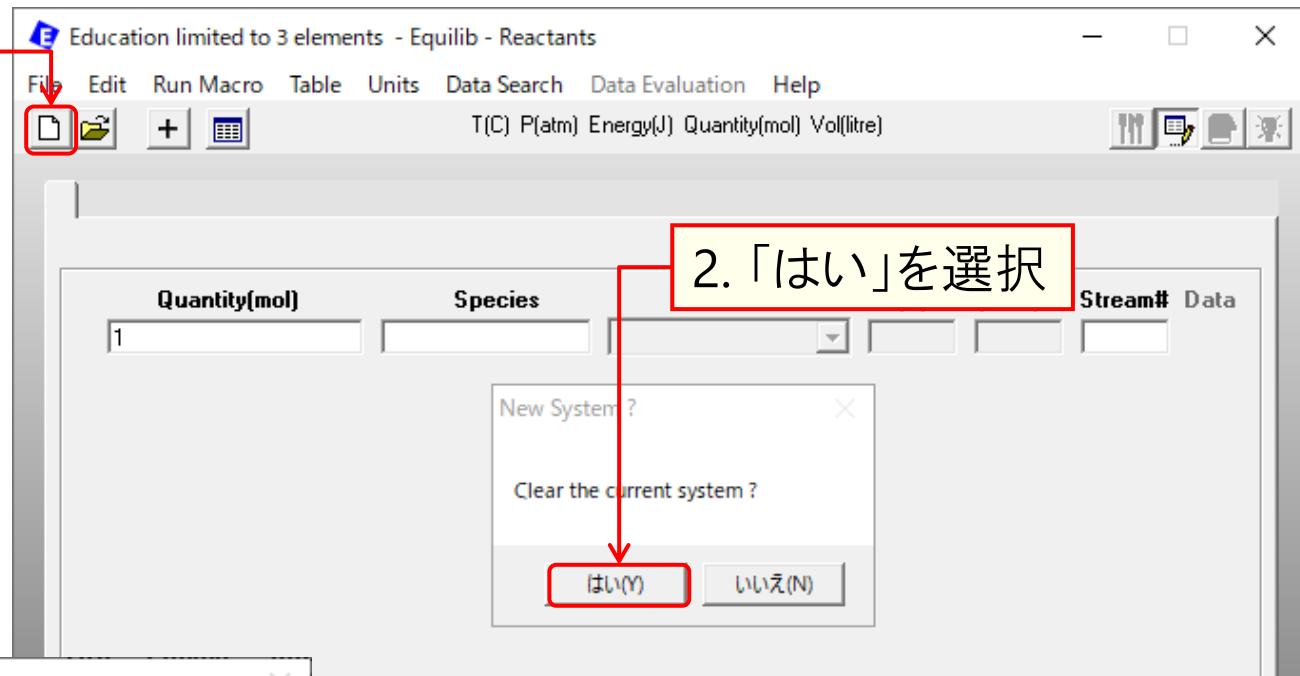
## ▼ 操作の流れ

- (1) データベースの選択(純物質なので FactPS のみ)
- (2) 単位の設定、物質の入力
- (3) 温度、圧力の入力
- (4) 平衡状態で存在する可能性のある物質を選択
- (5) 平衡計算を実行
- (6) グラフを作成する(別の例題で紹介)
- (7) Excel に出力する(別の例題で紹介)

# $H_2O$ の平衡計算

■ 最初に  $H_2O$  の平衡計算を練習して、Equilib の基本的な操作を学ぼう

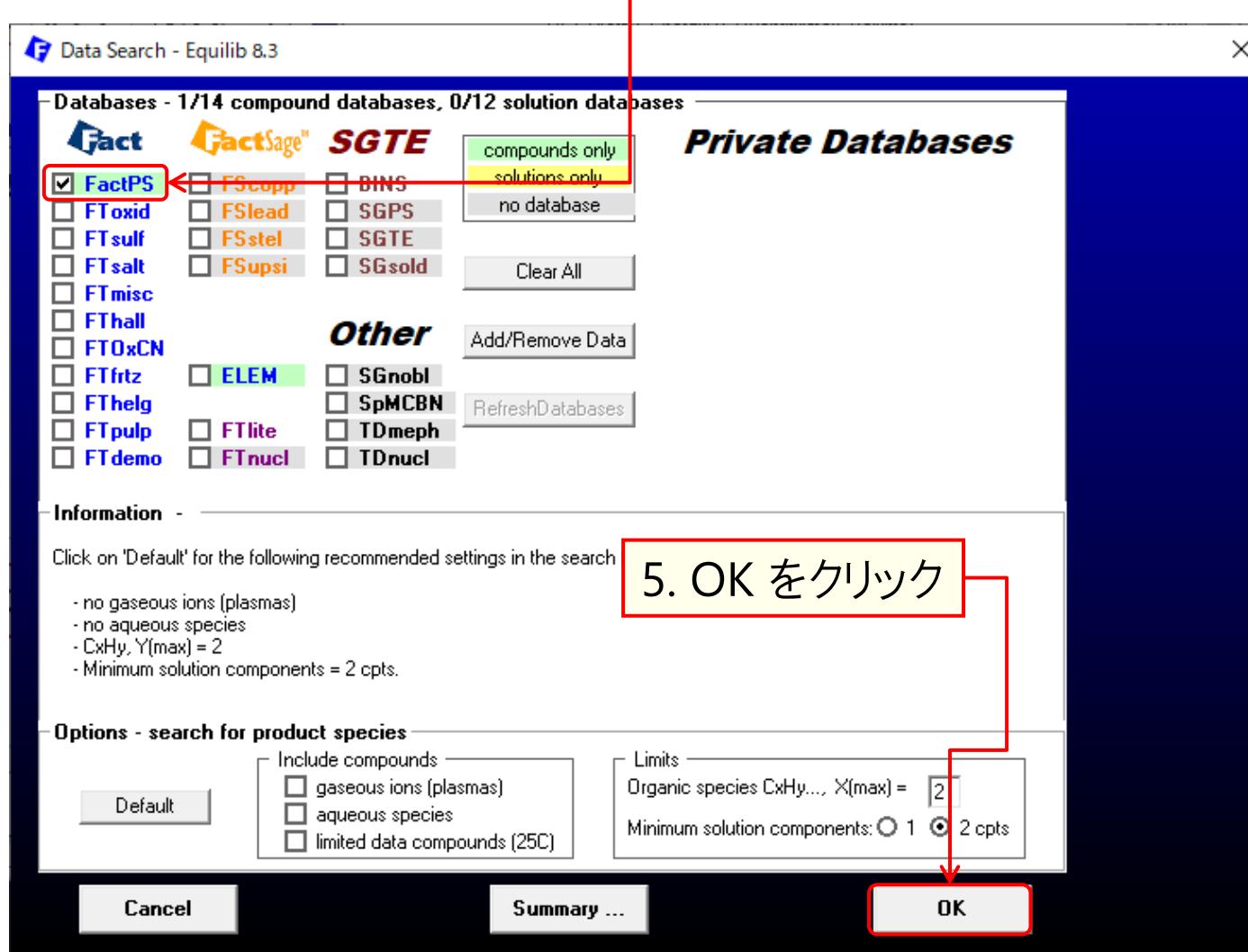
1. 新規設定



3. 热力学データベースを新規に設定するので「いいえ」を選択

# H<sub>2</sub>O の平衡計算

4. 平衡状態で混合気体、純物質の液相と固相が安定であると予想できる場合は、純物質データベースを使って計算する。FactPSを選択する



# $H_2O$ の平衡計算

7. 反応容器に投入する物質を入力

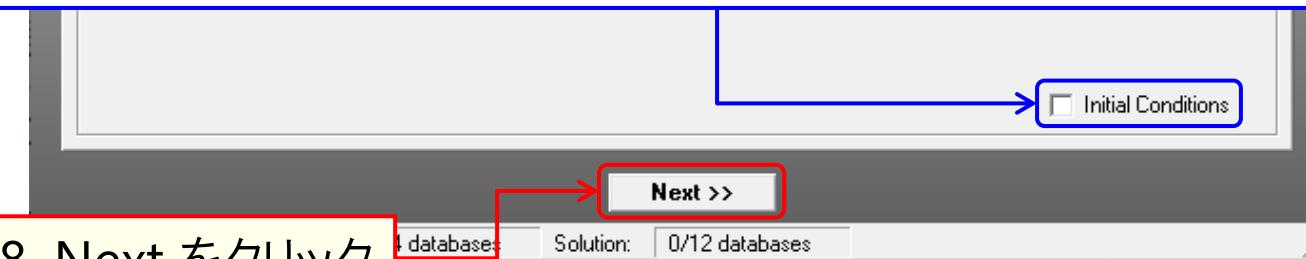
6. 単位の設定

ストリームは同じ温度・圧力の物質の集まり。初期条件を設定しない場合、番号は 1 でよい



初期条件の設定。平衡状態は初期条件によらない(例、初期条件が氷でも気体でも 25 °C、1 atm における平衡状態は水)ので、平衡状態を求める目的ではチェックしない。反応前後の熱力学量の変化を計算するときはチェックして相(Phase)や温度(T(C))を入力する。初期条件を設定しない場合、結果に影響があるのは元素の量のみ。H<sub>2</sub>O の代わりに H<sub>2</sub> + 0.5 O<sub>2</sub> と入力しても同じ結果になる

8. Next をクリック



# $\text{H}_2\text{O}$ の平衡計算

10. 平衡状態で存在する可能性のある物質を選択。氷は存在しないと予想して液相と気相を選択する。気相は ideal (理想気体) と real (実在気体のモデル) のどちらかを選択する。real のデータは一部の物質のみ利用できる。 $25^\circ\text{C}, 1 \text{ atm}$  では理想気体の仮定は悪くないので ideal を使用する。real を選択してもよい

The screenshot shows the FactPS software interface. On the left, under 'Compound species', 'gas' is selected. A red box highlights the 'gas' radio button and the 'ideal' radio button. Below it, 'aqueous', 'pure liquids', and 'pure solids' are listed with counts 9, 0, and 2 respectively. On the right, the 'Solution phases' window shows 'Base-Phase' and 'Full Name'. A red box highlights the 'Show' checkbox in the legend, which is checked. Below it, 'species: 0' and 'solutions: 0' are shown. At the bottom, 'Final Conditions' and 'Equilibrium' sections are visible. A red box highlights the 'T(C)' input field containing '25 150' and the 'Product H(J)' dropdown menu. An arrow points from the 'T(C)' field to the '2 calculations' button.

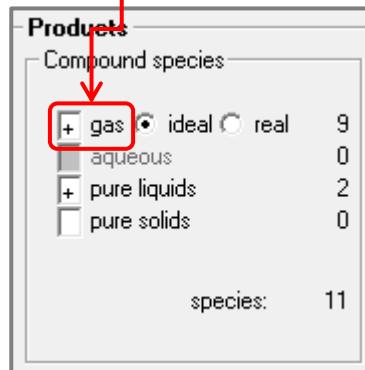
9. 温度が  $25^\circ\text{C}$  と  $150^\circ\text{C}$  の場合を一度に計算。圧力は 1 atm に設定。平衡状態におけるエンタルピー (Product H(J)) は計算して求めたいので空白

Menu Window  
(メニュー画面)

データがあればモル  
体積を考慮(高圧で  
重要)・物性値の推算

# $\text{H}_2\text{O}$ の平衡計算

gas を右クリック



H<sub>2</sub>O(g) のみを考慮する場合

Selection - Equilib - no results -

File Edit Show Sort

Selected: 1/9 GAS

+	Code	Species	Data	Phase	T	V	Activity	Minimum	Maximum
1	H(g)	FactPS	gas						
2	H2(g)	FactPS	gas						
3	O(g)	FactPS	gas						
4	O2(g)	FactPS	gas						
5	O3(g)	FactPS	gas						
6	OH(g)	FactPS	gas						
7	H2O(g)	FactPS	Steam						
8	HOO(g)	FactPS	gas						
9	HOOH(g)	FactPS	gas						

permit selection of 'X' species Help Suppress Duplicates Edit priority list:

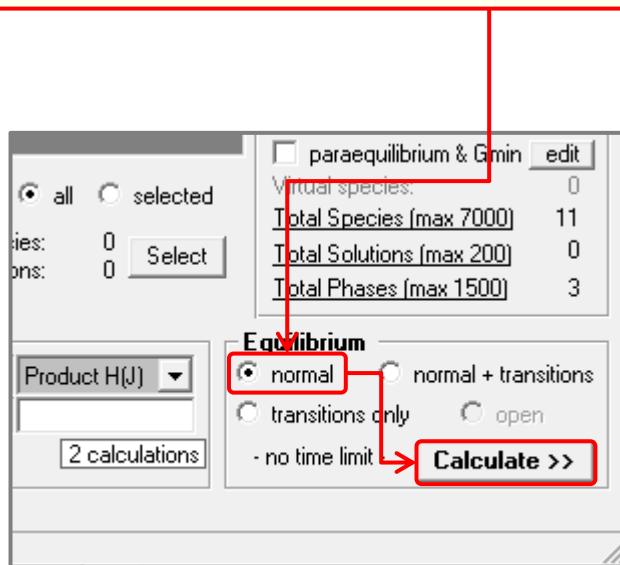
Show Selected Select All Select/Clear... Clear OK

平衡計算に考慮しない物質を設定する場合の例

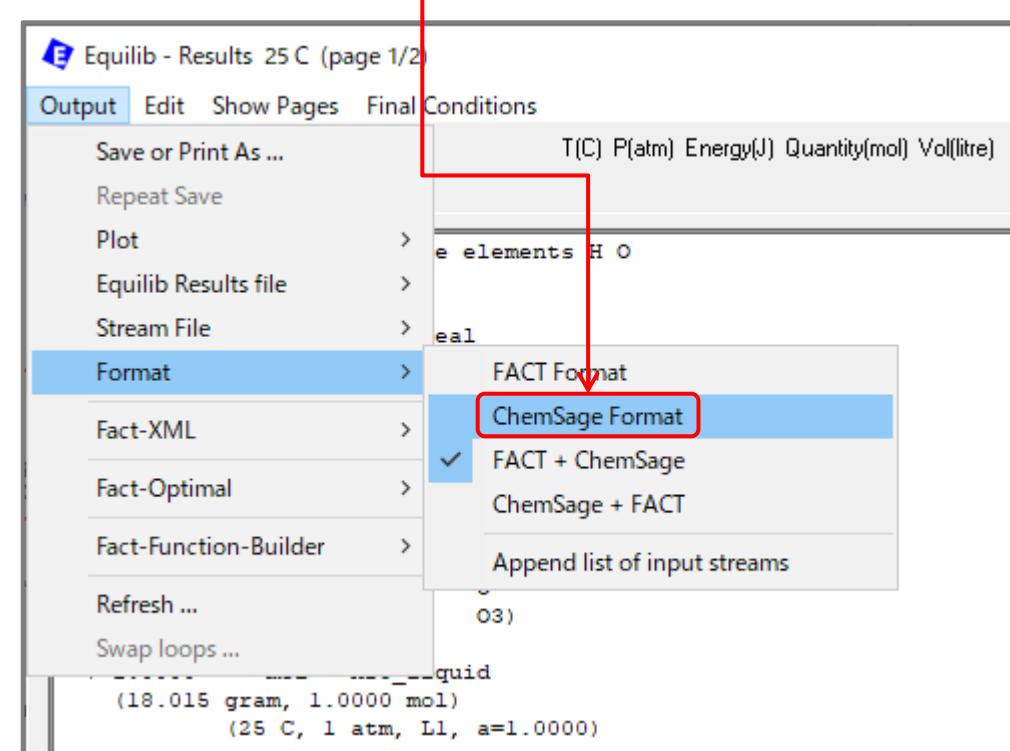
- 準安定相の挙動を調べる場合。Fe-C 系では、安定になるまで長時間必要な C(s) を外して、準安定相の Fe<sub>3</sub>C(s) の挙動を調べることがある。
- 有効温度範囲外の温度で計算する場合(気体の成分は間引かないことが多い)
- 選択した化学種の数が Equilib で扱える限界の数(7000)を超える場合。
- 特定の物質(例、混合気体)のギブズエネルギーを求めたい場合。特定の物質のみ選択する

# $\text{H}_2\text{O}$ の平衡計算

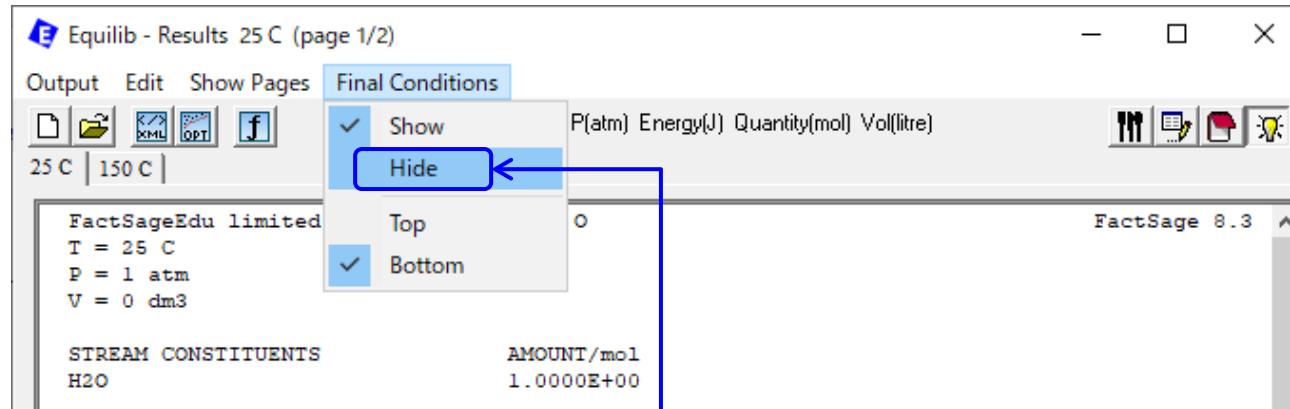
11. normal を選択して Calculate をクリック



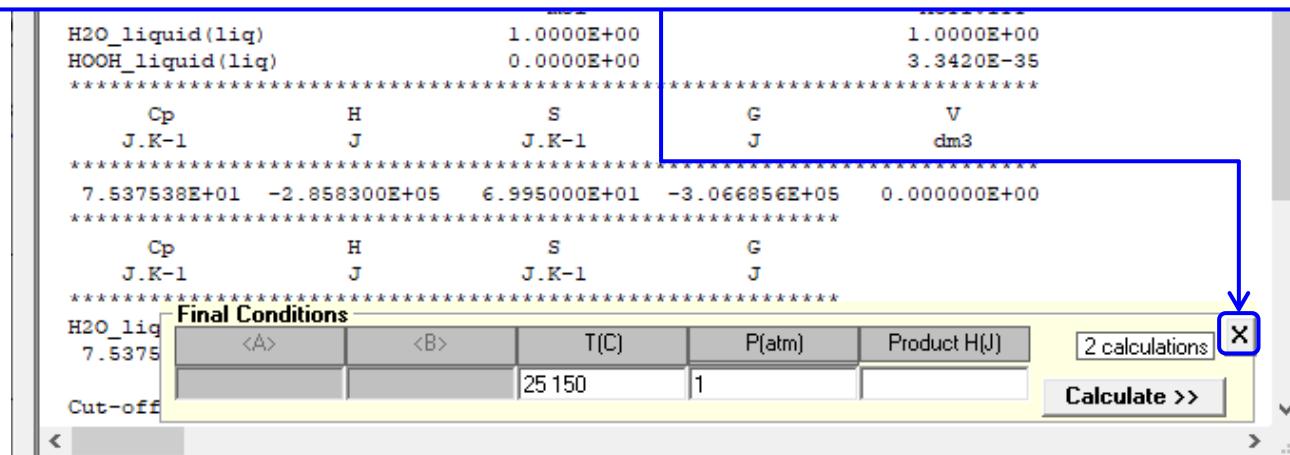
12. 出力形式を選択。  
弊社では ChemSage フォーマットを推奨



# $H_2O$ の平衡計算



温度、圧力を変更して再計算する場合は Final Conditions を設定して Calculate をクリックする。ただし奇妙な設定をしたときに警告メッセージが表示されないので、慣れるまでは Menu 画面に戻って再計算するほうが適切かもしれない。黄色い設定領域を隠すときは Final Conditions ⇒ Hide をクリックまたは閉じるボタンをクリックする。本資料では結果の見やすくするために隠している



# $H_2O$ の平衡計算

25 °C の場合

平衡状態では水  
が 1 mol 存在し  
ている

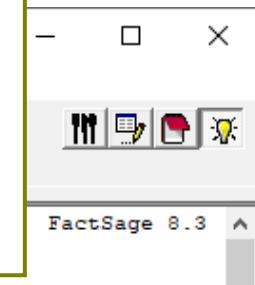
系全体(水)の  
熱力学量と体積  
(既定では気体  
の体積)

安定相の熱力学量

Equilib - Results 25				
Output	Edit			
25 C	150 C			
FactSageEdu lim				
T = 25 C				
P = 1 atm				
V = 0 dm3				
STREAM CONSTITUENTS	AMOUNT/mol			
H2O	1.0000E+00			
PHASE: gas_ideal	EQUIL AMOUNT			
H2O	mol			
H2	0.0000E+00			
O2	0.0000E+00			
OH	0.0000E+00			
HOOH	0.0000E+00			
HOO	0.0000E+00			
H	0.0000E+00			
O	0.0000E+00			
O3	0.0000E+00			
TOTAL:	0.0000E+00			
H2O_liquid(liq)	mol			
HOOH_liquid(liq)	0.0000E+00			
Cp	H	S	G	V
J.K-1	J	J.K-1	J	dm3
7.537538E+01	-2.858300E+05	6.995000E+01	-3.066856E+05	0.000000E+00
Cp	H	S	G	
J.K-1	J	J.K-1	J	
H2O_liquid(liq)	7.537538E+01	-2.858300E+05	6.995000E+01	-3.066856E+05

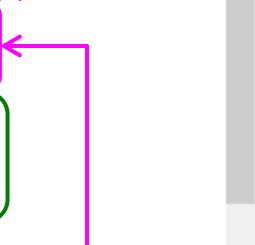
モル分率。この例では、圧力が変  
わり気相が安定になったときのモル  
分率と一致する。一致しない物質、  
条件もある。気体の量が 0 のときに  
結果を利用することはまずない

計算設定



フガシティー

気相の活  
量。全圧  
の意味で  
はない



活量(ラウール基  
準)。安定相は 1

# $H_2O$ の平衡計算

150 °C の場合

理想気体(gas\_ideal)なので、  
FUGACITY は分圧の意味である。  
分圧 = モル分率 × 全圧(1 atm)

温度など  
条件を変  
えて計算  
する場合

混合気体の組成。  
 $H_2O$  以外はほと  
んど 0

混合気体の構  
成元素の組成

150 °C では水  
は存在しない

AQUA

PHASE: gas_ideal	EQUIL AMOUNT mol	MOLE FRACTION	FUGACITY atm	
$H_2O$	1.0000E+00	1.0000E+00	1.0000E+00	
$H_2$	5.7955E-19	5.7955E-19	5.7955E-19	
$O_2$	2.8977E-19	2.8977E-19	2.8977E-19	
$OH$	4.2323E-23	4.2323E-23	4.2323E-23	
$HOOH$	4.1887E-26	4.1887E-26	4.1887E-26	
$HOO$	7.9971E-31	7.9971E-31	7.9971E-31	
$H$	3.6819E-34	3.6819E-34	3.6819E-34	
$O$	1.1093E-37	1.1093E-37	1.1093E-37	
$O_3$	9.5860E-50	9.5860E-50	9.5860E-50	
TOTAL:	1.0000E+00	1.0000E+00	1.0000E+00	
System component	Amount/mol	Amount/gram	Mole fraction	Mass fraction
$O$	1.0000	15.999	0.33333	0.88810
$H$	2.0000	2.0159	0.66667	0.11190

ACTIVITY

AQUA

	Cp J.K-1	H J	S J.K-1	G J	V dm3
$H_2O_{liquid}(liq)$	3.446907E+01	-2.375865E+05	2.006131E+02	-3.224759E+05	3.472278E+01
$HOOH_{liquid}(liq)$	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00

gas\_ideal

AQUA

# $\text{H}_2\text{O}$ の平衡計算

## ● 練習 1

$\text{H}_2\text{O}$  は  $2500\text{ }^{\circ}\text{C}$ , 1 atm で混合気体になります。 $\text{H}_2(\text{g})$  の分圧を予測してください。

## ● 練習 2

(mole)  $2 \text{ H}_2\text{O} + 0.79 \text{ N}_2 + 0.21 \text{ O}_2$  について、 $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ , 1 atm における平衡状態を計算して、 $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$  の分圧を予測してください。

## ● 練習 3

$\text{Ag}_2\text{O}$  を加熱すると、 $\text{Ag}$  と  $\text{O}_2$  に分解することを中学生のころに学習したかたもいらっしゃると思います。平衡計算で、そのとおりに分解するか確かめてください。何  $^{\circ}\text{C}$  くらいに加熱すればよいでしょうか。

ヒント：温度の入力ボックスに「50 250 10」と入力してみてください

# $\text{H}_2\text{O}$ の平衡計算

## ● 練習 4

水は電離します。25 °C、1 atm における  $\text{H}_2\text{O}$  の平衡状態について水溶液を考慮した計算をして、電離の様子を調べてください。

ヒント：データベース選択の画面で、aqueous species にチェック

## ● 練習 5

アルゴンガスは電離します。(mole) 0.99 Ar + 0.01  $\text{H}_2\text{O}$  について、10000 K, 1 atm における平衡状態を予測して、電離の様子を調べてください。

ヒント：データベース選択の画面で gaseous ions にチェック

## ● 練習 6

25 °C, 1 atm における以下の物質のギブズエネルギーを求めてください。すべて 1 mol とします。

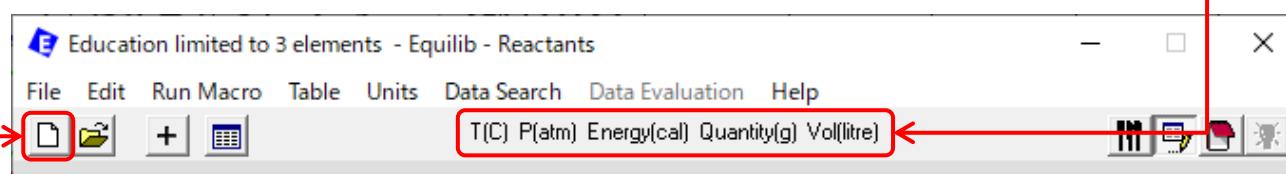
$\text{H}_2\text{O}(\text{s})$ ,  $\text{H}_2\text{O}(\text{liq})$ ,  $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$

# $\text{H}_2\text{O}$ の平衡計算(水の加熱)

■ 25 °C, 1 g の水に 1 cal の熱量を与えたときの系の組成と温度を求める

1. 新規設定 ⇒ はい ⇒ いいえ ⇒ FactPS を選択

2. 単位を設定



3. 反応種を入力

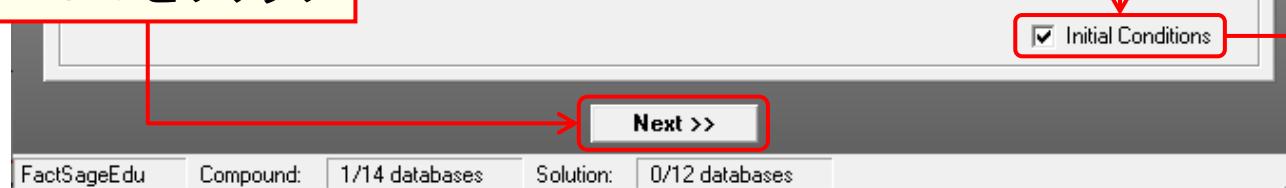
Quantity(g) Species Phase T(C) P(total)\*\* Stream# Data

1 H<sub>2</sub>O liquid 25 1 1

\*\* P(total) is the hydrostatic pressure above the phase.  
For a gaseous stream this is the sum of the partial pressures of the species in that stream.

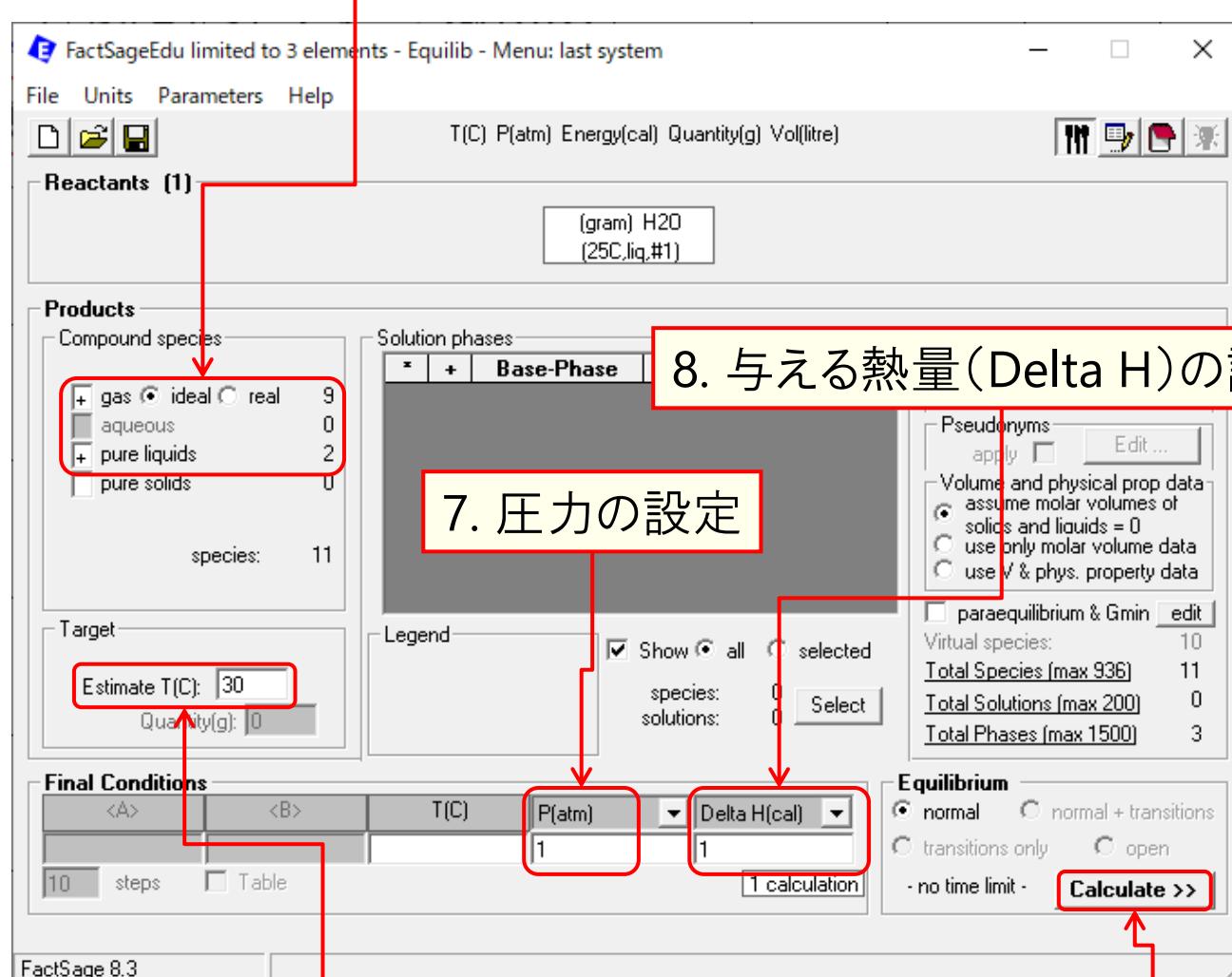
4. Initial Conditions にチェックを入れて初期条件を設定。  
水なので liquid を選択する

5. Next をクリック



# $\text{H}_2\text{O}$ の平衡計算(水の加熱)

## 6. 平衡状態で存在する可能性のある相や物質を選択



9. 予想される系の温度を入力

8. 与える熱量(Delta H)の設定

7. 圧力の設定

10. Calculate をクリック

# $H_2O$ の平衡計算(水の加熱)

系の温度

初期状態における  
系のエンタルピー

系に与えた熱量

平衡状態における  
系のエンタルピー

```
E Equilib - Results 26 C
Output Edit Show Pages Final Conditions
T(C) P(atm) Energy(cal) Quantity(g) Vol(litre)
FactSageEdu limited to the elements H O
*T = 26.00 C
P = 1 atm
V = 0 dm3

STREAM CONSTITUENTS          AMOUNT/gram   TEMPERATURE/C   PRESSURE/atm   STREAM
H2O_liquid                     1.0000E+00    25.00          1.0000E+00    1
*****
Cp_INI      H_INI      S_INI      G_INI      V_INI
cal.K-1       cal        cal.K-1     cal        dm3
*****
9.999927E-01 -3.792059E+03  9.280150E-01 -4.068747E+03  0.000000E+00

EQUIL AMOUNT    MOLE FRACTION    FUGACITY
mol                                atm
PHASE: gas_ideal
H2O                           0.0000E+00  1.0000E+00  3.3268E-02
H2                            0.0000E+00  9.7159E-27  3.2323E-28
O2                            0.0000E+00  4.8579E-27  1.6161E-28
OH                            0.0000E+00  7.1550E-33  2.3803E-34
HOOH                          0.0000E+00  3.9363E-36  1.3095E-37
HOO                           0.0000E+00  2.6141E-43  8.6964E-45
H                             0.0000E+00  1.7582E-48  5.8492E-50
O                             0.0000E+00  1.3402E-53  4.4585E-55
O3                           0.0000E+00  1.9444E-69  6.4687E-71
TOTAL:                         0.0000E+00  1.0000E+00  3.3268E-02
                                gram
H2O_liquid(liq)                1.0000E+00
HOOH_liquid(liq)               0.0000E+00
*****
DELTA Cp      DELTA H      DELTA S      DELTA
cal.K-1       cal        cal.K-1     cal
*****
-1.763228E-04  1.000000E+00  3.348404E-03 -9.297800
*****
Cp      H      S      G
cal.K-1  cal    cal.K-1  cal
*****
9.998164E-01 -3.791059E+03  9.313634E-01 -4.069677
```

設定した  $\Delta H$  になるまで  
何回も温度を変えて計  
算している。負荷の高い  
計算であり、正しい値が  
求まらない場合がある

# $\text{H}_2\text{O}$ の平衡計算(水の加熱)

## ● 練習 7

1 g の水(0 °C)と 1 g のお湯(90 °C) を混ぜると何 °C になるか計算してください。実験中、外部と熱のやりとりはないとしています。

(ヒント: 入力物質に別々の温度を設定する場合は物質の入力画面で Stream を水とお湯で別の値にします。)

## ● 練習 8

1 g の氷(0 °C)と 1 g のお湯(90 °C) を混ぜると何 °C になるでしょうか。

## ● 練習 9

40 °C の 8 畳部屋が  $790 \text{ mol N}_2 + 210 \text{ mol O}_2$  の乾燥空気で満たされている。10 mol の水(40 °C)を蒸発させると室温は何 °C になるでしょうか。 $\text{N}_2$  と  $\text{O}_2$  の Stream を同じにすると  $\text{N}_2$  と  $\text{O}_2$  の混合气体、別にすると、 $\text{N}_2$  と  $\text{O}_2$  が混ざらずに共存しているという意味になります。

# アルミニウム合金の平衡計算

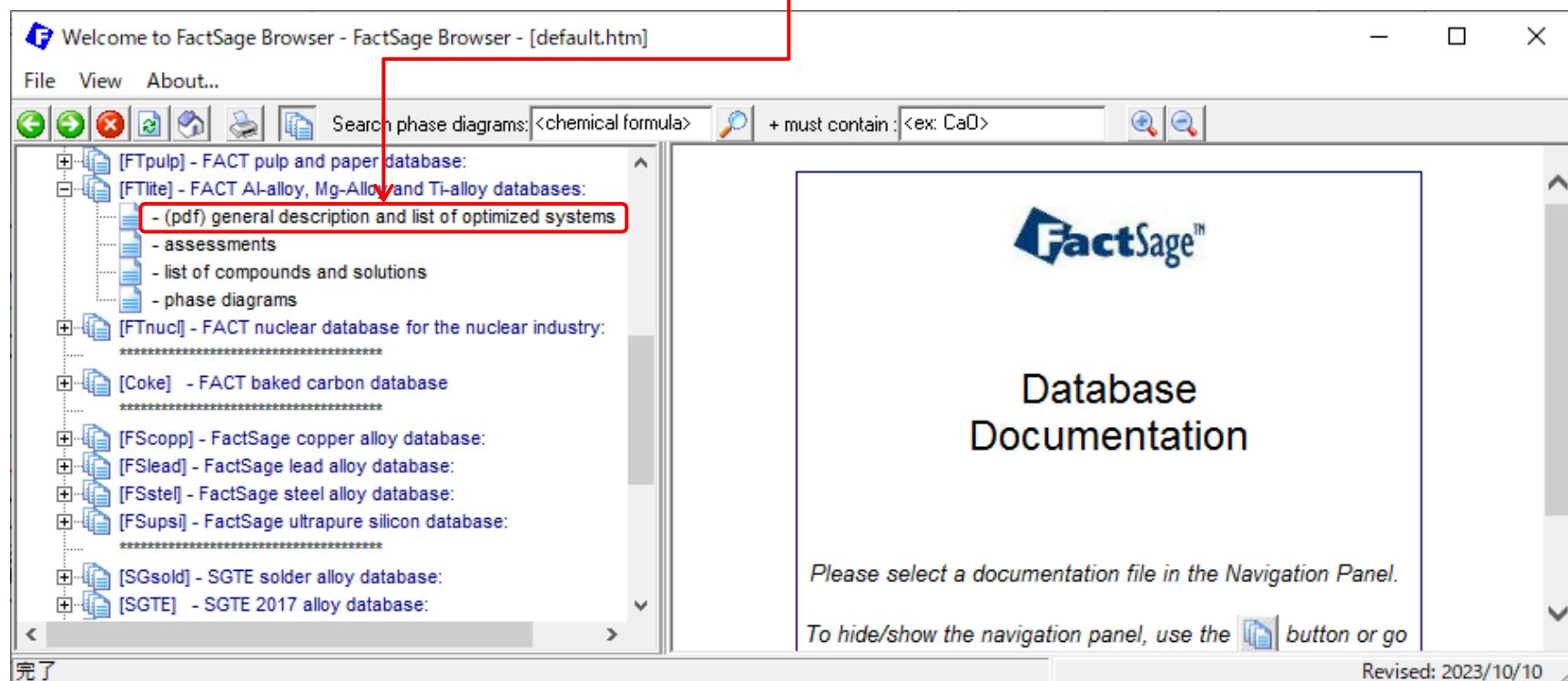
Al-Mg-Si 系(A6101)の挙動を予測する。

FTlite データベース用いて解析する。FTlite データベースには、アルミニウム合金、マグネシウム合金、チタン合金のデータが収録されている。

# アルミニウム合金の平衡計算

■ Al-Mg-Si 系の平衡計算。アルミニウム合金なので FTlite を使って解析する

1. Database Documentation を起動して FTlite ⇒ (pdf) general description ... を開く。どのような系が解析できるか、また FTlite の使い方を確認しておこう



# アルミニウム合金の平衡計算

Si は青色で記載されていて Al-Mg-Si 系は評価されていることが確認できる。よって、この系は解析可能であり高い予測精度を期待できる

6000 番台のアルミニウム合金の解析が可能

AI Alloys
Ag, Al, As, Au, B, Ba, Be, Bi, C, Ca, Ce, Co, Cr, Cu, Dy, Er, Eu, Fe, Ga, Gd, Ge, H, Hf, Ho, In, K, La, Li, Lu, Mg, Mn, Mo, N, Na, Nb, Nd, Ni, O, Pb, Pr, Pt, Sb, Sc, Si, Sm, Sn, Sr, Ta, Tb, Ti, Tm, V, W, Y, Yb, Zn, Zr
Mg Alloys
Ag, Al, B, Ba, Be, Bi, C, Ca, Ce, Co, Cr, Cu, Dy, Er, Eu, Fe, Ga, Gd, Ge, H, Ho, In, K, La, Li, Lu, Mg, Mn, Na, Nb, Nd, Ni, O, Pb, Pr, Pt, Sb, Sc, Si, Sm, Sn, Sr, Tb, Ti, Tm, V, Y, Yb, Zn, Zr
Ti Alloys
Ag, Al, B, Ba, C, Ca, Ce, Co, Cr, Cu, Dy, Er, Eu, Fe, Ga, Gd, H, Ho, K, La, Li, Lu, Mg, Mn, Mo, N, Na, Nb, Nd, Ni, O, Pr, Sc, Si, Sm, Sn, Sr, Ta, Tb, Ti, Tm, V, W, Y, Yb, Zn, Zr
Color codes
<b>Red</b> : Al or Mg <b>Blue</b> : Major alloying elements (full optimisations of binary systems with Al, Mg and Ti and with several minor alloying elements, Al-Mg-Xx ternary systems evaluated (good for Al+Mg-rich regions), several quaternary systems included); <b>Green</b> : Minor alloying elements (full optimisations of binary systems with Al and Mg); <b>Black</b> : Optimized for the M-Zz system and few M-Xx-Zz and M-Yy-Zz systems (where M is Al, Mg or Ti);

## Composition Ranges

The database is intended to allow calculations over all ranges of composition, although the assessed data are often most reliable for light metal rich composition ranges (Al-rich, Mg-rich and Ti-rich compositions). Alkali metal-rich compositions. The database can be used for Al alloys in the commercial series 1000, 2000, 3000, 4000, 5000, 6000 and 7000, and for a wide range cast alloys.

# アルミニウム合金の平衡計算

## データベースの使い方を確認

### Use of the Database

The phase diagrams of all the binary systems listed above have been checked using FactSage 8.3.

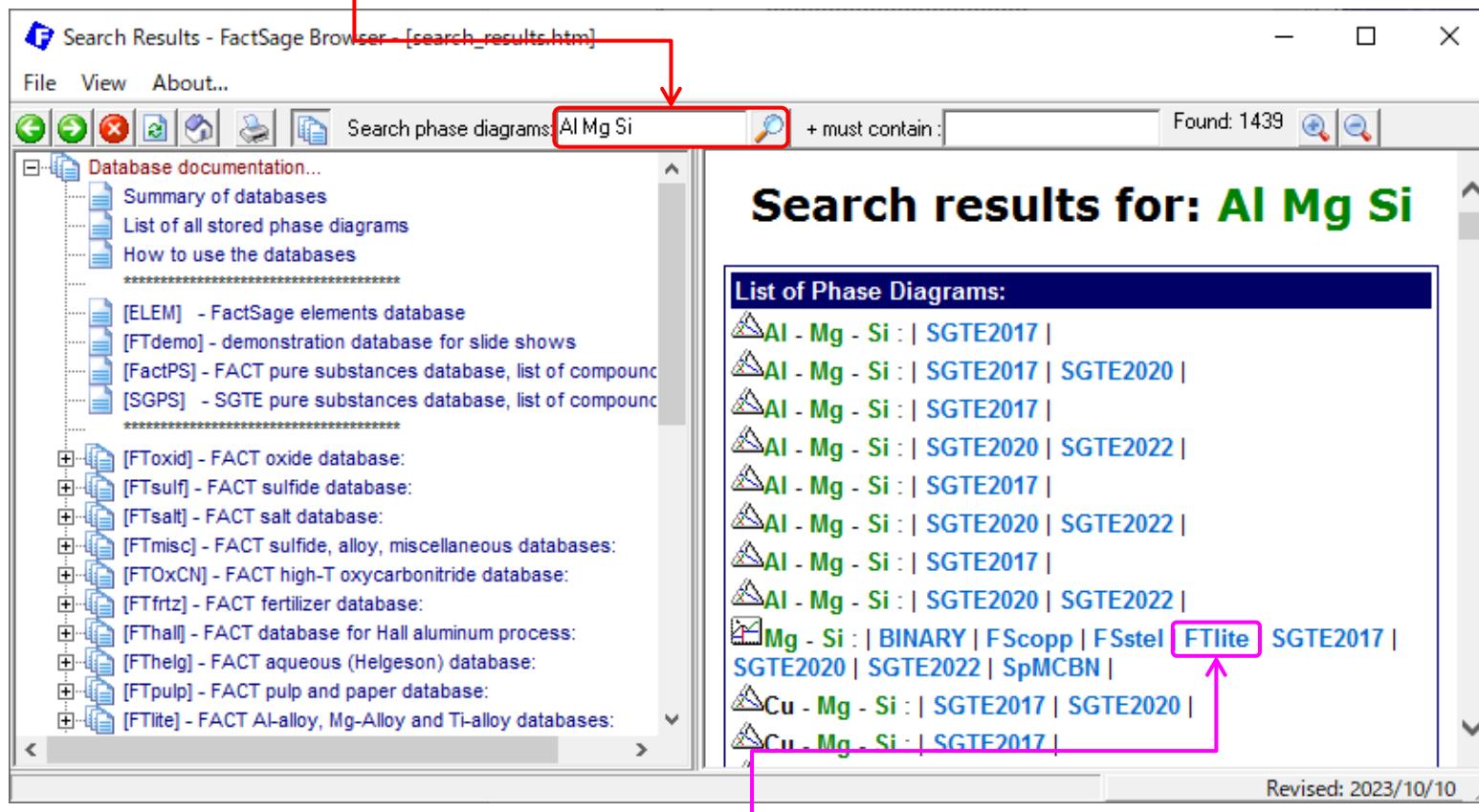
Phase selection in the EQUILIB or PHASE DIAGRAM modules using FTlite is simple: simply follow these instructions:

- For pure solid compounds:
  - Right-click on “pure solids”
  - Then click “Select/Clear” > “Add all species from database” > “FTlite”
- For solutions:
  - Click on the “Select” button below the “Solution species” list box
  - Then click “Add all phases from database” > “FTlite”
  - Apply the recommendations related to the CBCC-A12, D82 and D88 solutions, as described in the warning text box in the following page;
- There is no need to select pure liquid phases (the FTlite-Liqu solution contains the liquid species). They may be selected as dormant (metastable, option “!”) for purposes of computing their chemical activity.
- Click “Use V & phys. property data” in the EQUILIB Module if you intend to have density, viscosity, thermal conductivity and surface tension to be calculated for phases, when available. We recommend not to click this option in the PHASE DIAGRAM Module.

There might be cases when a chemical system with many elements results in more than 150 possible

# アルミニウム合金の平衡計算

## 2. Al-Mg-Si が含まれる計算状態図を検索



Al-Mg-Si 系は SGTE で計算可能であることがわかる。FTlite については三元系状態図が「計算状態図データベース」に収録されていないので、この画面では確認できない。Mg-Si, Al-Si, Al-Mg の二元系部分系が計算できることは確認できる

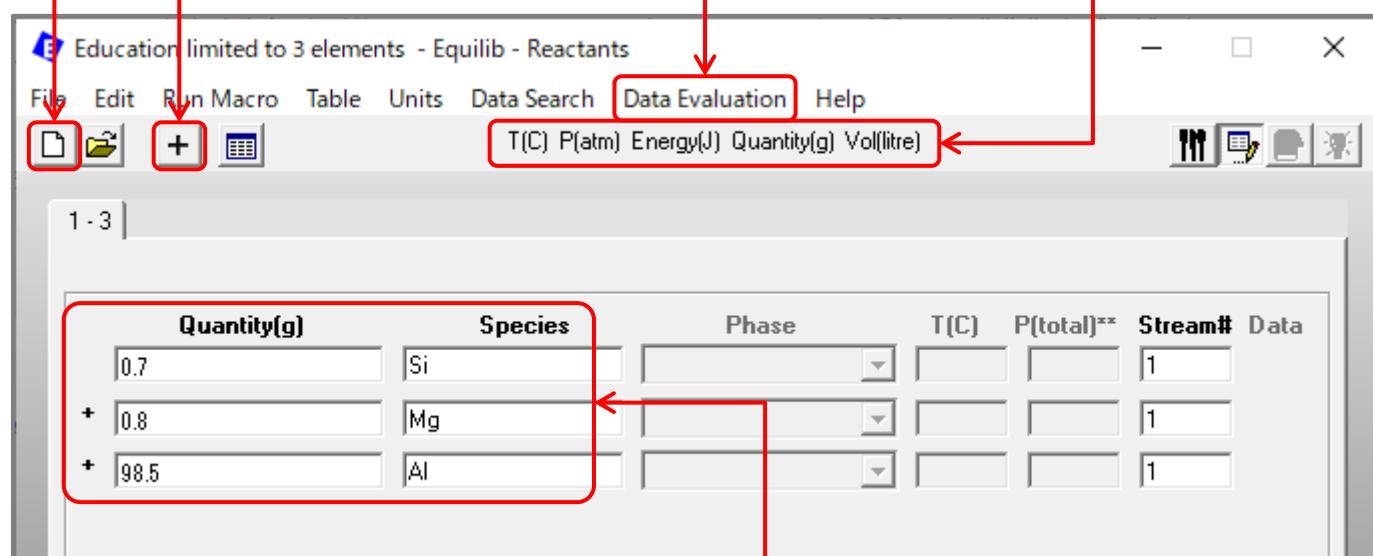
# アルミニウム合金の平衡計算

3. 新規設定 ⇒ はい ⇒ いいえ ⇒ FTlite を選択

4. + をクリックして入力場所を作成

7. Data Evaluation をクリックして二元系部分系のデータが最適化されているか確認

5. 単位を設定

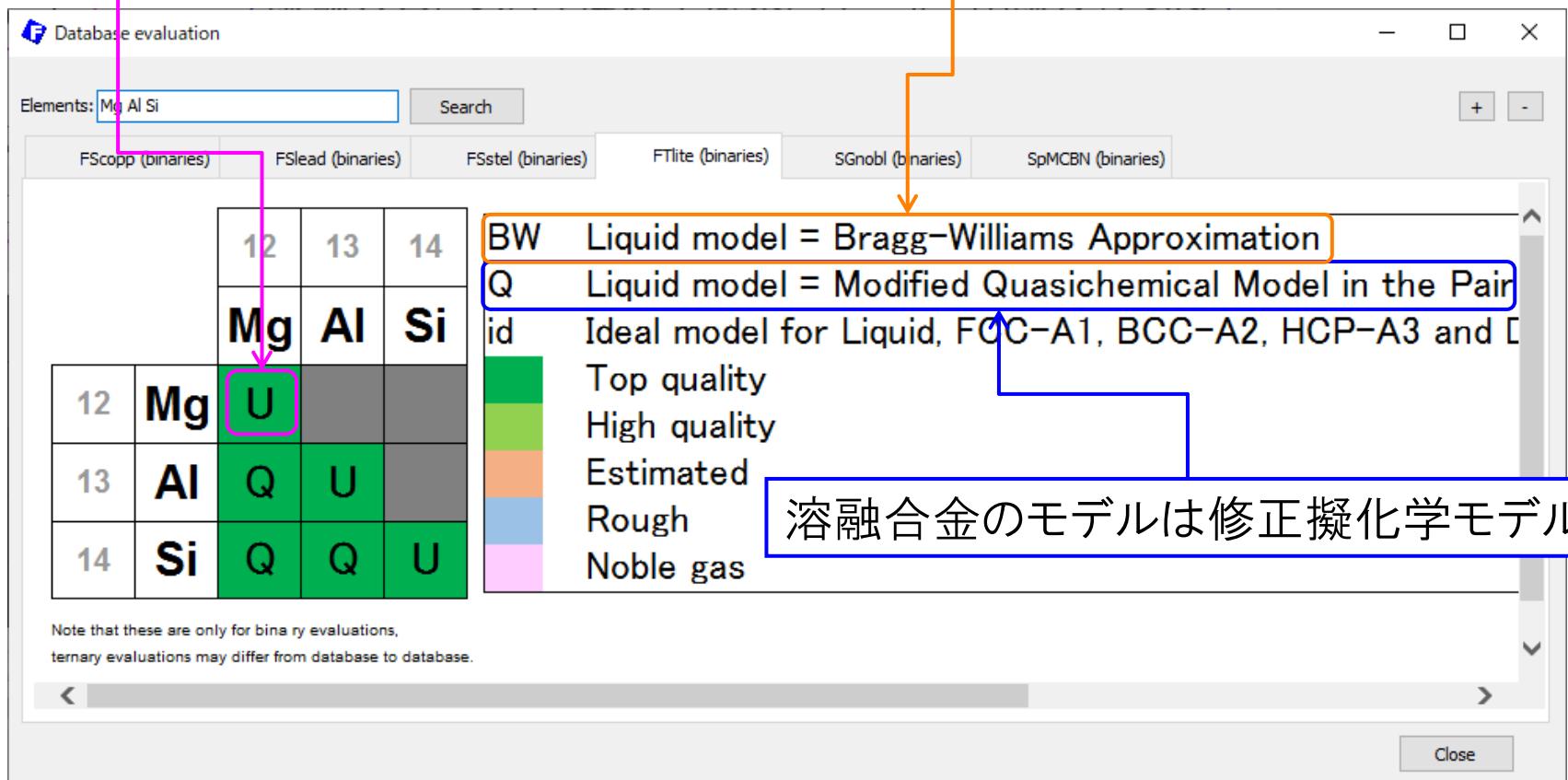


6. 反応種を入力

# アルミニウム合金の平衡計算

Unary は元素

溶融合金のモデルは Bragg-Williams 近似



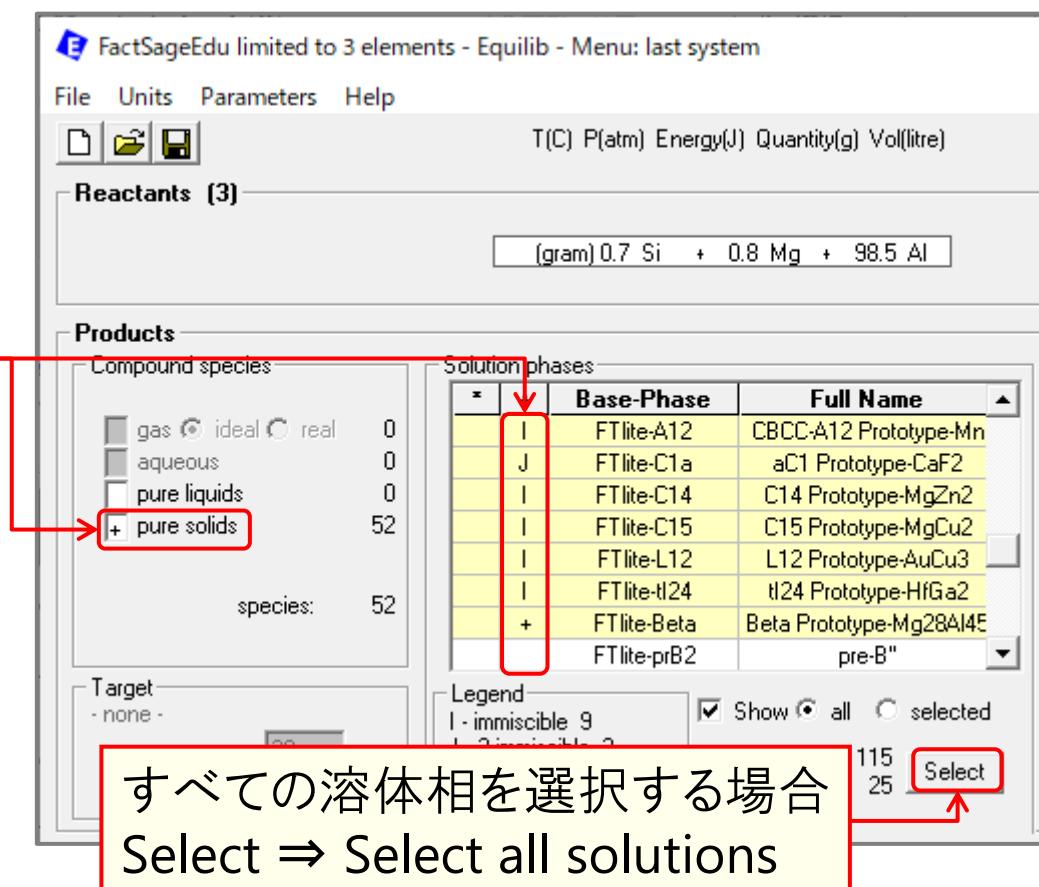
すべて Top quality なので悪くない状況。三元系は Documentation ⇒ general description で確認する

# アルミニウム合金の平衡計算

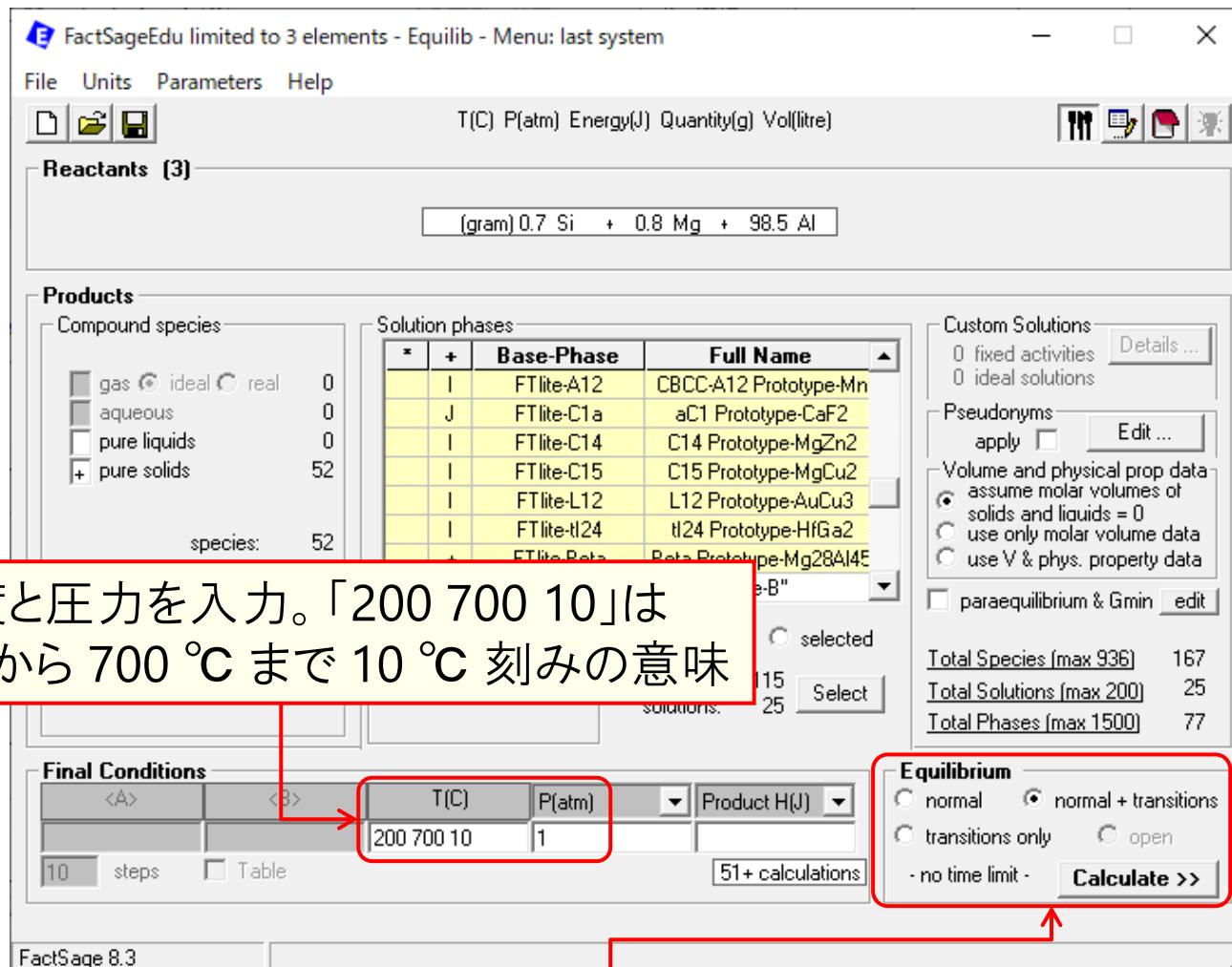
8. Next をクリック



9. 平衡状態で存在する可能性のある物質を選択。FTliteについては最初はすべての溶体相を選択して計算してみよう。自動選択されない相(例、FTlite-prB2)は準安定相であり、安定相を求める計算では選択しない。溶体相のオプションは自動的に選択される。I オプションは二相分離を、J オプションは三相分離を考慮する設定。どちらも計算負荷が大きくなる。変更する場合は「+」の列を右クリックする



# アルミニウム合金の平衡計算

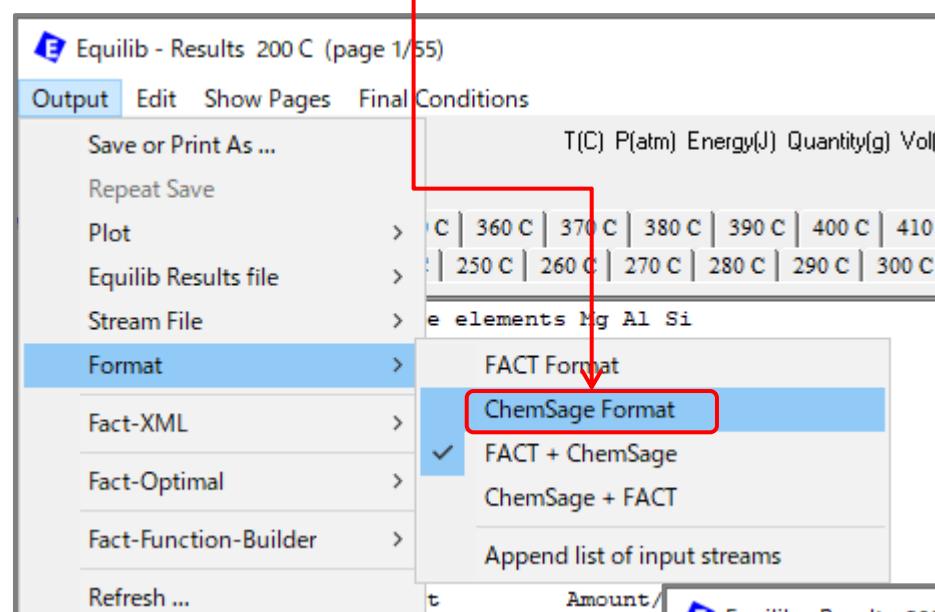


10. 温度と圧力を入力。「200 700 10」は  
200 °C から 700 °C まで 10 °C 刻みの意味

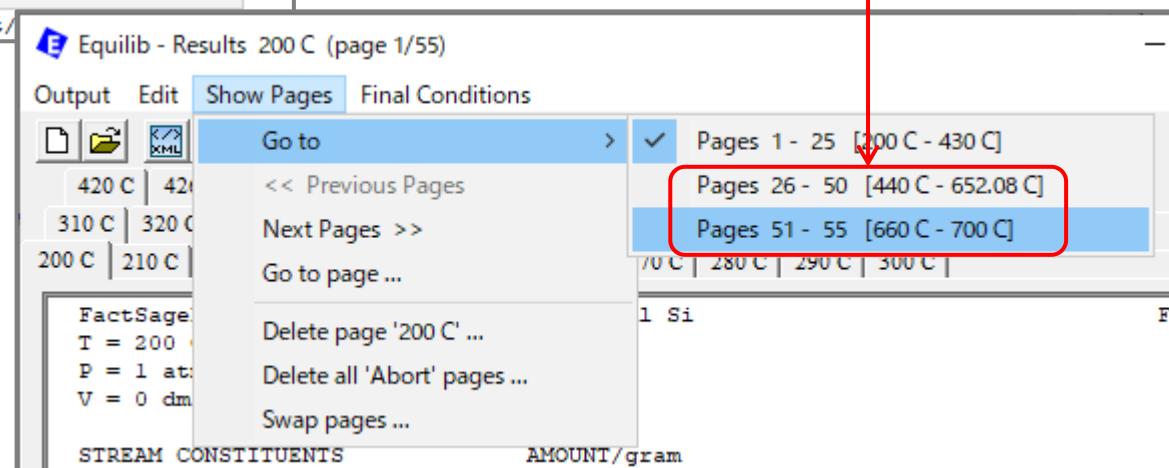
11. normal + transitions を選択して Calculate をクリック。transitions は相変態点または相転移点を探してその条件で計算させるオプション。探し出せない場合は温度刻み幅を小さくしたり、FactPS の Ar を微量追加して再計算してみる

# アルミニウム合金の平衡計算

12. 出力フォーマットを選択。  
ChemSage フォーマットがおすすめ



13. 26 ページ以降  
を表示する場合



# アルミニウム合金の平衡計算

700 °C の場合

溶体相の名前。  
#1(#2) は相分離  
ていないことを表す

左から、相の成分・  
各成分の量・質量  
分率・活量。活量  
の基準はラウール  
基準。溶融合金の  
成分 Al を基準に  
したときの Al の活  
量は 9.8465E-01  
である

Equilib - Results 700 C (page 55/55)

Output Edit Show Pages Final Conditions

T(C) P(atm) Energy(J) Quantity(g) Vol(litre)

FactSageEdu limited to the elements Mg Al Si

FactSage 8.3

計算条件

PHASE: Liquid#1(#2)

	EQUIL AMOUNT	MASS FRACTION	ACTIVITY
Al	9.8500E+01	9.8500E-01	9.8465E-01
Mg	8.0000E-01	8.0000E-03	5.7720E-03
Si	7.0000E-01	7.0000E-03	1.4038E-03
<b>TOTAL:</b>	<b>1.0000E+02</b>	<b>1.0000E+00</b>	<b>1.0000E+00</b>

System component

PHASE: FCC-Al#1:#2:#3

	Amount/mol	Amount/gram	Mole fraction	Mass fraction
Si	2.4924E-02	0.70000	6.7208E-03	7.0000E-03
Al	3.6506	98.500	0.98440	0.98500
Mg	3.2915E-02	0.80000	8.8756E-03	8.0000E-03
<b>TOTAL:</b>	<b>0.0000E+00</b>	<b>1.0000E+00</b>	<b>1.0000E+00</b>	<b>1.0000E+00</b>

PHASE: HCP-Al#1:#2

	MASS FRACTION	ACTIVITY
Al <sub>2</sub> V <sub>3</sub>	9.9251E-01	3.4476E-01
Mg <sub>2</sub> V <sub>3</sub>	6.1178E-03	2.9714E-05
Si <sub>2</sub> V <sub>3</sub>	1.3721E-03	3.0474E-07
<b>TOTAL:</b>	<b>1.0000E+00</b>	<b>5.9195E-01</b>

相の量

相の活量  
1のときは安定相

The screenshot shows the FactSage software interface with the following key data extracted from the results table:

PHASE	Component	Amount/mol	Amount/gram	Mole fraction	Mass fraction
Liquid	Al	9.8500E+01	9.8500E-01	9.8465E-01	9.8465E-01
	Mg	8.0000E-01	8.0000E-03	5.7720E-03	5.7720E-03
	Si	7.0000E-01	7.0000E-03	1.4038E-03	1.4038E-03
FCC-Al	<b>TOTAL:</b>	<b>1.0000E+02</b>	<b>1.0000E+00</b>	<b>1.0000E+00</b>	<b>1.0000E+00</b>
	Al	3.6506	98.500	0.98440	0.98500
	Mg	3.2915E-02	0.80000	8.8756E-03	8.0000E-03
	Si	2.4924E-02	0.70000	6.7208E-03	7.0000E-03
HCP-Al	<b>TOTAL:</b>	<b>0.0000E+00</b>	<b>1.0000E+00</b>	<b>1.0000E+00</b>	<b>1.0000E+00</b>
	Al <sub>2</sub> V <sub>3</sub>	9.9251E-01	3.4476E-01	3.4476E-01	3.4476E-01
	Mg <sub>2</sub> V <sub>3</sub>	6.1178E-03	2.9714E-05	2.9714E-05	2.9714E-05
	Si <sub>2</sub> V <sub>3</sub>	1.3721E-03	3.0474E-07	3.0474E-07	3.0474E-07

# アルミニウム合金の平衡計算

700 °C (つづき)

E Equilib - Results 700 C (page 55/55)			
Output	Edit	Show Pages	Final Conditions
660 C	670 C	680 C	690 C
- 700 C -		T(C) P(atm) Energy(J) Quantity(g) Vol(litre)	
PHASE: CBCC-Al12#2	gram	MASS FRACTION	ACTIVITY
Mg10Al124Al124	0.0000E+00	8.6216E-01	7.6152E-24
Mg10Al124Mg24	0.0000E+00	3.9001E-03	<1.0000E-75
Mg10Mg24Al124	0.0000E+00	4.5557E-03	2.5133E-71
Mg10Mg24Mg24	0.0000E+00	2.0570E-05	<1.0000E-75
Si10Al124Al124	0.0000E+00	1.2810E-01	2.7939E-32
Si10Al124Mg24	0.0000E+00	5.8011E-04	<1.0000E-75
Si10Mg24Al124	0.0000E+00	6.7763E-04	<1.0000E-75
Si10Mg24Mg24	0.0000E+00	3.0630E-06	<1.0000E-75
TOTAL:	0.0000E+00	1.0000E+00	3.7161E-23
PHASE: Beta	gram	MASS FRACTION	ACTIVITY
Al19Al12Mg12-beta	0.0000E+00	9.9271E-01	2.0593E-23
Al19Mg2Mg12	0.0000E+00	7.2924E-03	1.1252E-27
TOTAL:	0.0000E+00	1.0000E+00	2.0898E-23
Al_fcc_Al(s)	gram	ACTIVITY	
Al_fcc_Al(s)	0.0000E+00	9.3095E-01	
Al_hcp_Zn(s3)	0.0000E+00	5.8716E-01	
Al_hcp_A3(s2)	0.0000E+00	5.8716E-01	
Al_bcc_A2(s5)	0.0000E+00	4.7767E-01	
Al_bct_A5(s7)	0.0000E+00	4.7767E-01	
Al_cbcc_Al12(s4)	0.0000E+00	4.7765E-01	
Al_dhcp_A3'(s9)	0.0000E+00	4.5136E-01	
Al_cub_Al3(s6)	0.0000E+00	4.3063E-01	
Al_diamond_A4(s8)	0.0000E+00	2.5231E-02	

Al\_fcc\_Al(s1) を基準にしたときの Al の活量は 9.3095E-01 である。  
溶融合金の成分である Al を基準にしたときの Al の活量は 9.8465E-01 であった

# アルミニウム合金の平衡計算

700 °C (つづき)

Equilib - Results 700 C (page 55/55)

Output Edit Show Pages Final Conditions

T(C) P(atm) Energy(J) Quantity(g) Vol(litre)

660 C | 670 C | 680 C | 690 C | - 700 C -

Mg9Si7Al3_B'_hexagonal_P(s)	0.0000E+00	1.4315E-25
Mg4Si7_Beta''(s)	0.0000E+00	2.9769E-26
Mg9Si7Al5_B'_hexagonal_P(s)	0.0000E+00	2.0418E-26
Mg5Si6_Pre-beta''_FCC_mo(s)	0.0000E+00	2.1056E-27
Mg4Si8_U3_Inma(s)	0.0000E+00	1.8134E-27
Mg9Si9Al3_B'_hexagonal_P(s)	0.0000E+00	4.0940E-31
Mg11Si7Al3_B'_hexagonal_(s)	0.0000E+00	5.0524E-33
Al30Mg23_prototype_Mg23A(s)	0.0000E+00	1.1567E-43

Cp H S G V  
J.K-1 J J.K-1 J dm3

\*\*\*\*\*  
1.176972E+02 1.119086E+05 2.726756E+02 -1.534457E+05 0.000000E+00  
\*\*\*\*\*

Cp H S G  
J.K-1 J J.K-1 J

\*\*\*\*\*  
Liquid#1  
1.176972E+02 1.119086E+05 2.726756E+02 -1.534457E+05  
\*\*\*\*\*

Cut-off limit for phase activities = 1.00E-75

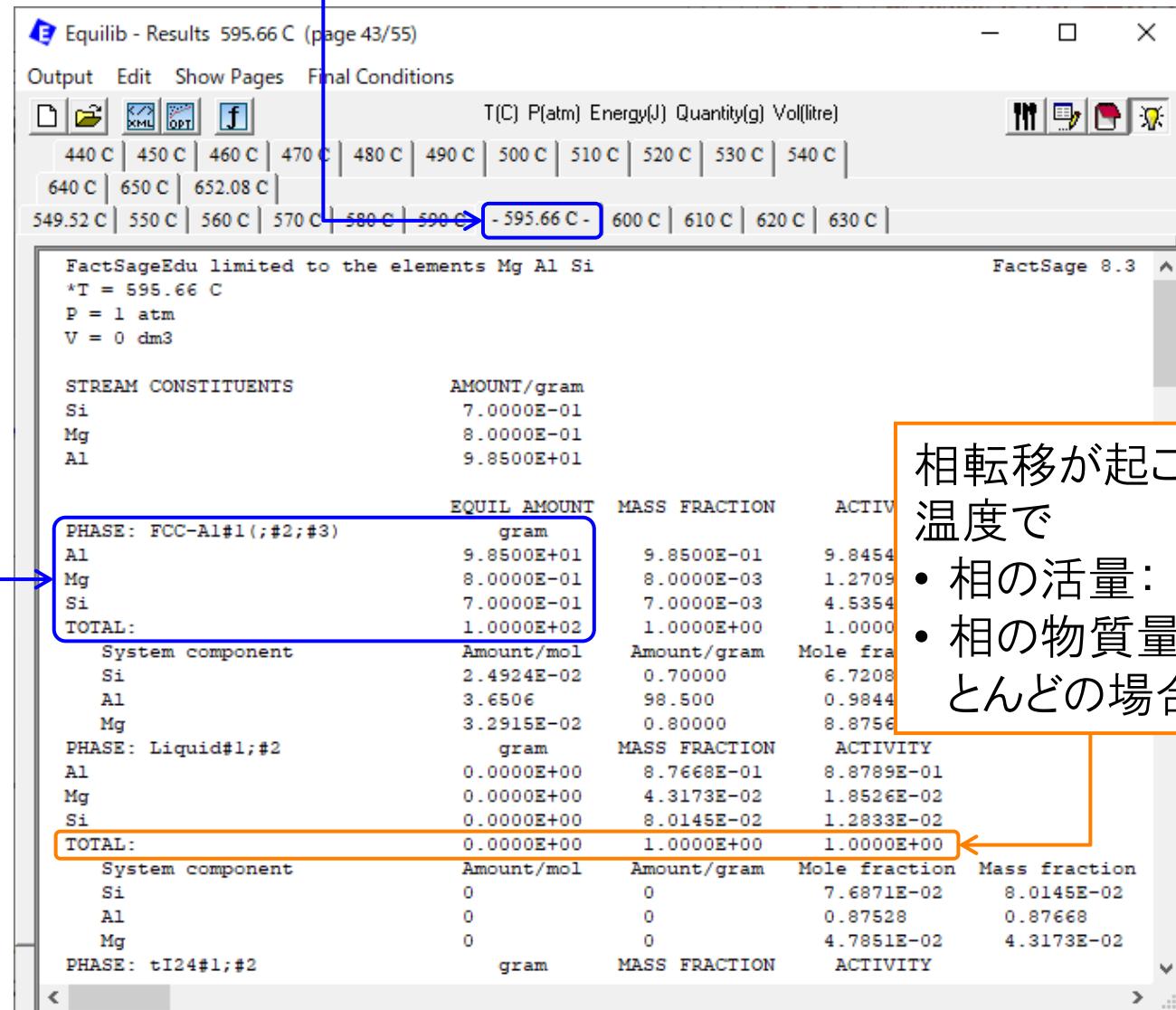
Data on 14 product species identified with "T" have been extrapolated outside their valid ..

系全体(すなわち溶融合金)の熱力学量。Vは既定では気体の体積なので0となる。FTliteは一部の物質については体積データをもっている。体積データを使った計算例は後述する

# アルミニウム合金の平衡計算

595.66 °C で融け始める

FCC\_A1 は固溶体(合金)。副格子モデルでモデル化されている



相転移が起こる温度で  
• 相の活量: 1  
• 相の物質量: ほとんどの場合 0

# アルミニウム合金の平衡計算

200 °C の場合

aC1 相は 2 副格子モデルでモデル化されている。構成元素のモル分率から、Al は無視できるほど小さく、Mg:Si = 0.66667:0.33333 = 2:1 である。よって aC1 相は近似的に Mg<sub>2</sub>Si(s) とみなせる。端成分の質量分率からもイメージできる

Equilib - Results 200 C (page 1/55)

Output Edit Show Pages Final Conditions

T(C) P(atm) Energy(J) Quantity(g) Vol(litre)

-200 C - 210 C 220 C 230 C 240 C 250 C 260 C 270 C 280 C 290 C 300 C

FactSageEdu limited to the elements Mg Al Si

T = 200 C  
P = 1 atm  
V = 0 dm<sup>3</sup>

STREAM CONSTITUENTS AMOUNT/gram

Si	7.0000E-01
Mg	8.0000E-01
Al	9.8500E+01

PHASE: FCC-Al#1(;#2;#3)

Al	EQUIL AMOUNT gram	9.8500E+01	MASS FRACTION	9.9983E-01	ACTIVITY	9.9983E-01
Mg	8.9447E-03	9.0795E-05	2.3368E-04			
Si	7.0154E-03	7.1211E-05	3.2251E-05			
TOTAL:	9.8516E+01	1.0000E+00	1.0000E+00	1.0000E+00		
System component	Amount/mol	Amount/gram	Mole fraction	Mass fraction		
Si	2.4979E-04	7.0154E-03	6.8411E-05	7.1211E-05		
Al	3.6506	98.500	0.99983	0.99984		
Mg	3.6802E-04	8.9447E-03	1.0079E-04	9.0795E-05		

PHASE: aC1#1(;#2;#3)

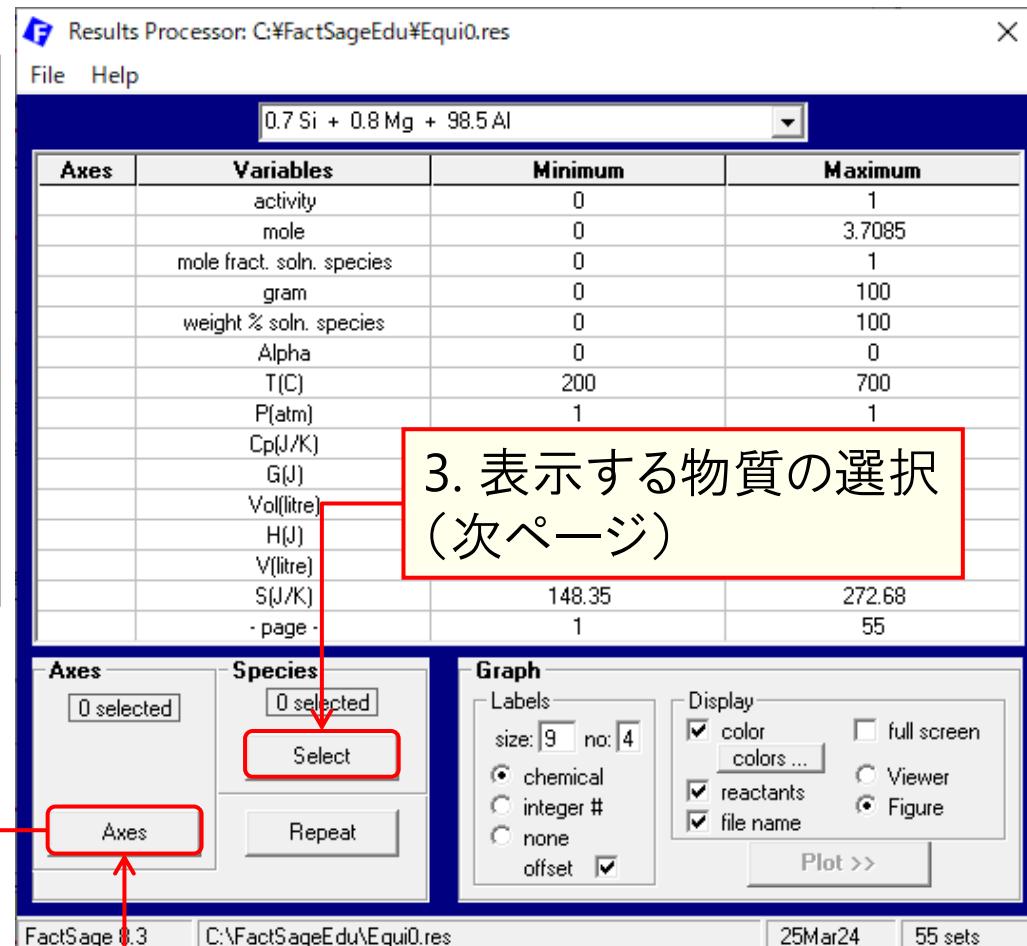
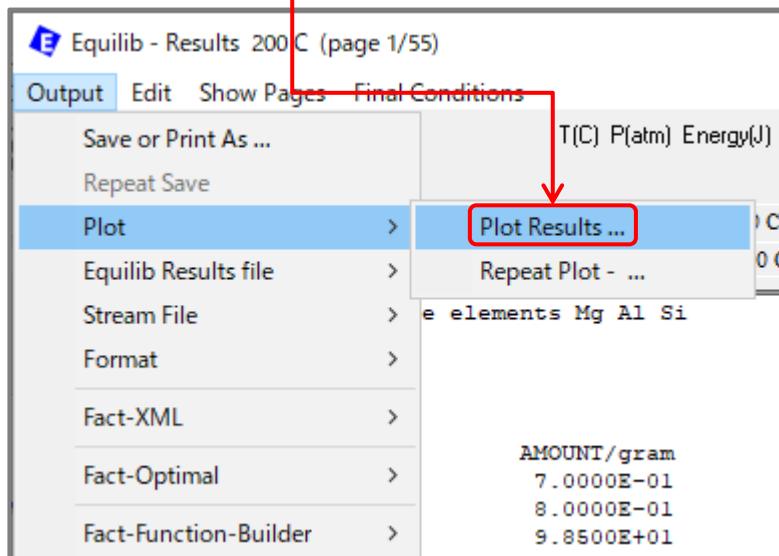
Al <sub>2</sub> Si	EQUIL AMOUNT gram	2.8505E-08	MASS FRACTION	2.2839E-08	ACTIVITY	7.8809E-07
Mg <sub>2</sub> Si	1.2481E+00	1.0000E+00	1.0000E+00	1.0000E+00	1.0000E+00	
Si <sub>2</sub> Si	6.0393E-12	4.8388E-12	3.3546E-14			
Va <sub>2</sub> Si	6.3563E-15	5.0927E-15	1.9341E-28			
TOTAL:	1.2481E+00	1.0000E+00	1.0000E+00	1.0000E+00		
Site fraction of sublattice constituents:						
Mg_8c	1.0000					Stoichiometry = 2
Si_8c	4.4045E-12					
Al_8c	2.1348E-08					
Va_8c	1.3907E-14					

Si\_4a

Si_4a	EQUIL AMOUNT	1.0000	MASS FRACTION	Stoichiometry = 1
System component	Amount/mol	Amount/gram	Mole fraction	Mass fraction
Si	1.6274E-02	0.45705	0.33333	0.36619
Al	6.9483E-10	1.8748E-08	1.4232E-08	1.5021E-08
Mg	3.2547E-02	0.79106	0.66667	0.63381

# アルミニウム合金の平衡計算(グラフの作成)

## 1. Plot Results... を選択



The screenshot shows the 'Axes: gram vs T(C)' dialog box. It has two sections: 'Y-axis' (set to 'gram') and 'X-axis' (set to 'T(C)'). Each section has 'maximum', 'minimum', and 'tick every' fields. A red box highlights the 'Y-axis' section, another highlights the 'X-axis' section, and a third highlights the 'OK' button at the bottom. A red arrow points from the 'X-axis' section to the 'Axes' button in the main FactSage window.

## 2. X 軸、Y 軸を設定

# アルミニウム合金の平衡計算(グラフの作成)

Plot Species Selection - Equilib Results: gram vs T(C)

File Show Select

#		Gram (max)	Wt.% (min)	Wt.% (max)	Activity (min)	Activity (max)
158	Select all stable phases	0	0	0	0.2910E-22	1.0E79E-12
159	Select stable pure liquids	0	0	0	0	0
160	Select stable pure solids	0	0	0	0	0
161	Select stable solution phases	0	0	0	0	0
162	Clear	0	0	0	0	0
164	Mg8Si7Al3(s)	0	0	0	0	0
165	Mg11Si7Al3(s)	0	0	0	0	0
166	Mg9Si7Al5(s)	0	0	0	0	0
167	Mg9Si9Al3(s)	0	0	0	0	0
<b>SOLUTIONS</b>						
168	GAS	0	0	0	0	0
169	Liqu#1	0	100	0	0.255495	1
170	Liqu#2	0	0	0	0.255495	1
171	A1#1	0	100	0	0.934227	1
172	A1#2	0	0	0	0.934227	1
173	A1#3	0	0	0	0.934227	1
174	A2#1	0	0	0	0.137746	0.483174
175	A2#2	0	0	0	0.137746	0.483174
176	A3#1	0	0	0	0.308546	0.611716
177	A3#2	0	0	0	0.308546	0.611716

Display: source phase name [page] Mass: mole gram Order: integer # mass (max) fraction (max) activity (max) Selected: ignore species and phases with zero mass OK Select ...

Click on the '+' column to add or remove species.

選択した物質をクリア

単位の変更

相((s), (g) など)が表示される

4. すべての安定相(55 個の計算結果のいずれかで活量が 1 になった相)を選択する。プロットする物質を一つづつ選んでもよい。安定な物質の物質量に注目して Gram (max)(= 55 個の計算結果で最大値)が正の物質を選択してもよい

# アルミニウム合金の平衡計算(グラフの作成)

Plot Species Selection - Equilib Results: gram vs T(C)

File Show Select

+	#	Species	Gram (min)	Gram (max)	Wt.% (min)	Wt.% (max)	Activity (min)
	165	Mg11Si7Al3(s)	0	0	0	0	5.0524E-33 [56]
	166	Mg9Si7Al5(s)	0	0	0	0	2.0418E-26 [56]
	167	Mg9Si8Al3(s)	0	0	0	0	4.0940E-31 [56]
		<b>SOLUTIONS</b>					
	168	GAS	0	0	0	0	0
+	169	Liqu#1	0	[2]	100	[51]	0.255495 [2]
+	170	Liqu#2	0		0		0.255495 [2]
+	171	A1#1	0	[51]	100	[38]	0.934227 [56]
+	172	A1#2	0		0		
+	173	A1#3	0		0		
	174	A2#1	0		0		
	175	A2#2	0		0		
	176	A3#1	0		0		
	177	A3#2	0		0		
+	178	A4#1	0	[25]	0.235935 [2]		
+	179	A4#2	0		0		1.9793E-02 [56]
	180	A12#1	0		0		2.0959E-27 [2]
	181	A12#2	0		0		2.0959E-27 [2]
+	182	C1a#1	0	[38]	1.2481 [2]		5.2350E-04 [56]
+	183	C1a#2	0		0		5.2350E-04 [56]

Display      Mass      Order      Select Top 15      10 species selected

source       mole       integer #  
 phase       mass (max)       fraction (max)  
 name       activity (max)

ignore species and phases with zero mass

Clear      OK

Click on the '+' column to add or remove species.

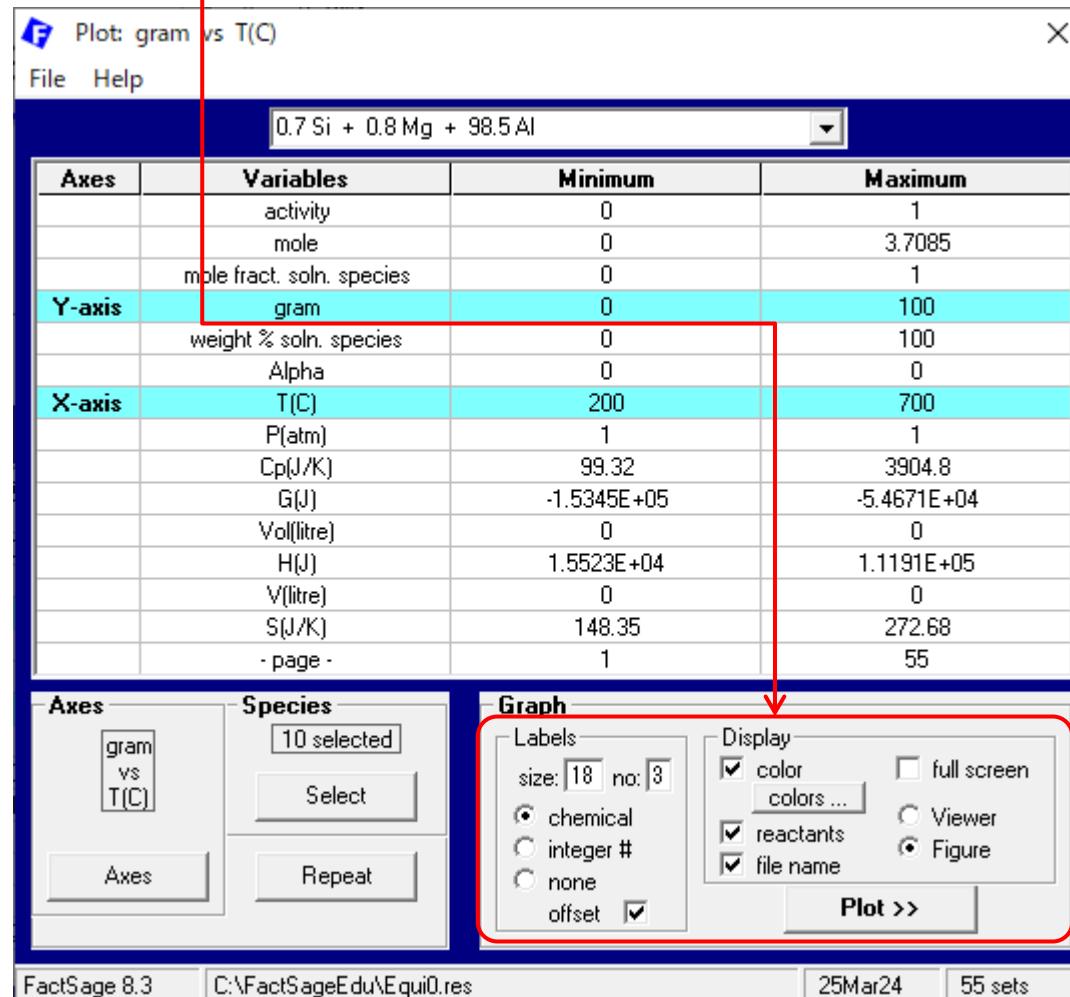
55 pages

[page] にチェックを入れると、最小値、最大値をとるページ番号が表示される

5. OK をクリック

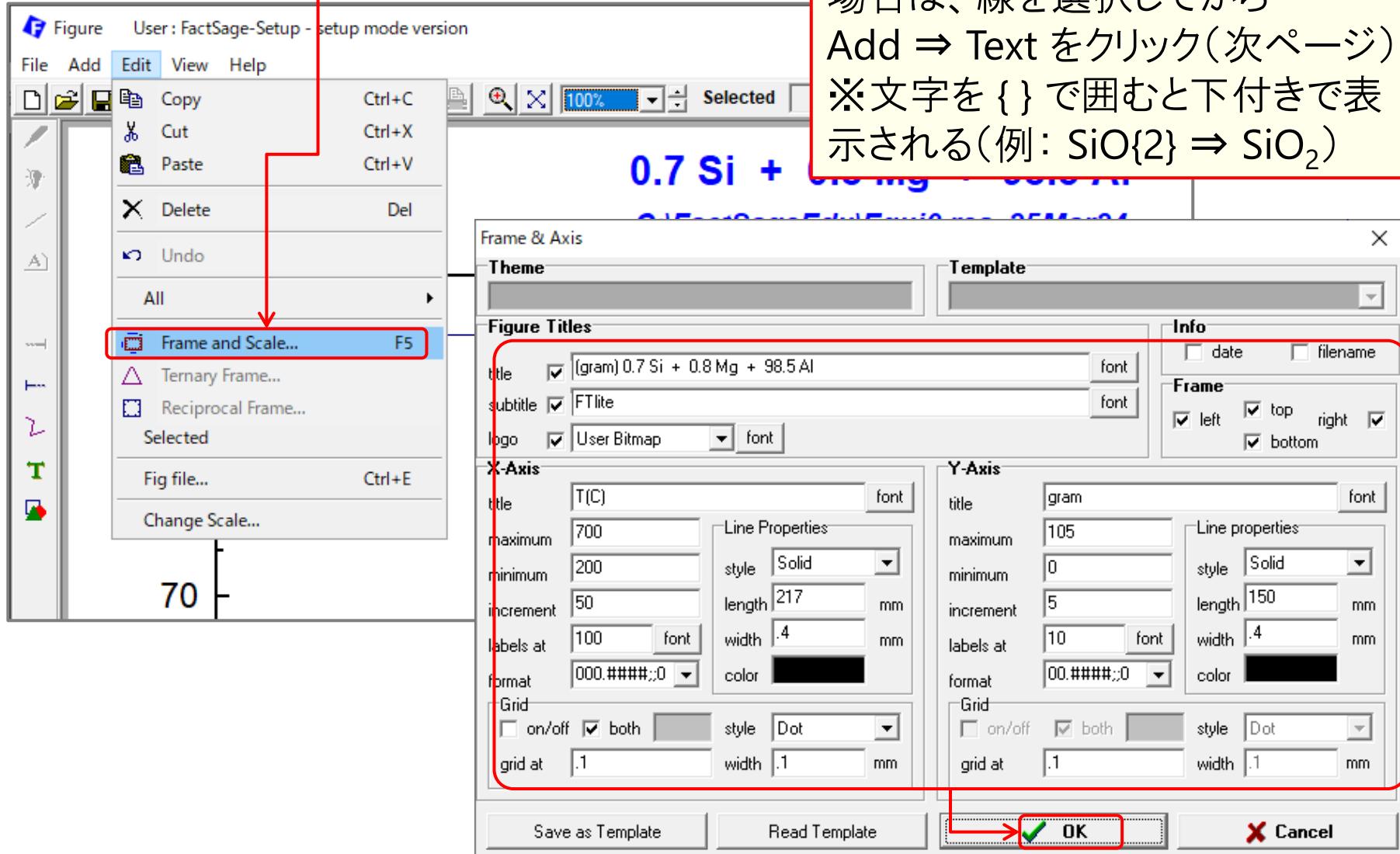
# アルミニウム合金の平衡計算(グラフの作成)

## 6. ラベルとグラフ画面の設定をして Plot をクリック



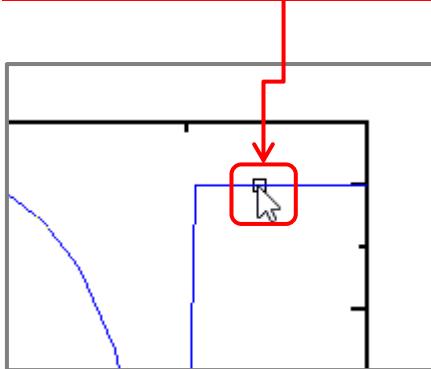
# アルミニウム合金の平衡計算(グラフの作成)

## 7. 枠と軸の設定画面を開いて編集

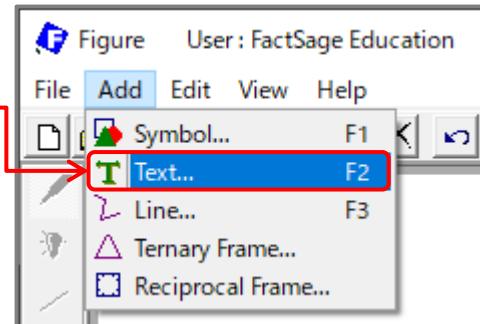


# アルミニウム合金の平衡計算(グラフの作成)

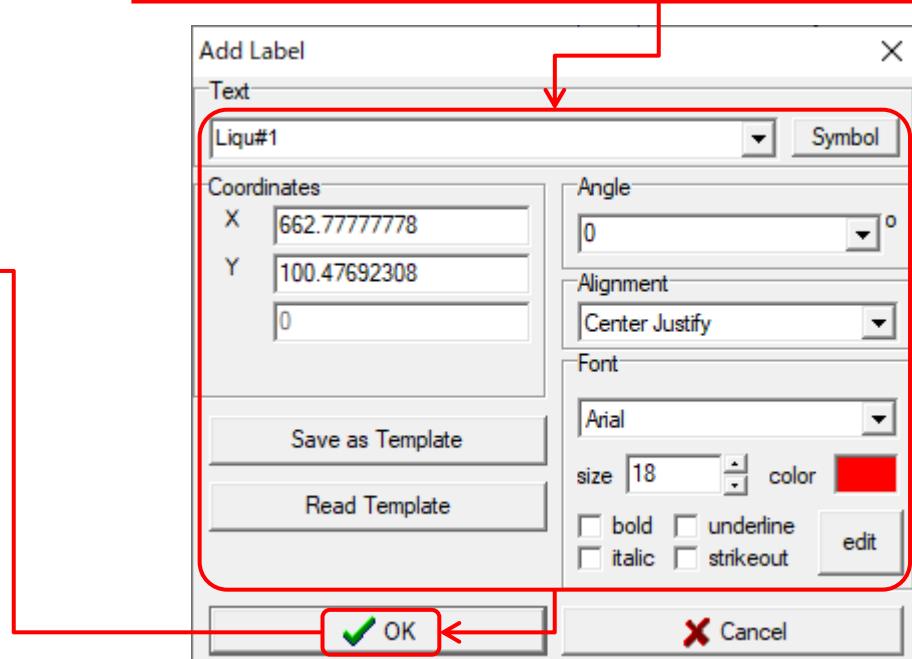
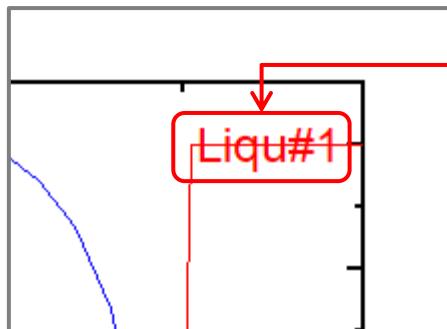
(1) 線をクリックして選択  
⇒ 色が変化する



(2) Add ⇒ Text  
を選択



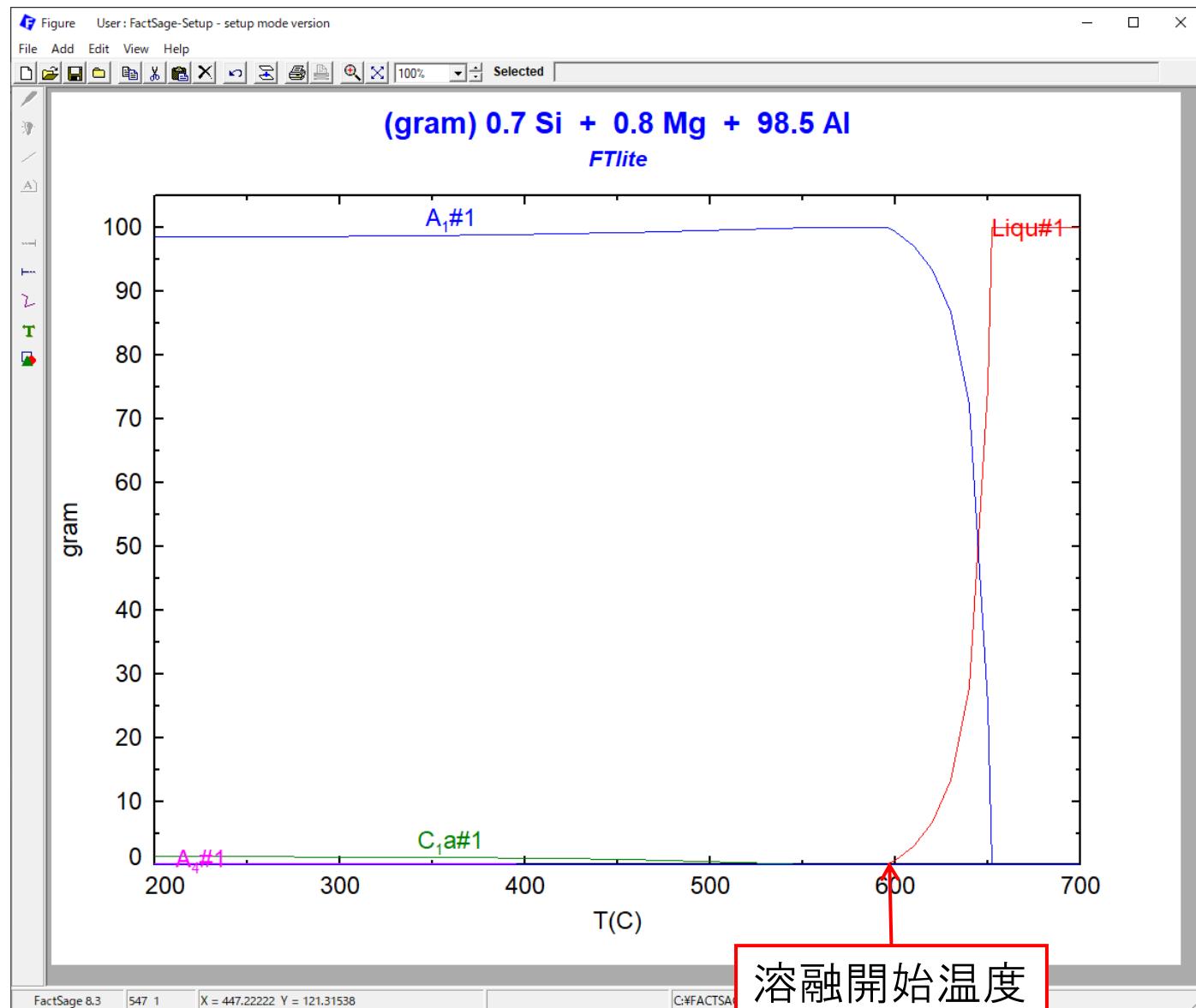
(3) 文字の位置、色、大きさなどを設定して OK  
をクリック。テキストを {} で囲むと下付きになる



# アルミニウム合金の平衡計算(グラフの作成)

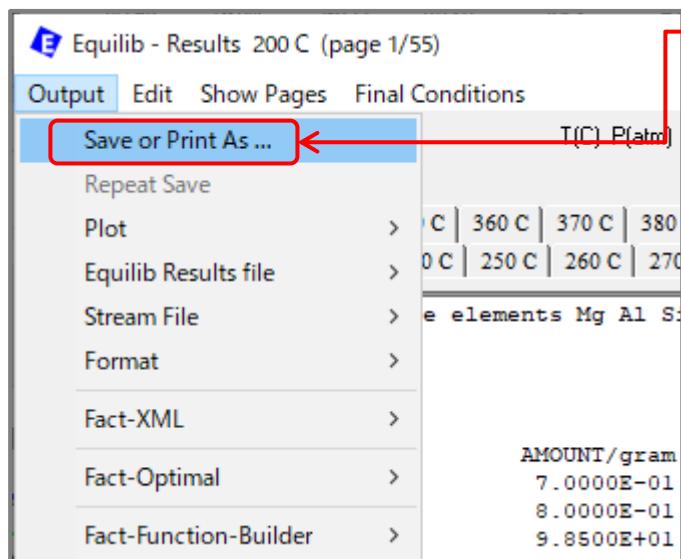
## 8. 見やすくなる ように仕上げる。

- ラベルの移動:  
マウスの右ボタンでドラッグ & ドロップ
- ラベルの色: ラベルを右クリック ⇒ Edit
- 線の色: 線を右クリック ⇒ Edit

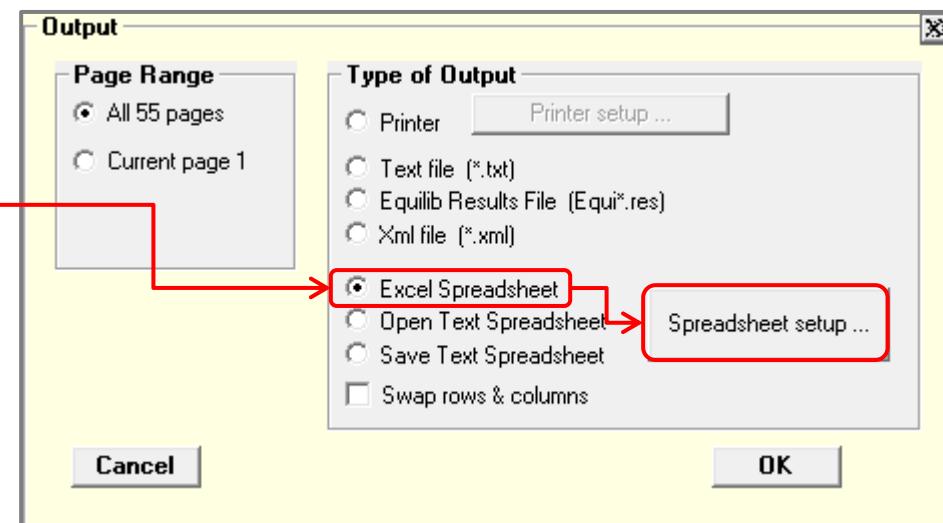


# アルミニウム合金の平衡計算(Excel 形式に保存)

## ■ 計算結果を Excel 形式で保存する



1. 結果画面(Results Window)で  
Save or Print As... をクリック



2. Excel Spreadsheet を選択して  
Spreadsheet setup ... をクリック

# アルミニウム合金の平衡計算(Excel 形式に保存)

Column - 1 -

Insert New Column - 1 -

Delete Column - 1 -

-Page-

Alpha

T(C) (4)

P(atm)

Vol(litre)

H(J)

G(J)

V(litre)

S(J/K)

Cp(J/K)

Y (6)

log(Y)

In(Y)

exp(Y)

1/Y

Column - 1 -

Mol - moles

g - grams (5)

a - activity

X - mole fraction

Wt% - weight per cent

H(J) - enthalpy

G(J) - Gibbs energy

S(J/K) - entropy

Cp(J/K) - heat capacity

Y

log(Y)

In(Y)

exp(Y)

4. クリックして  
項目一覧を表示  
⇒ T(C) を選択

3. 表示項目数を設定  
(系に関する量)

Spreadsheet Setup

System Properties

Property columns 1 (3)

Column: T(C) Variable: T(C) (4)

Species Properties

Columns per species 1 (5)

order species  order props.  (5)

Column: - 1 - Variable: g (6)

Select ... (7)

Species: 0

Cancel

Default

OK

5. 表示項目数を設定  
(化学種の量)

6. クリックして  
項目一覧を表示  
⇒ grams を選択

7. Select ... をクリック  
して化学種の選択(次ページ)

# アルミニウム合金の平衡計算(Excel 形式に保存)

## 化学種の選択

8. Excel に保存する物質を選択。安定相のみ選択をしたい場合は Select all stable phases をクリック

Spreadsheet - Equilib Page 55/55 : T(C) = 700, P(atm) = 1

Select Stable

Selected: 4/157

Select all stable phases

Select stable pure liquids  
Select stable pure solids  
Select stable solution phases

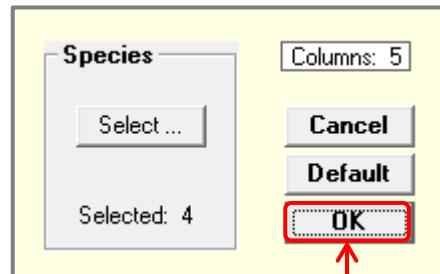
	Activity	Minimum	Maximum
1.1252E-27	1.4647E-38 [1]	2.0743E-18 [37]	
1.000	0.2555	1.000	
1.000	0.2555	1.000	
0.9342	0.9342	1.000	
0.9342	0.9342	1.000	
0.9342	0.9342	1.000	
0.4815	0.1377	0.4832	
0.4815	0.1377	0.4832	
0.5919	0.3085	0.6117	
0.5919	0.3085	0.6117	
1.9793E-02	1.9793E-02	1.000	
1.9793E-02	1.9793E-02	1.000	
3.9323E-23	2.0959E-27	2.6770E-15	
3.7161E-23	2.0959E-27	2.3073E-15	
5.2350E-04	5.2350E-04	1.000	
5.2350E-04	5.2350E-04	1.000	
1.9978E-05	1.9978E-05	1.000	
2.8859E-03	2.8859E-03	0.3049	
2.8859E-03	2.8859E-03	0.3049	
5.1893E-03	5.1893E-03	7.5795E-02	
1.4166E-06	1.4166E-06	2.1630E-02	
8.6401E-03	1.6574E-03	4.4512E-02	
8.6401E-03	1.6574E-03	4.4512E-02	
0.4892	0.3555	0.6006	
0.4892	0.3555	0.6006	
2.0898E-23	1.8404E-31	3.8647E-15	
All Elements	FTlite-Liqu#1		
All Elements	FTlite-Liqu#2		

'+' denotes all the Species Properties as defined in the Spreadsheet Setup.

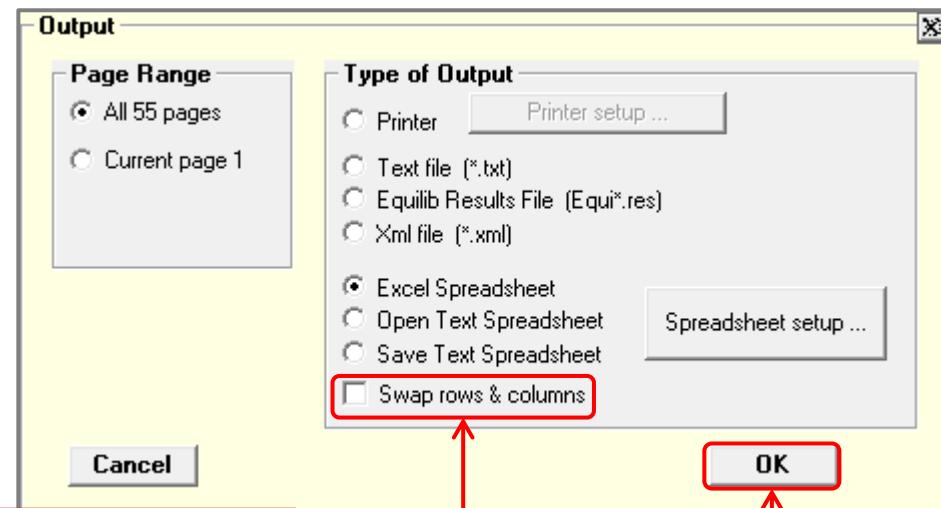
Select All      Clear      OK

溶体相の構成元素のこと

# アルミニウム合金の平衡計算(Excel 形式に保存)



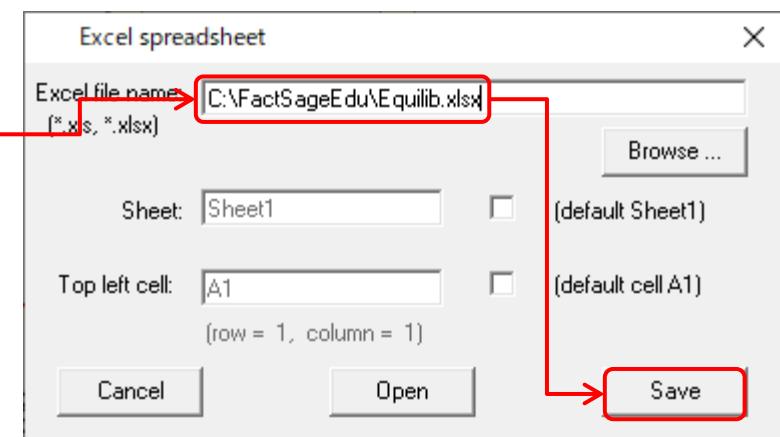
9. OK をクリック



10. OK をクリック

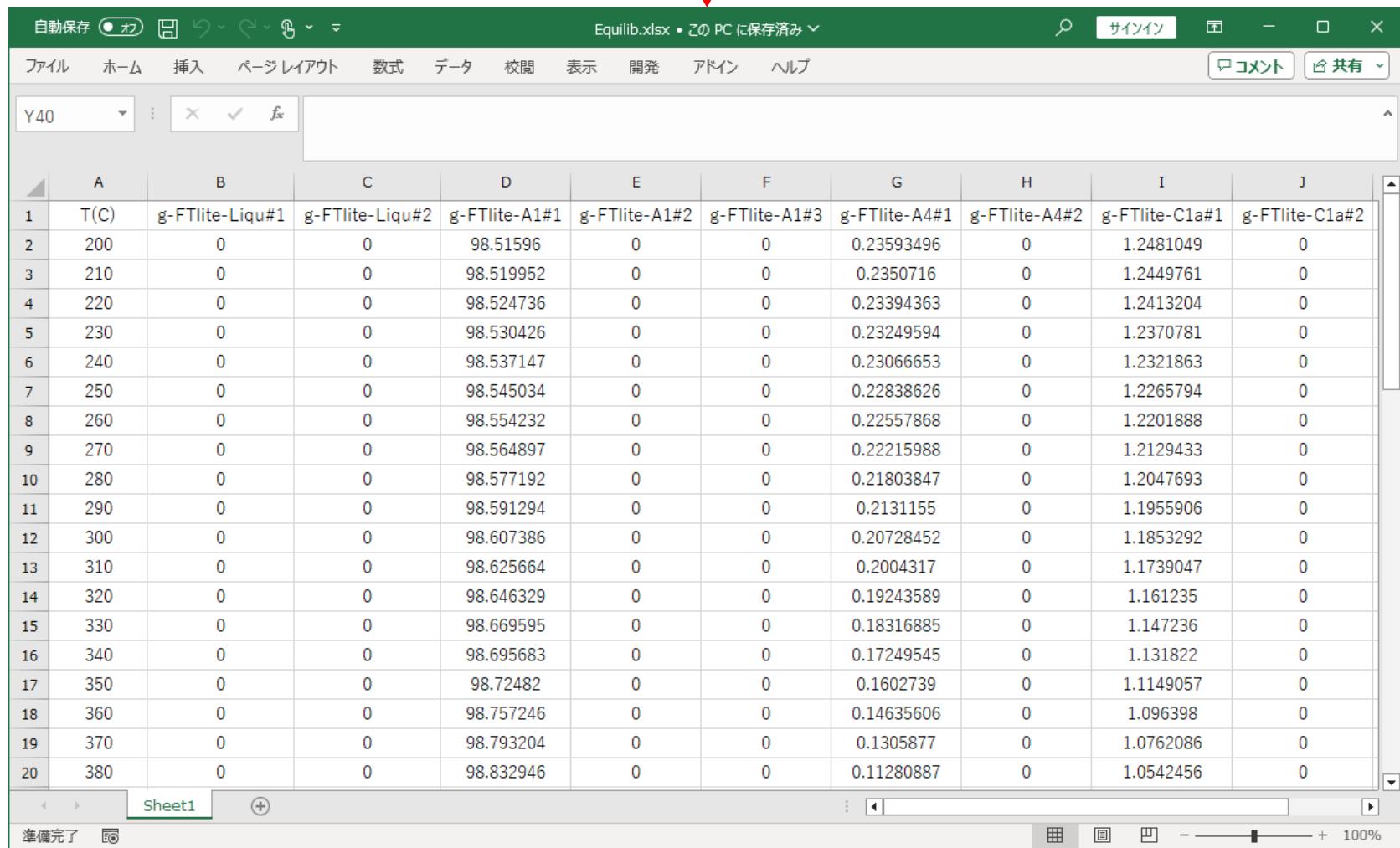
出力する化学種が多いときは、行と列を入れ替えることがある

11. 保存先を入力して Save をクリック。  
Open をクリックして開いてもよいだろう。  
ファイル名の拡張子を .xlsx にしてもよい。  
保存先のフォルダーナンバーとファイル名は英  
数字にすること



# アルミニウム合金の平衡計算(Excel 形式に保存)

## 12. 保存したファイルを開いて確認



The screenshot shows a Microsoft Excel spreadsheet titled "Equilib.xlsx" with the status bar indicating "この PC に保存済み". The table consists of 20 rows and 10 columns. The columns are labeled A through J. The first row contains labels for the columns: T(C), g-FTlite-Liqu#1, g-FTlite-Liqu#2, g-FTlite-A1#1, g-FTlite-A1#2, g-FTlite-A1#3, g-FTlite-A4#1, g-FTlite-A4#2, g-FTlite-C1a#1, and g-FTlite-C1a#2. The data rows show values for temperature (T) from 200 to 380 and various equilibrium constants or fractions for different phases.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	T(C)	g-FTlite-Liqu#1	g-FTlite-Liqu#2	g-FTlite-A1#1	g-FTlite-A1#2	g-FTlite-A1#3	g-FTlite-A4#1	g-FTlite-A4#2	g-FTlite-C1a#1	g-FTlite-C1a#2
2	200	0	0	98.51596	0	0	0.23593496	0	1.2481049	0
3	210	0	0	98.519952	0	0	0.2350716	0	1.2449761	0
4	220	0	0	98.524736	0	0	0.23394363	0	1.2413204	0
5	230	0	0	98.530426	0	0	0.23249594	0	1.2370781	0
6	240	0	0	98.537147	0	0	0.23066653	0	1.2321863	0
7	250	0	0	98.545034	0	0	0.22838626	0	1.2265794	0
8	260	0	0	98.554232	0	0	0.22557868	0	1.2201888	0
9	270	0	0	98.564897	0	0	0.22215988	0	1.2129433	0
10	280	0	0	98.577192	0	0	0.21803847	0	1.2047693	0
11	290	0	0	98.591294	0	0	0.2131155	0	1.1955906	0
12	300	0	0	98.607386	0	0	0.20728452	0	1.1853292	0
13	310	0	0	98.625664	0	0	0.2004317	0	1.1739047	0
14	320	0	0	98.646329	0	0	0.19243589	0	1.161235	0
15	330	0	0	98.669595	0	0	0.18316885	0	1.147236	0
16	340	0	0	98.695683	0	0	0.17249545	0	1.131822	0
17	350	0	0	98.72482	0	0	0.1602739	0	1.1149057	0
18	360	0	0	98.757246	0	0	0.14635606	0	1.096398	0
19	370	0	0	98.793204	0	0	0.1305877	0	1.0762086	0
20	380	0	0	98.832946	0	0	0.11280887	0	1.0542456	0

# 物性値の推算、高圧の平衡状態

熱伝導率や粘度などの物性値を推算するときは、Menu 画面で use V and phys. property data を選択する。データが収録されている一部の物質については、体積データが考慮された平衡計算が行われて、熱伝導率や粘度などの物性値が出力される。

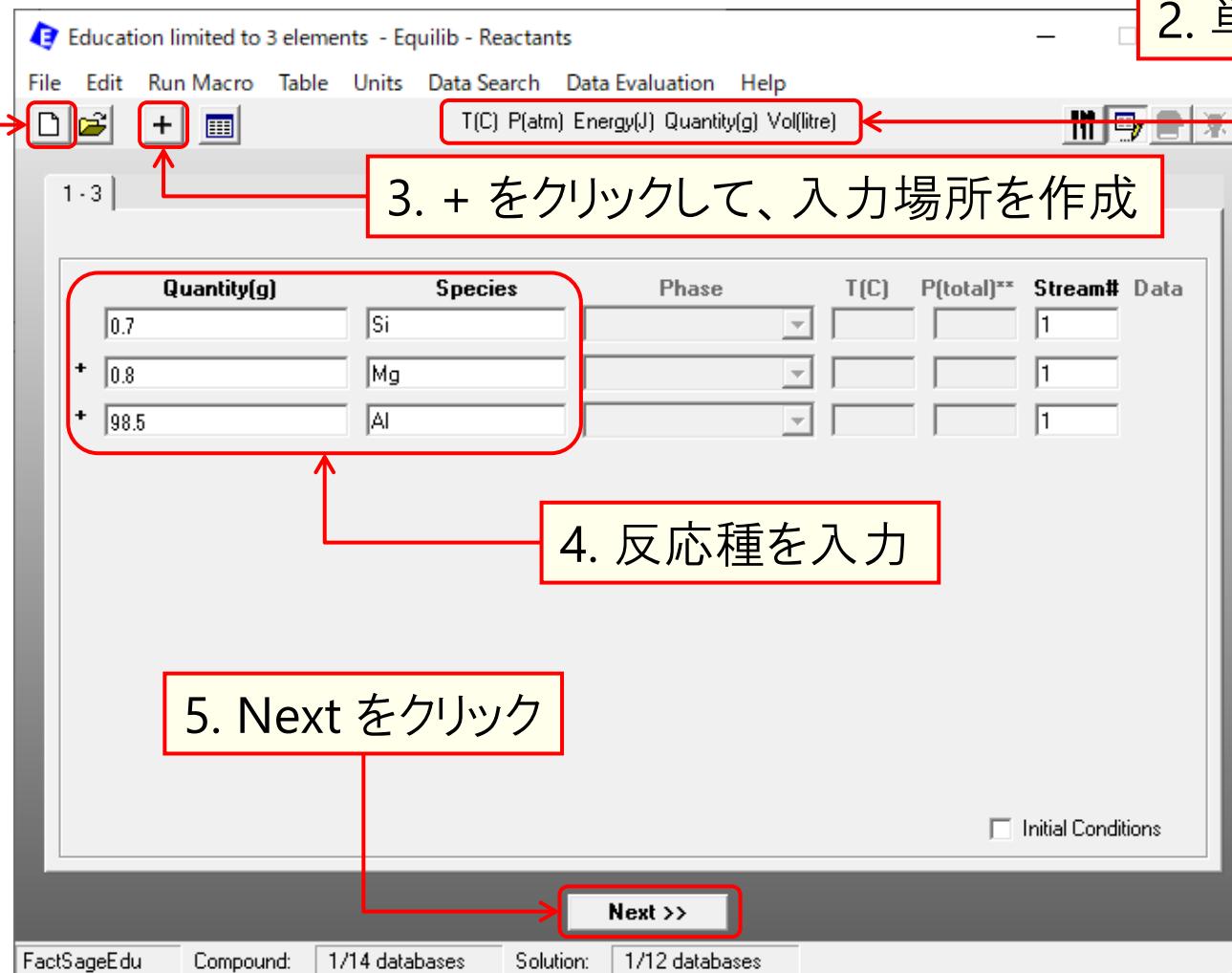
高圧条件では、固相と液相について、体積に関するデータ(密度、熱膨張率など)を考慮すべきである。

数 atm では体積の影響は非常に小さい。体積に関するデータを考慮しないほうが一般的には解は求まりやすいので、考慮しないことのほうがが多いだろう。

# 物性値の推算、高圧の平衡状態

## ■ アルミニウム合金の物性値を推算する

1. 新規設定 ⇒ はい ⇒ いいえ ⇒ FTlite を選択



# 物性値の推算、高圧の平衡状態

6. 平衡状態で存在する可能性のある物質を選択する。今は Liquid と FCC-A1 が存在することが事前の計算でわかっているとして、この 2 つのみ選択する

7. 体積データを考慮する。  
物性値を推算する

8. 溫度、圧力を設定

9. Calculate をクリック

The screenshot shows the FactSageEdu software interface for equilibrium calculations. The main window displays the following sections:

- Reactants (3):** Shows input as [gram] 0.7 Si + 0.8 Mg + 98.5 Al.
- Products:** Shows compound species (gas, ideal, real) and solution phases. The 'Base-Phase' column lists FTlite-Liqu, FTlite-A1, FTlite-A2, FTlite-A3, FTlite-A4, DIAM-A4 Prototype-C, FTlite-A12, C14 Prototype-MgZn2, and C14 Prototype-CaF2. The 'Full Name' column lists Liquid, FCC-A1, BCC-A2, HCP-A3, DIAM-A4 Prototype-C, CBCC-A12 Prototype-Mn, aC1 Prototype-CaF2, and C14 Prototype-MgZn2.
- Target:** Set to 'none'. Fields include Estimate T(K): 1000 and Quantity(g): 0.
- Final Conditions:** Set to <A> and <B>. Fields include T(C): 650 and P(atm): 13000.
- Custom Solutions:** Options for fixed activities, ideal solutions, and pseudonyms.
- Pseudonyms:** Options for applying pseudonyms and editing them.
- Volume and physical prop data:** Options for assuming molar volumes or using only molar volume data. The 'use V & phys. property data' option is selected.
- Total Sp, Total Sg, Total Ph:** Buttons for total species, total solid, and total phase selection.
- Equilibrium:** Options for normal, normal + transitions, transitions only, and open. A note indicates no time limit. The 'Calculate >>' button is highlighted.

# 物性値の推算、高圧の平衡状態

1 atm の場合

体積データの有無

- V: 有(圧力依存性が考慮されている)
- 無印: 有(圧力依存性は考慮されてなく一定値)
- O: 無

PHASE: Liquid#1(;#2)

	EQUIL AMOUNT	MASS FRACTION	ACTIVITY
Al	V 7.3517E+01	9.8118E-01	9.8089E-01
Mg	V 7.3239E-01	9.7746E-03	6.5418E-03
Si	V 6.7760E-01	9.0434E-03	1.6811E-03
TOTAL:	7.4927E+01	1.0000E+00	1.0000E+00
System component	Amount/mol	Amount/gram	Mole fraction Mass fraction
Si	2.4126E-02	0.67760	8.6817E-03 9.0434E-03
Al	2.7247	73.517	0.98048 0.98118
Mg	3.0133E-02	0.78239	1.0843E-02 9.7746E-03

Viscosity/Pa.s = 1.2449E-03  
Surface tension/N.m-1 = 1.0973

PHASE: FCC-Al#1(;#2;#3)

	EQUIL AMOUNT	MASS FRACTION	ACTIVITY
Al	V 2.4983E+01	9.9641E-01	9.9611E-01
Mg	V 6.7614E-02	2.6967E-03	4.2319E-03
Si	V 2.2401E-02	8.9346E-04	5.9562E-04
TOTAL:	2.5073E+01	1.0000E+00	1.0000E+00
System component	Amount/mol	Amount/gram	Mole fraction Mass fraction
Si	7.9761E-04	2.2401E-02	8.5811E-04 8.9346E-04
Al	0.92592	24.983	0.99615 0.99641
Mg	2.7819E-03	6.7614E-02	2.9929E-03 2.6967E-03

\*\*\*\*\*  
Cp J.K-1 H J S J.K-1 G J \*\*\*\*\*  
3.903310E+03 +02 -1 399774E+05 V dm3  
\*\*\*\*\*  
Cp J.K-1 J J J.K-1 G J \*\*\*\*\*  
3.680771E+03 7.953291E+04 2.001250E+02 -1.052125E+05 V Density dm3 g.cm-3 Thermal exp Bulk modulus Cv Grueneisen K-1 bar J.K-1 \*\*\*\*\*  
Liquid#1 3.680771E+03 7.953291E+04 2.001250E+02 -1.052125E+05 3.152612E-02 2.376675E+00 1.180263E-04 0.000000E+00 0.000000E+00 0.000000E+00  
FCC-Al#1 2.225391E+02 1.657663E+04 5.561559E+01 -3.476490E+04 9.829087E-03 2.550863E+00 1.085156E-04 0.000000E+00 0.000000E+00 0.000000E+00  
System density/g.cm-3 = 2.4181

# 物性値の推算、高圧の平衡状態

3000 atm の場合

1 atm - 3000 atm -

```
FactSageEdu limited to the elements Mg Al Si
T = 650 C
P = 3000 atm
V = 3.9683E-02 dm3

STREAM CONSTITUENTS          AMOUNT/gram
Si                          7.0000E-01
Mg                          8.0000E-01
Al                           9.8500E+01

EQUIL AMOUNT   MASS FRACTION   ACTIVITY
PHASE: FCC-Al#1(;#2;#3)      gram
Al                           V  8.5087E+01   9.9157E-01   9.9113E-01
Mg                           V  4.7739E-01   5.5633E-03   8.5857E-03
Si                           V  2.4566E-01   2.8629E-03   1.9039E-03
TOTAL:                      8.5810E+01   1.0000E+00   1.0000E+00
System component             Amount/mol   Amount/gram   Mole fraction   Mass fraction
Si                           8.7469E-03   0.24566   2.7490E-03   2.8629E-03
Al                           3.1535       85.087     0.99108     0.99157
Mg                           1.9642E-02   0.47739   6.1729E-03   5.5633E-03

PHASE: Liquid#1(;#2)         gram
MASS FRACTION   ACTIVITY
Al                           V  1.3413E+01   9.4525E-01   9.4691E-01
Mg                           V  3.2261E-01   2.2735E-02   1.2908E-02
Si                           V  4.5434E-01   3.2018E-02   5.8097E-03
TOTAL:                      1.4190E+01   1.0000E+00   1.0000E+00
System component             Amount/mol   Amount/gram   Mole fraction   Mass fraction
Si                           1.6177E-02   0.45434   3.0721E-02   3.2018E-02
Al                           0.49713      13.413     0.94407     0.94525
Mg                           1.3274E-02   0.32261   2.5207E-02   2.2735E-02

Viscosity/Pa.s = 1.2512E-03
Surface tension/N.m-1 = 1.0533
*****
Cp          H          S          G          V
J.K-1       J          J.K-1      J          dm3
*****
4.843735E+02  8.318093E+04  2.285034E+02  -1.277620E+05  3.968293E-02
*****
Cp          H          S          G          V          Density      Thermal exp    Bulk modulus   Cv          Grueneisen
J.K-1       J          J.K-1      J          dm3        g.cm-3      K-1          bar        J.K-1
*****
Liquid#1
2.472320E+02  1.689697E+04  3.837556E+01  -1.852943E+04  5.984674E-03  2.371091E+00  1.185548E-04  0.000000E+00  0.000000E+00  0.000000E+00
FCC-Al#1
2.371415E+02  6.628396E+04  1.901279E+02  -1.092326E+05  3.369825E-02  2.546417E+00  1.083296E-04  0.000000E+00  0.000000E+00  0.000000E+00
System density/g.cm-3 = 2.5200
```

高圧になると、体積は小さくなり、液相の量は小さくなる。

## ● 練習

assume molar volumes of solids and liquids = 0 で計算して、1 atm と 3000 atm で結果が同じになることを確認してほしい

---

## 5. 状態図計算 (Phase Diagram)

# Phase Diagram

Phase Diagram は、熱力学データベースを使って、多成分系の平衡状態図を作成するモジュール(アプリ)である。

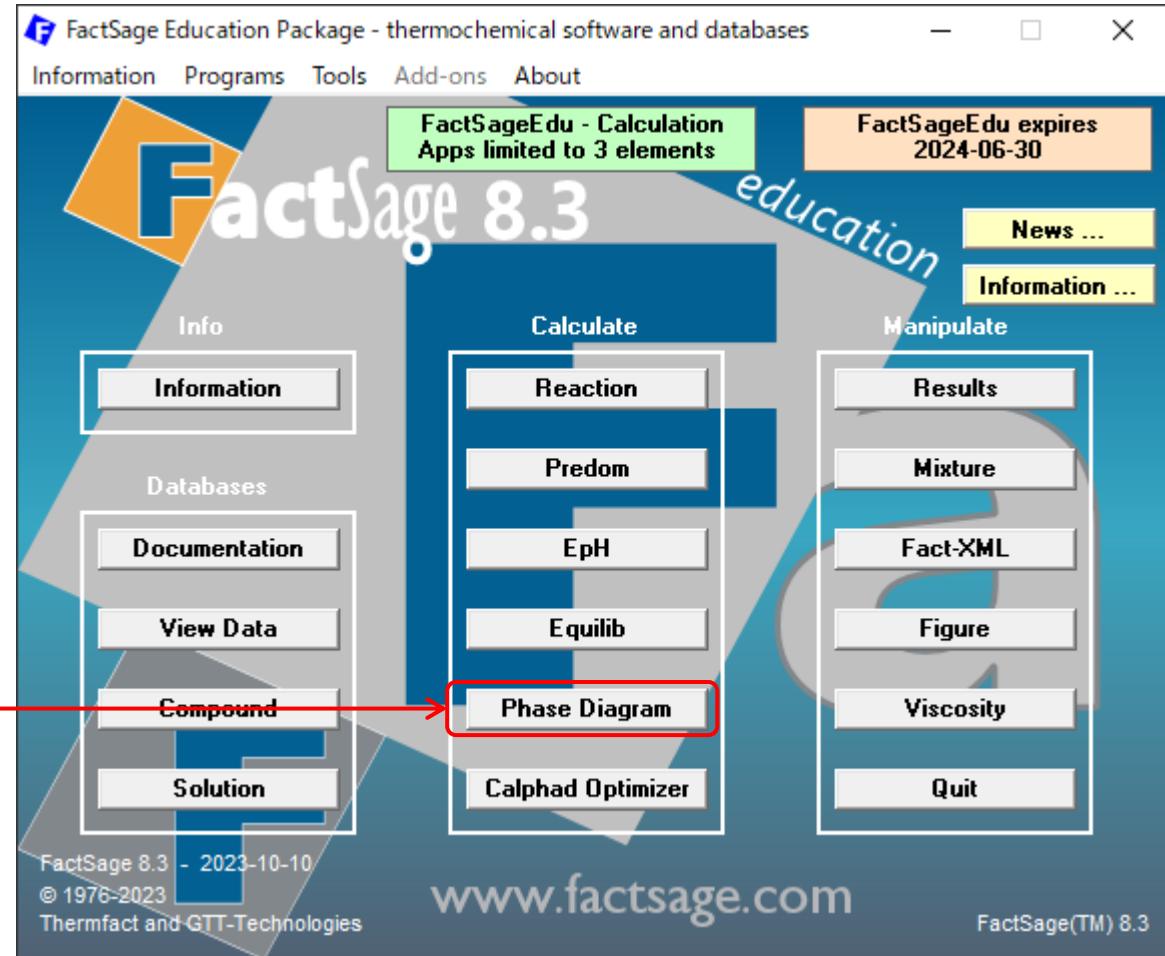
Equilib と同様に、Database Documentation を参考にして、「**平衡状態で存在する可能性のある物質**」を適切に選ぶこと。

溶体相の選択にあたっては、Database Documentation が参考になる。

Phase Diagram を使うと、4 成分系以上の状態図(成分量を固定する必要あり)、擬二成分系の状態図、水溶液の状態図、エンタルピー変化の状態図等、さまざまな状態図を作成できる。

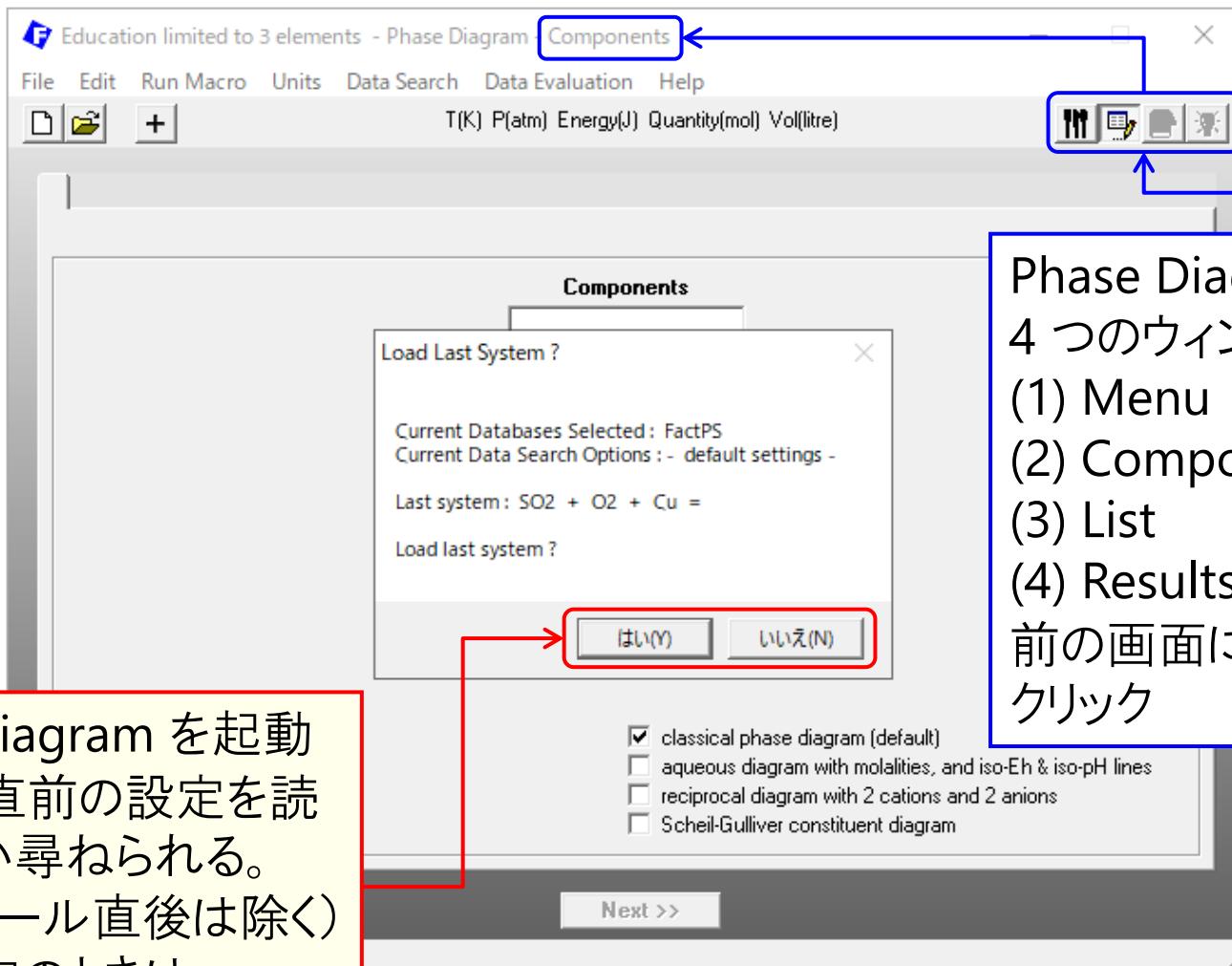
# Phase Diagram

- 状態図計算
- 純物質データベースと溶体データベースを利用



Phase Diagram の起動

# Phase Diagram の起動



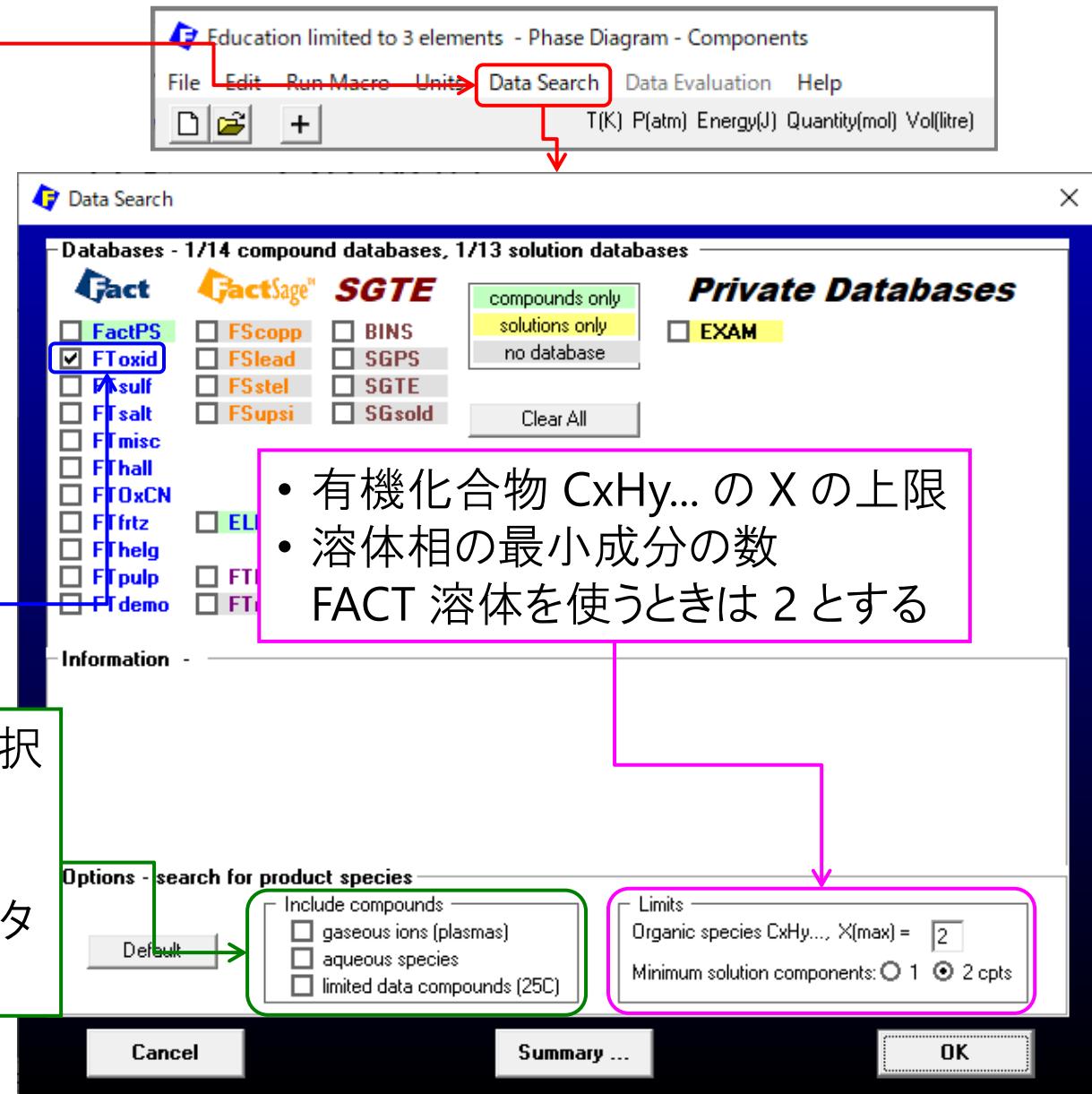
Phase Diagram を起動すると、直前の設定を読み込むか尋ねられる。  
(インストール直後は除く)  
新規設定のときは、「いいえ」を選択する

Phase Diagram には  
4 つのウィンドウがある。  
(1) Menu  
(2) Components  
(3) List  
(4) Results  
前の画面に戻るときに  
クリック

# 熱力学データベースの選択

Data Search をクリック

使用するデータベースを選択。少なくとも 1 つ純物質データベースを選択しなければならない。緑色背景は純物質のみ。無地はカップルで提供されているデータベース



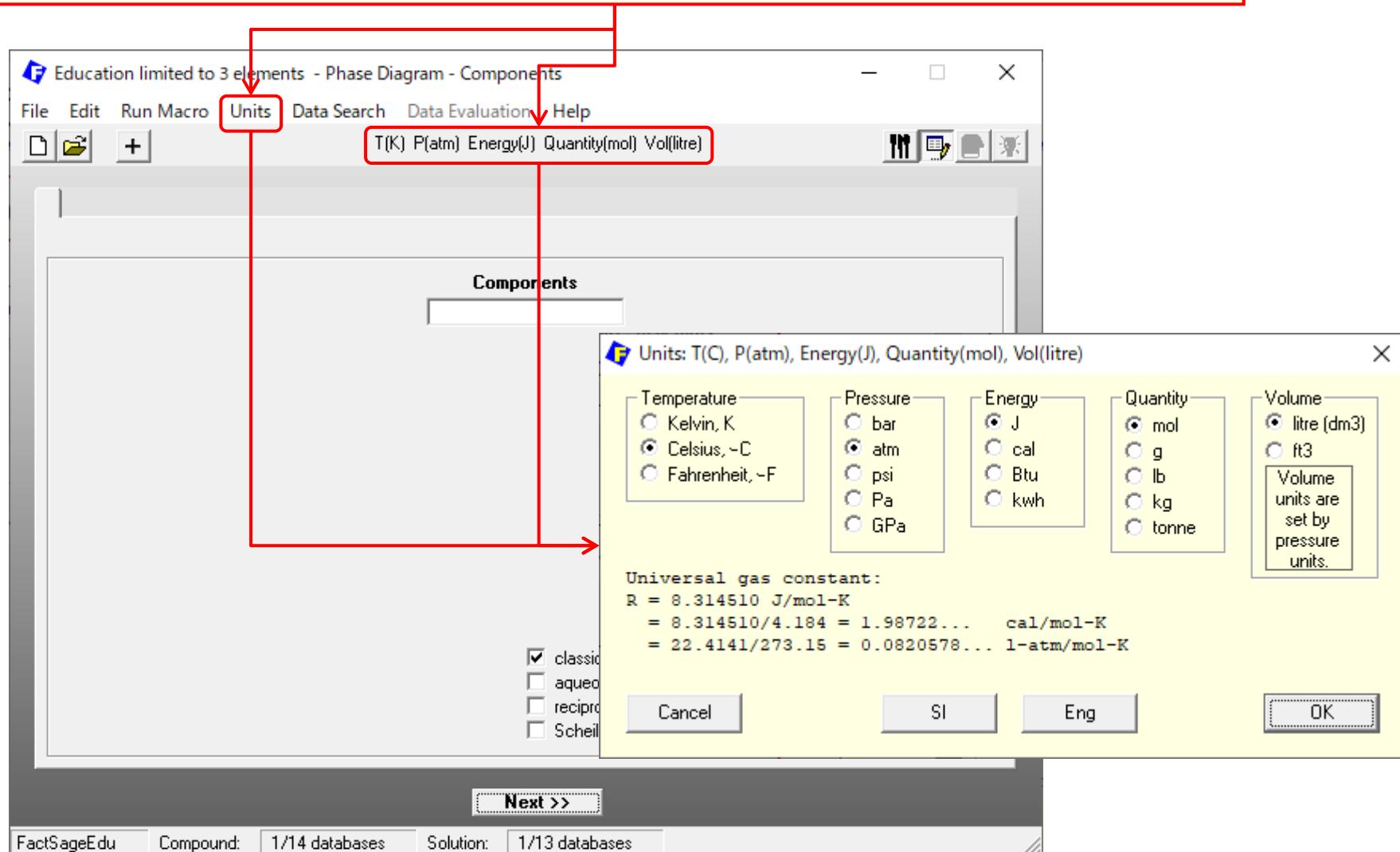
データを含めるかどうか選択

- ・プラズマ
- ・FactPS の水溶液
- ・25 °C のみしかないデータ（現在この機能は無効）

- ・有機化合物 CxHy... の X の上限
- ・溶体相の最小成分の数  
FACT 溶体を使うときは 2 とする

# 単位の設定

Units または T(C) P(atm) ... Vol(litre) をクリックして、Units 画面で設定



# CaO-SiO<sub>2</sub> 系の状態図

酸化物系の状態図計算で、Phase Diagram に慣れよう。

# CaO-SiO<sub>2</sub> 系の状態図

## ■ CaO-SiO<sub>2</sub> 系の計算状態図を作成する

1. 酸化物系なので FToxid が適していると予想できる。

Database Documentation を起動して FToxid ⇒ general description を確認

The screenshot shows a Windows application window titled "FACT oxide database - documentation - FactSage Browser - [FToxid\_Documentation.htm]". The window has a menu bar with "File", "View", and "About...". Below the menu is a toolbar with various icons. A search bar contains "Search phase diagrams: <chemical formula>" and "+ must contain: <ex: CaO>". On the left is a tree view of databases, with the "FToxid" node expanded to show "general description", "list of compounds and solutions", "description of solutions", and "phase diagrams". The main content area displays text about the database's evaluation and optimization. Two sections are highlighted with pink boxes:

**(1) Major oxide components:** Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, CaO, FeO, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO, SiO<sub>2</sub>  
All major oxide components have been fully optimized and evaluated together at all compositions. All available data for binary, ternary and quaternary sub-systems have been fully optimized [2004, 2020, 2025, 2028, 2030, 2031, 2032, 2050, 6009, 6020].

**(2) (i) Systems containing MnO, Mn<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, CoO, NiO, PbO, ZnO** with the major oxide components Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, CaO, FeO, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO, SiO<sub>2</sub>.  
Most binary and many ternary sub-systems among these components and between these components and the major oxide components have been evaluated and optimized. Particularly in the composition region of fayalite slags, extensive optimizations have been carried out [2002, 2004, 2020, 2025, 2028, 2030, 2031, 2032, 2050, 6009, 6020].

CaO, SiO<sub>2</sub> を含む系で最適化されているので  
FToxid が適していると判断できる

# CaO-SiO<sub>2</sub> 系の状態図

計算したい物質の計算状態図と、計算に用いた熱力学データベースを検索することができる。データベース選択の目安になる。ただし最適化されたデータがあっても計算状態図は収録されていない系がある。general description を参照すること

The screenshot shows the FactSage Browser interface with a search query for "CaO SiO2". The search results page displays a list of phase diagrams for various systems containing CaO and SiO<sub>2</sub>, with FToxid links provided for each.

Left pane (File Explorer):

- [SGPS] - SGTE pure substances database, list of compounds
- \*\*\*\*\*
- [FToxid] - FACT oxide database:
  - general description
  - list of compounds and solutions
  - description of solutions
  - phase diagrams
- [FTsulf] - FACT sulfide database:
- [FTsalt] - FACT salt database:
- [FTmisc] - FACT sulfide, alloy, miscellaneous databases:
- [FTOxCN] - FACT high-T oxycarbonitride database:
- [FTfrtz] - FACT fertilizer database:
- [FThall] - FACT database for Hall aluminum process:

Right pane (Search Results):

Search results for: CaO SiO<sub>2</sub>

List of Phase Diagrams:

- ZrO<sub>2</sub> - SiO<sub>2</sub> - CaO : | FToxid |
- ZrO<sub>2</sub> - SiO<sub>2</sub> - CaO : | FToxid |
- CaO - TiO<sub>2</sub> - SiO<sub>2</sub> - O<sub>2</sub> : | FToxid |
- SiO<sub>2</sub> - TiO<sub>2</sub> - CaO - O<sub>2</sub> : | FToxid |
- SiO<sub>2</sub> - TiO<sub>2</sub> - CaO - O<sub>2</sub> : | FToxid |
- CaO - SiO<sub>2</sub> - TiO<sub>2</sub> - O<sub>2</sub> : | FToxid |
- CaO - SiO<sub>2</sub> : | FToxid |
- CaO - SiO<sub>2</sub> - CaF<sub>2</sub> : | FToxid |

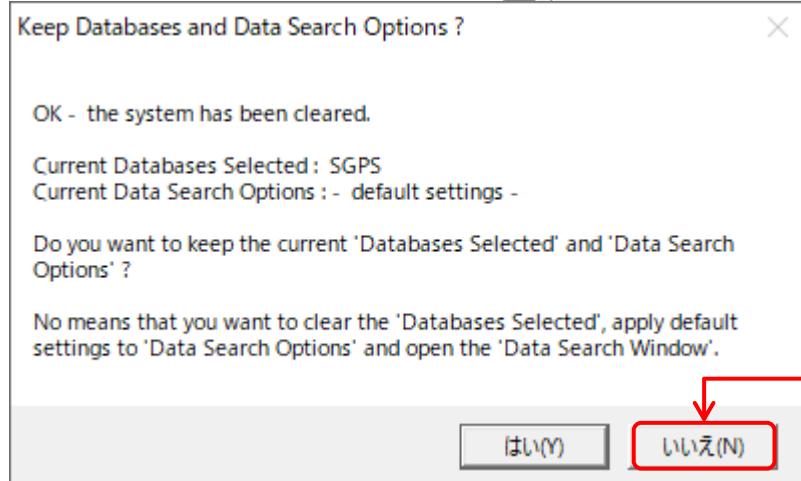
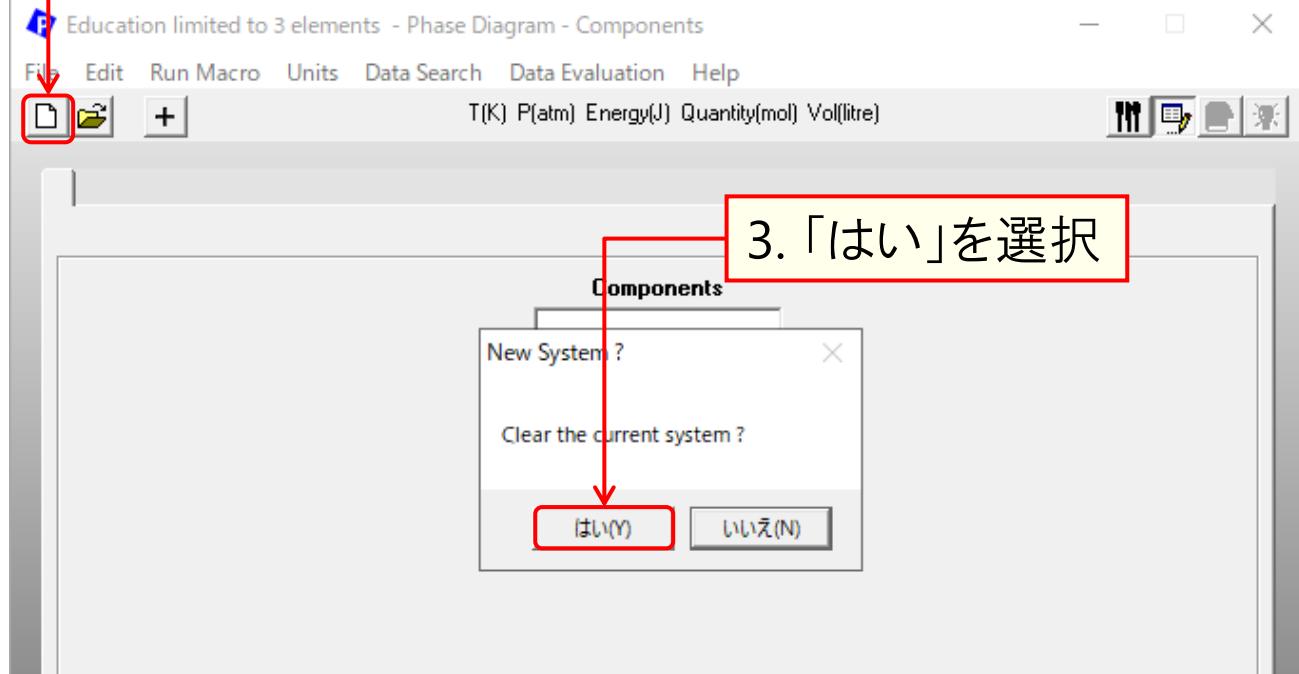
Revised: 2023/10/10

Red boxes and arrows highlight the search term "CaO SiO2" in the search bar, the "phase diagrams" link under the FToxid database, and the resulting list of phase diagrams.

FToxid が適切なことがわかる。これらの状態図は FToxid で計算されていることが確認できる。多成分系を計算するときは、各 2, 3, 4 成分の部分系のデータの有無を確認する。多成分からなる相のギブズエネルギーは各 2, 3, 4 成分部分系のデータから計算される

# CaO-SiO<sub>2</sub> 系の状態図

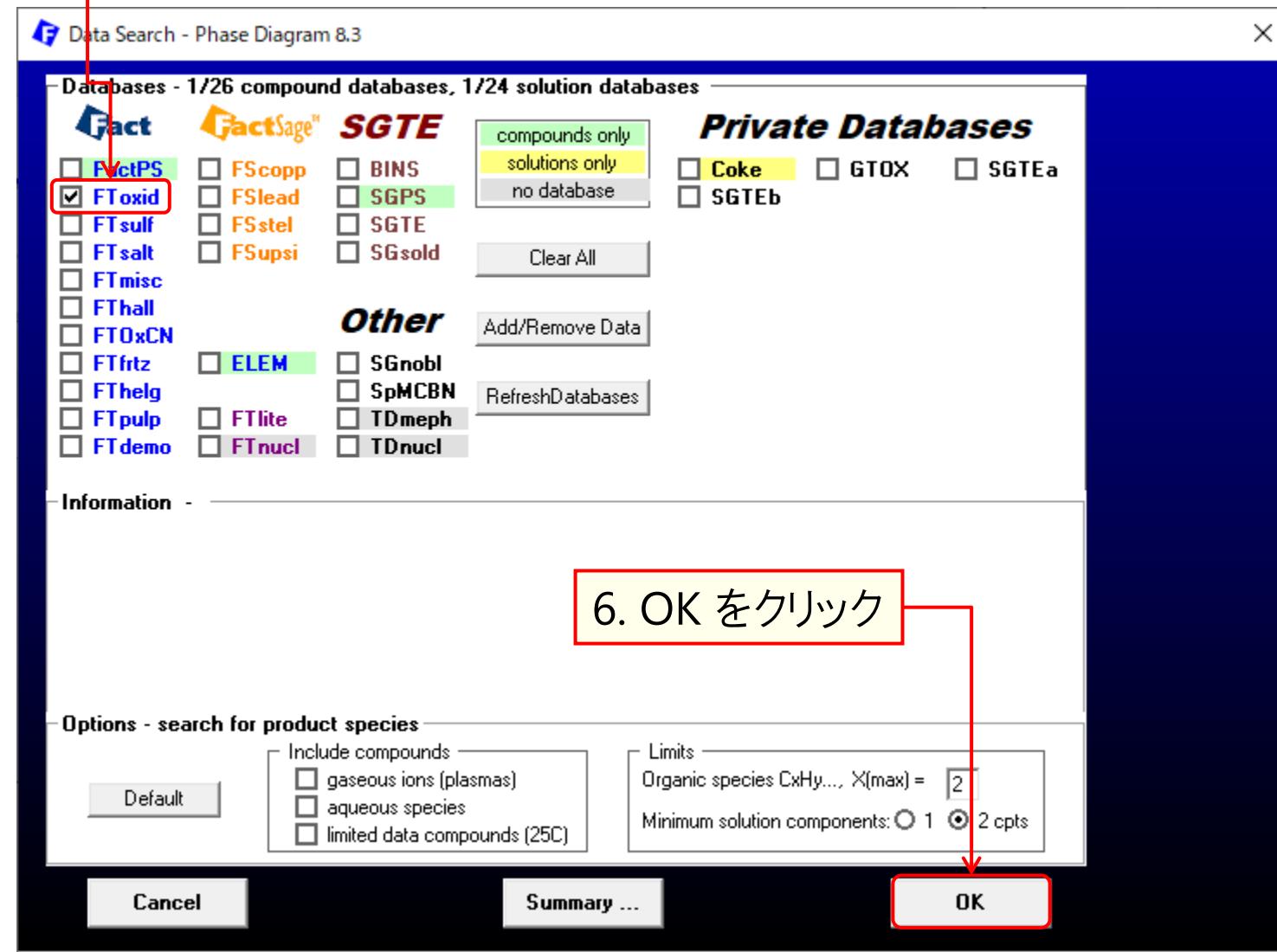
## 2. 新規設定



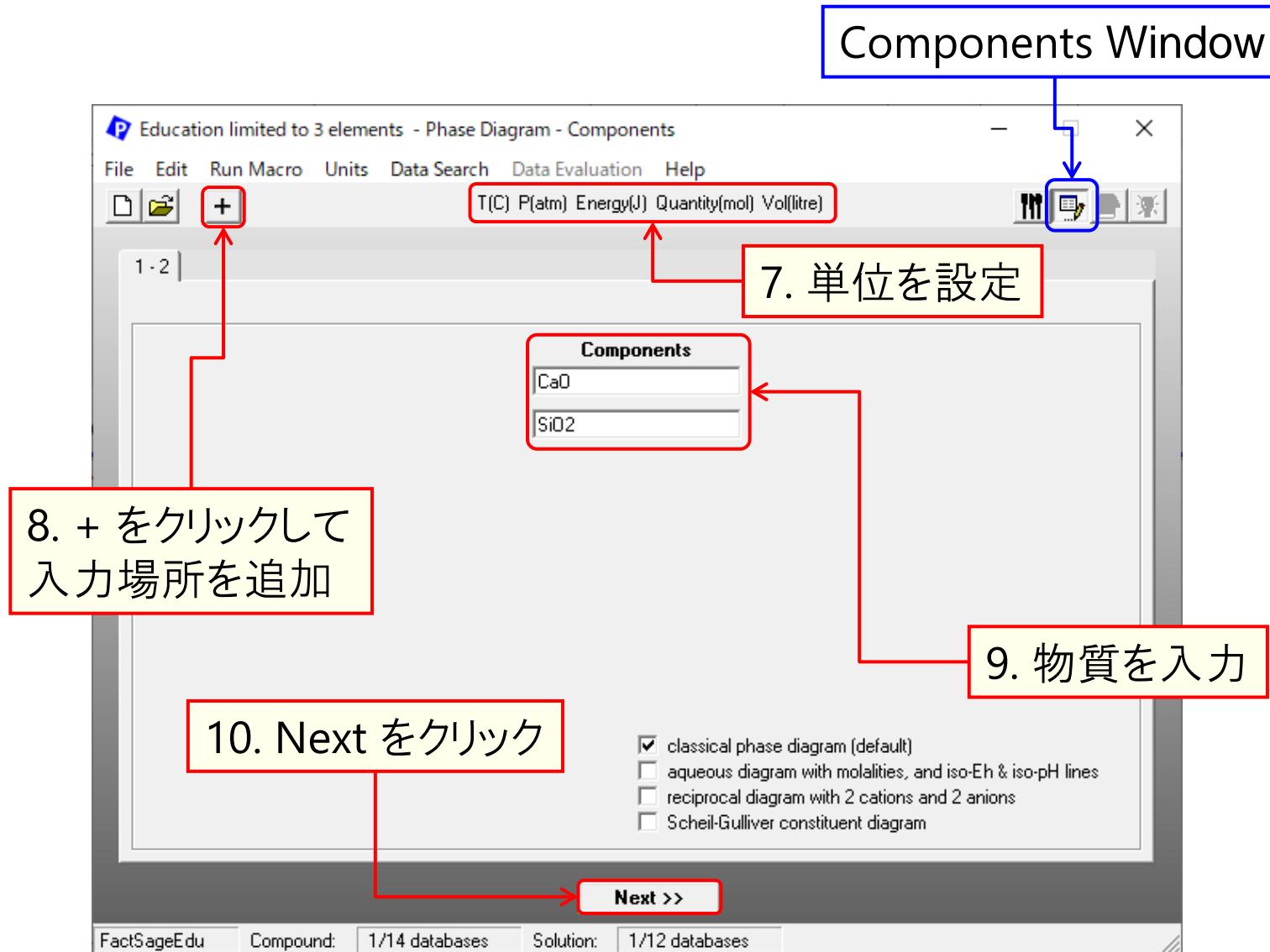
4. 热力学データベースを新規に設定するので「いいえ」を選択

# CaO-SiO<sub>2</sub> 系の状態図

## 5. FToxic を選択する



# CaO-SiO<sub>2</sub> 系の状態図



# CaO-SiO<sub>2</sub> 系の状態図

Menu Window

FactSageEdu limited to 3 elements - Phase Diagram - Menu: last system

File Units Parameters Variables Help

T(C) P(atm) Energy(J) Quantity(mol) Vol(litre)

Components (2)

Products

Compound species

gas	ideal	real	0
aqueous			0
+ pure liquids			0
+ pure solids			16
species:			16

Target

- none -

Estimate T(K): 1000

Variables

T(C)	SiO <sub>2</sub> /(CaO+SiO <sub>2</sub> )			
600 2600	0 1			
T(C) vs SiO <sub>2</sub> /(CaO+SiO <sub>2</sub> )				

Solution phases

*	+	Base-Phase	Full Name
		I	FToxic-SLAGA

Legend

I - immiscible 1

Show  all  selected

species: 4 solutions: 2 Select

Phase Diagram

Y X

- no time limit - Calculate >

11. 平衡状態で存在する可能性のある溶体相を選択

A-Slag-liq を選択すると自動的に I オプション(二相分離する可能性がある場合は必須)が設定される

12. 平衡状態で存在する可能性のある純物質を選択。溶融スラグ相を選択するので pure liquids は選択しない

13. Variables 枠内のグレーの領域または Variables をクリック(次ページ参照)

Menu Window

11. 平衡状態で存在する可能性のある溶体相を選択

A-Slag-liq を選択すると自動的に I オプション(二相分離する可能性がある場合は必須)が設定される

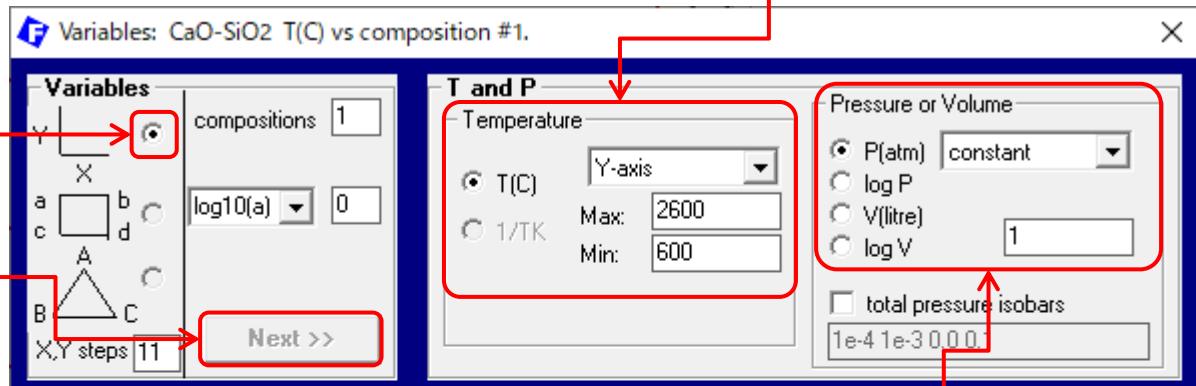
12. 平衡状態で存在する可能性のある純物質を選択。溶融スラグ相を選択するので pure liquids は選択しない

13. Variables 枠内のグレーの領域または Variables をクリック(次ページ参照)

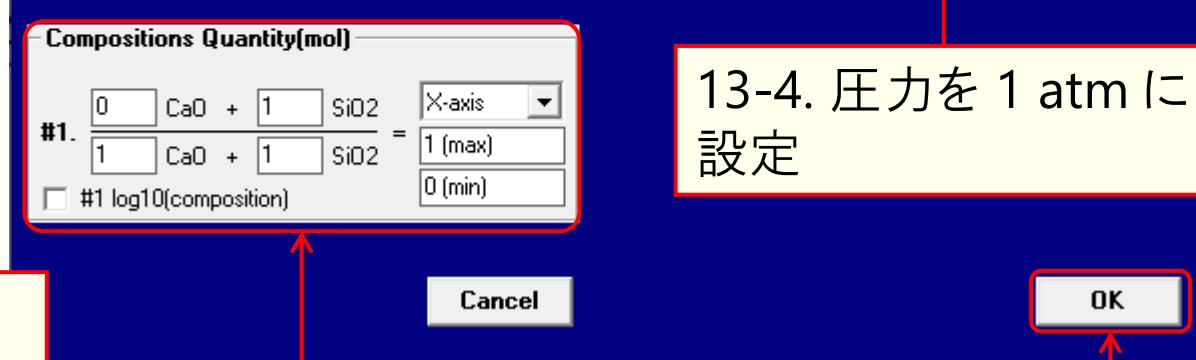
# CaO-SiO<sub>2</sub> 系の状態図

## Variables

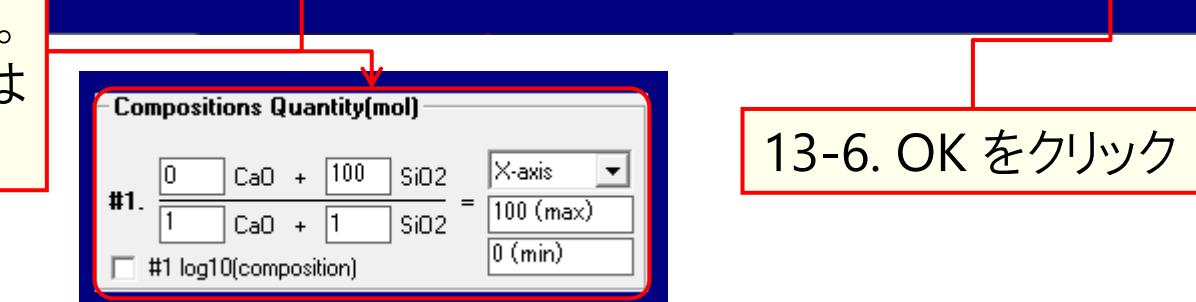
13-1. X-Y 座標系を選択



13-2. Next をクリック



13-5. SiO<sub>2</sub> のモル分率をX 軸に設定(範囲: 0~1)。  
モル%で設定したい場合は両辺を 100 倍する



13-3. 温度を Y 軸に設定  
(範囲: 600 ~ 2600 °C)

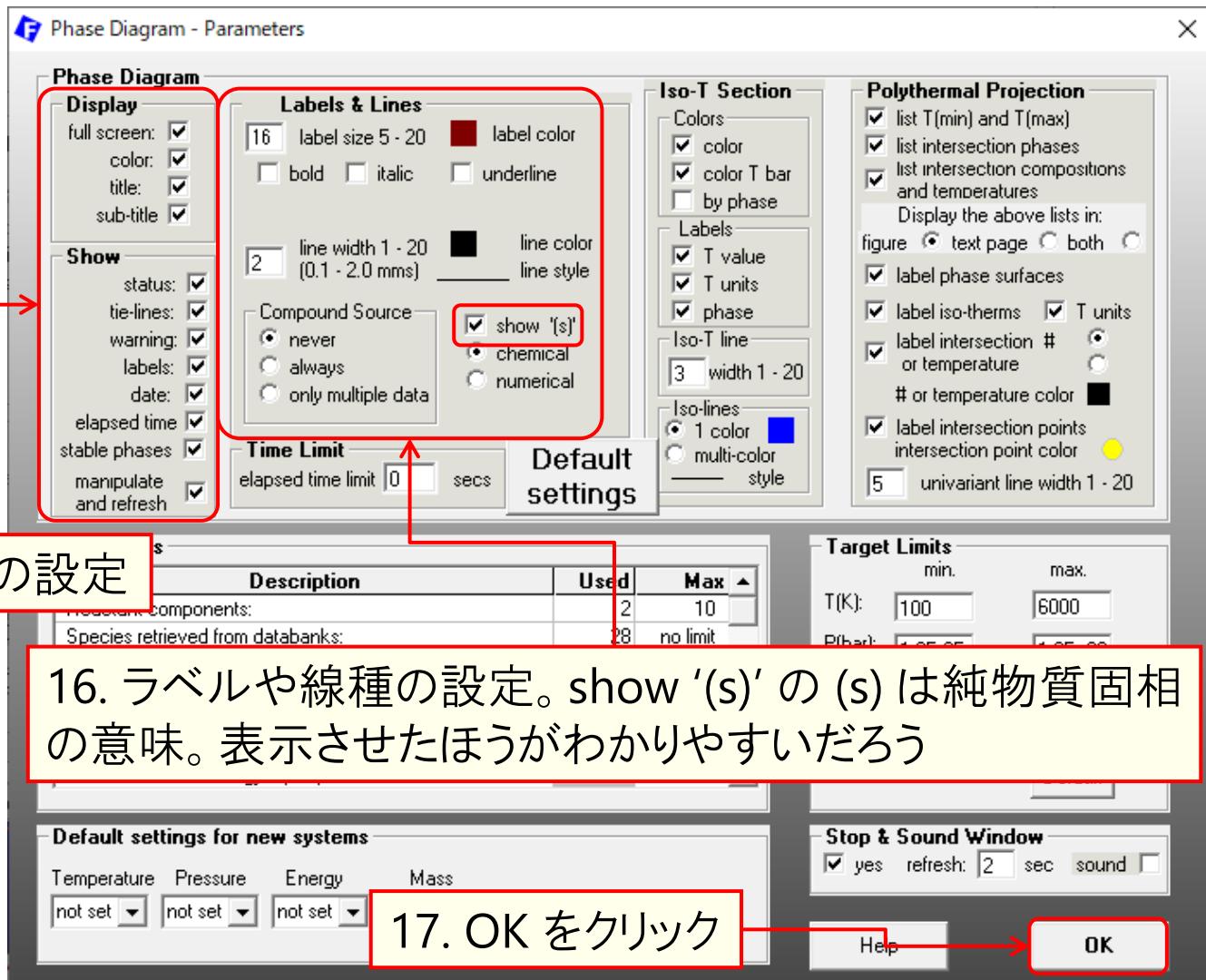
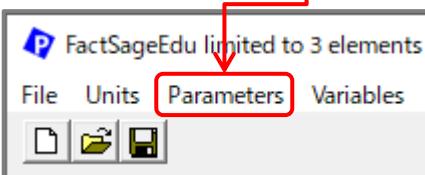
13-4. 圧力を 1 atm に設定

13-6. OK をクリック

# CaO-SiO<sub>2</sub> 系の状態図

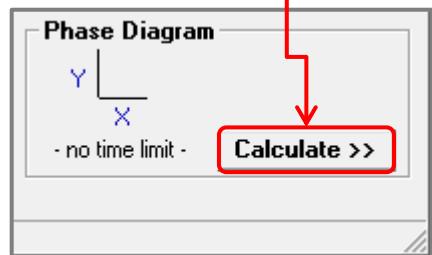
14. Parameters をクリック

Parameters



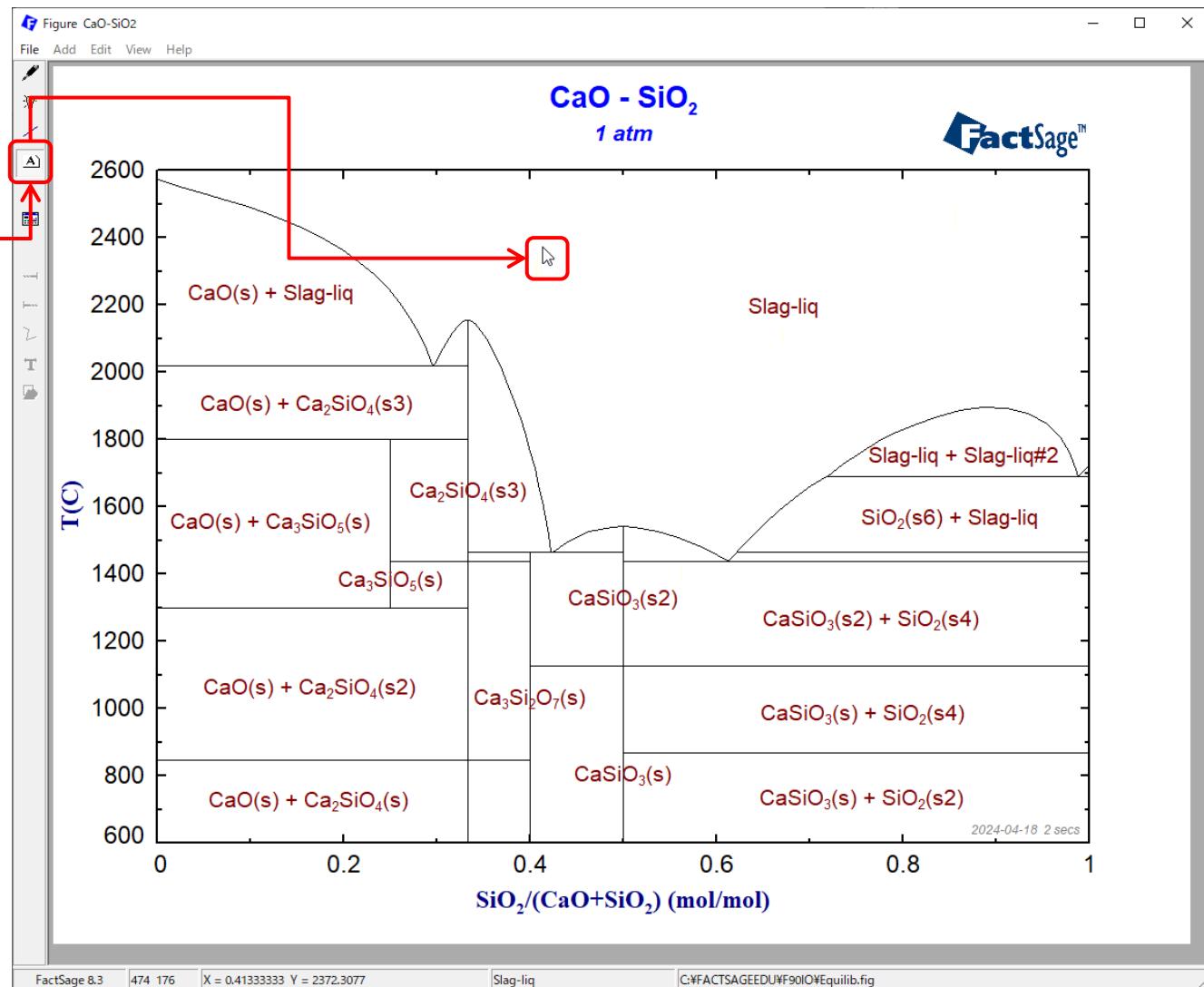
# CaO-SiO<sub>2</sub> 系の状態図

18. Calculate をクリック



計算結果

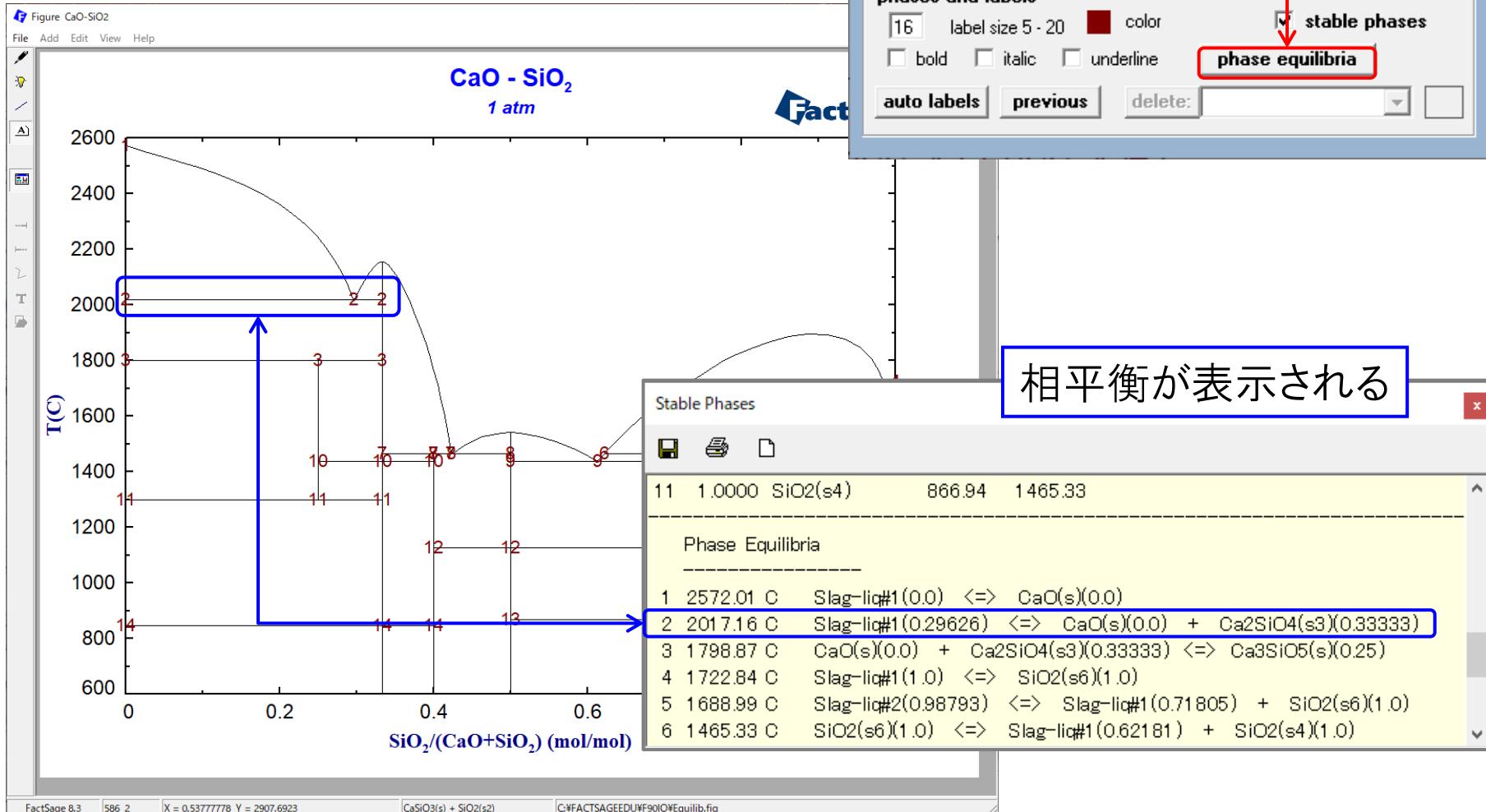
19. ラベルモード。  
左クリックしてラベ  
ルを貼り付ける。右  
クリックで貼り付け  
ると 90° 回転する  
  
ラベルを削除する  
場合は、normal  
edition モード(ペ  
ンのボタン)にして、  
ラベルを選択して  
Delete キーを押す



# CaO-SiO<sub>2</sub> 系の状態図 (Manipulate and Refresh)

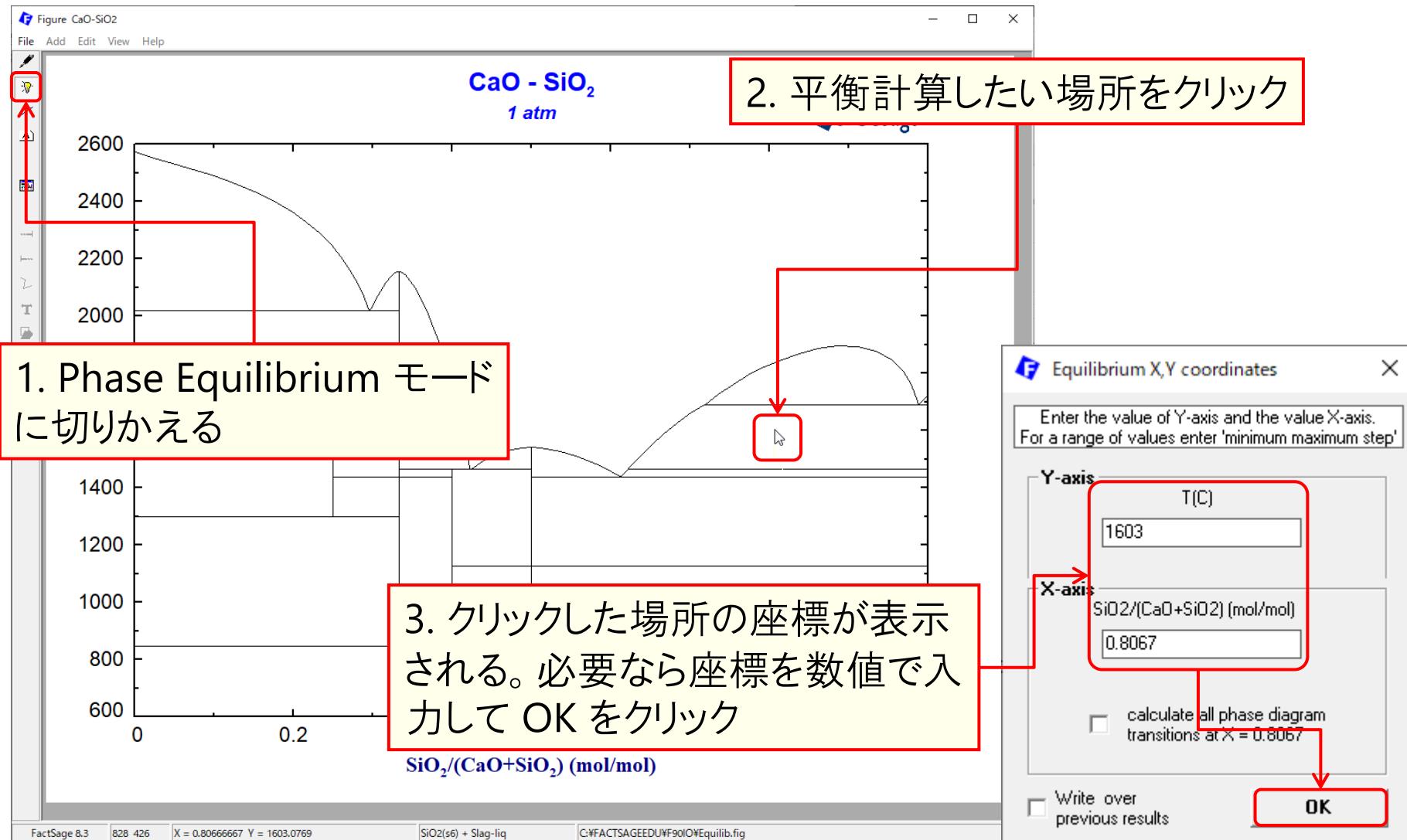
■ 共晶点(相平衡)を表示させる

phase equilibria ボタンをクリック



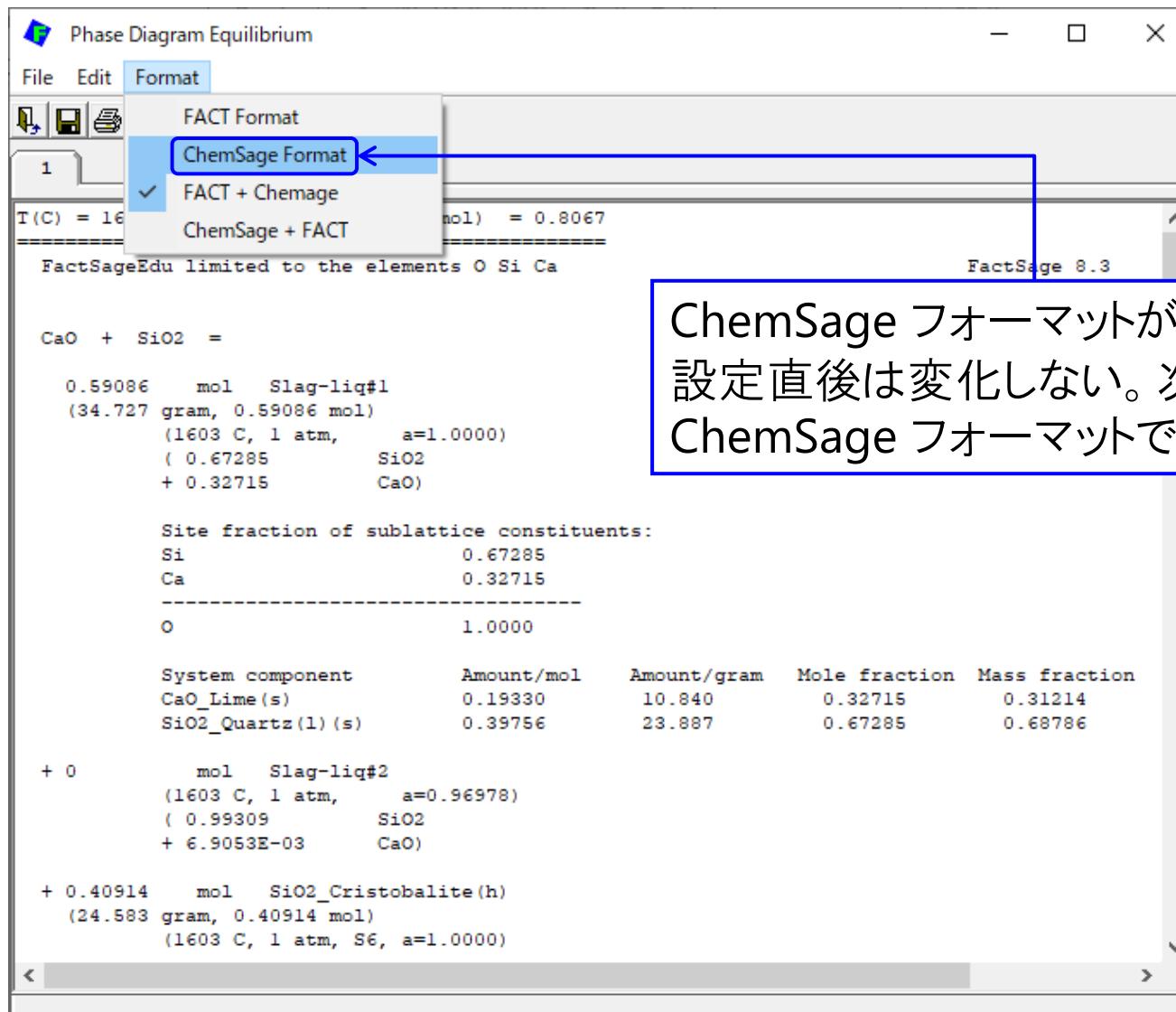
# CaO-SiO<sub>2</sub> 系の状態図(Phase Equilibrium モード)

■ 状態図の上の任意の点における平衡状態を調べる



# CaO-SiO<sub>2</sub> 系の状態図(Phase Equilibrium モード)

入力した座標での平衡計算が実行される



ChemSage フォーマットがおすすめ。  
設定直後は変化しない。次回から  
ChemSage フォーマットで表示される

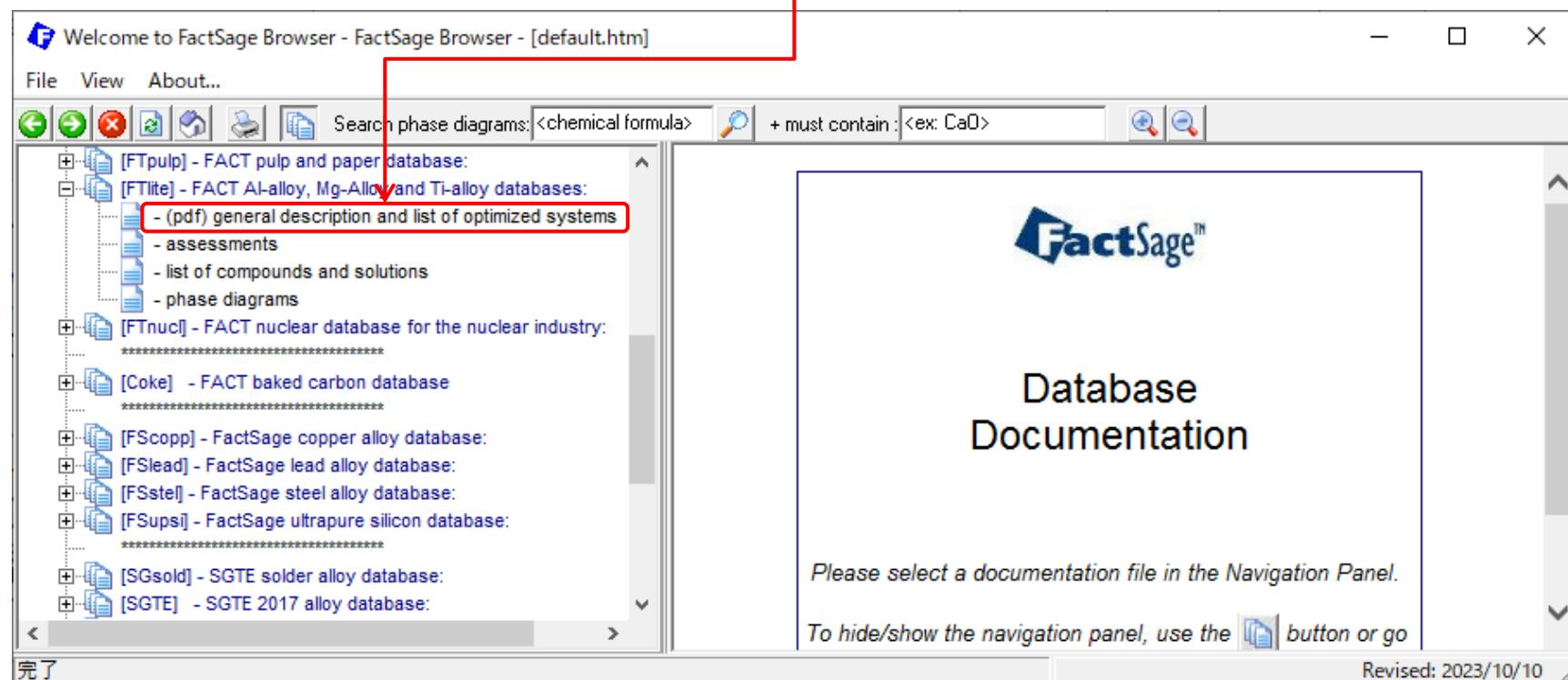
# Al-Mg-Si 系の状態図

三角形の等温断面図を作成するのに必要な基本操作を紹介する。

# Al-Mg-Si 系の状態図

■ Al-Mg-Si 系の状態図を作成する。アルミニウム合金なので FTlite を用いる

1. Database Documentation を起動して FTlite ⇒ (pdf) general description ... を開く。どのような系が解析できるか、また FTlite の使い方を確認しておこう



# Al-Mg-Si 系の状態図

Si は青色で記載されていて Al-Mg-Si 系は評価されていることが確認できる。よって、この系は解析可能であり高い予測精度を期待できる

AI Alloys  
Ag, Al, As, Au, B, Ba, Be, Bi, C, Ca, Ce, Co, Cr, Cu, Dy, Er, Eu, Fe, Ga, Gd, Ge, H, Hf, Ho, In, K, La, Li, Lu, Mg, Mn, Mo, N, Na, Nb, Nd, Ni, O, Pb, Pr, Pt, Sb, Sc, Si, Sm, Sn, Sr, Ta, Tb, Ti, Tm, V, W, Y, Yb, Zn, Zr

Mg Alloys  
Ag, Al, B, Ba, Be, Bi, C, Ca, Ce, Co, Cr, Cu, Dy, Er, Eu, Fe, Ga, Gd, Ge, H, Ho, In, K, La, Li, Lu, Mg, Mn, Na, Nb, Nd, Ni, O, Pb, Pr, Pt, Sb, Sc, Si, Sm, Sn, Sr, Tb, Ti, Tm, V, Y, Yb, Zn, Zr

Ti Alloys  
Ag, Al, B, Ba, C, Ca, Ce, Co, Cr, Cu, Dy, Er, Eu, Fe, Ga, Gd, H, Ho, K, La, Li, Lu, Mg, Mn, Mo, N, Na, Nb, Nd, Ni, O, Pr, Sc, Si, Sm, Sn, Sr, Ta, Tb, Ti, Tm, V, W, Y, Yb, Zn, Zr

## Color codes

Red : Al or Mg

Blue : Major alloying elements (full optimisations of binary systems with Al, Mg and Ti and with several minor alloying elements, Al-Mg-Xx ternary systems evaluated (good for Al+Mg-rich regions), several quaternary systems included);

Green : Minor alloying elements (full optimisations of binary systems with Al and Mg);

Black : Optimized for the M-Zz system and few M-Xx-Zz and M-Yy-Zz systems (where M is Al, Mg or Ti);

## Composition Ranges

The database is intended to allow calculations over all ranges of composition, although the assessed data are often most reliable for light metal rich composition ranges (Al-rich, Mg-rich and Ti-rich compositions. Alkali metal-rich compositions). The database can be used for Al alloys in the commercial series 1000, 2000, 3000, 4000, 5000, 6000 and 7000, and for a wide range cast alloys.

# Al-Mg-Si 系の状態図

## データベースの使い方を確認

### Use of the Database

The phase diagrams of all the binary systems listed above have been checked using FactSage 8.3.

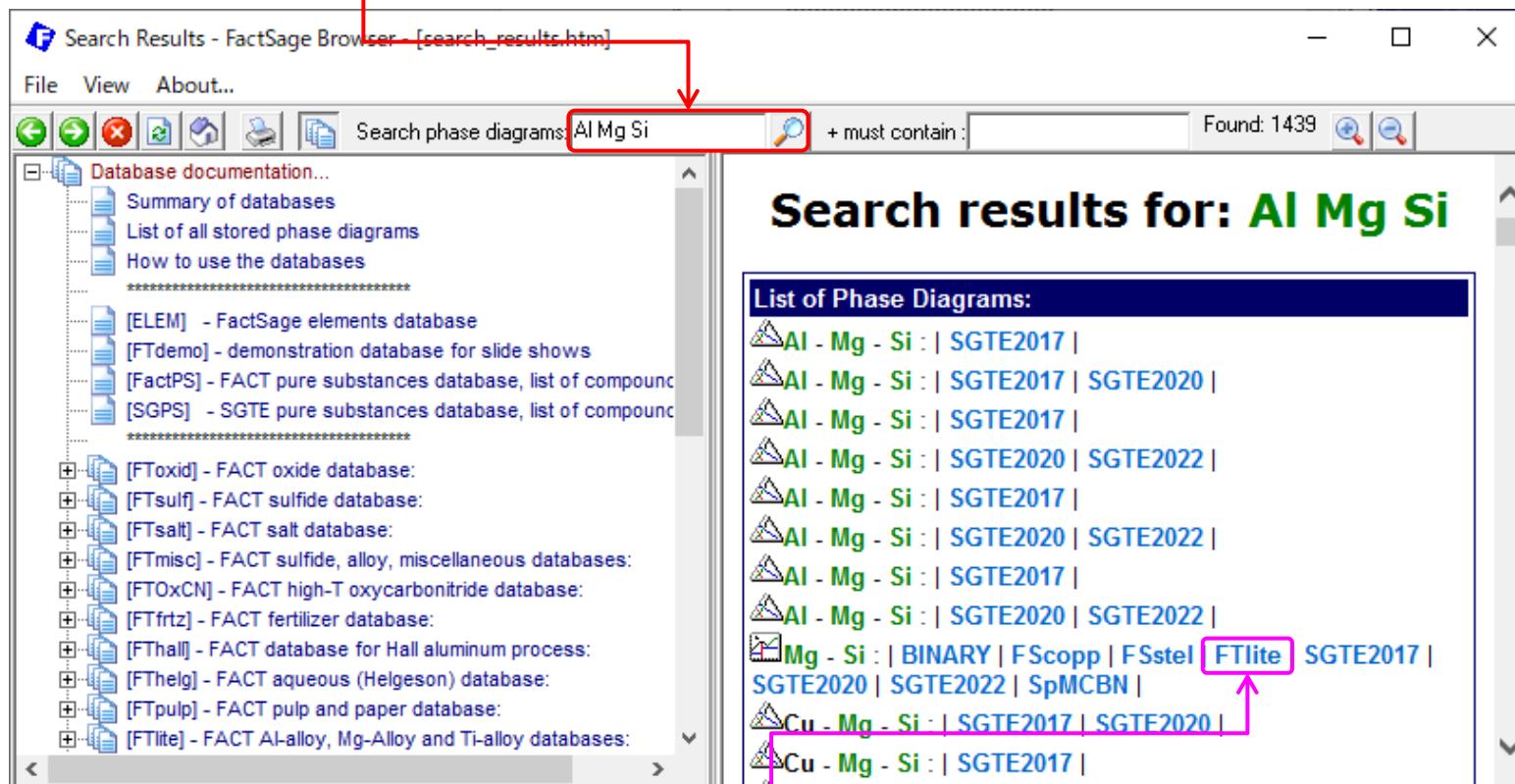
Phase selection in the EQUILIB or PHASE DIAGRAM modules using FTlite is simple: simply follow these instructions:

- For pure solid compounds:
  - Right-click on “pure solids”
  - Then click “Select/Clear” > “Add all species from database” > “FTlite”
- For solutions:
  - Click on the “Select” button below the “Solution species” list box
  - Then click “Add all phases from database” > “FTlite”
  - Apply the recommendations related to the CBCC-A12, D82 and D88 solutions, as described in the warning text box in the following page;
- There is no need to select pure liquid phases (the FTlite-Liqu solution contains the liquid species). They may be selected as dormant (metastable, option “!”) for purposes of computing their chemical activity.
- Click “Use V & phys. property data” in the EQUILIB Module if you intend to have density, viscosity, thermal conductivity and surface tension to be calculated for phases, when available. We recommend not to click this option in the PHASE DIAGRAM Module.

There might be cases when a chemical system with many elements results in more than 150 possible

# Al-Mg-Si 系の状態図

## 2. Al-Mg-Si が含まれる計算状態図を検索

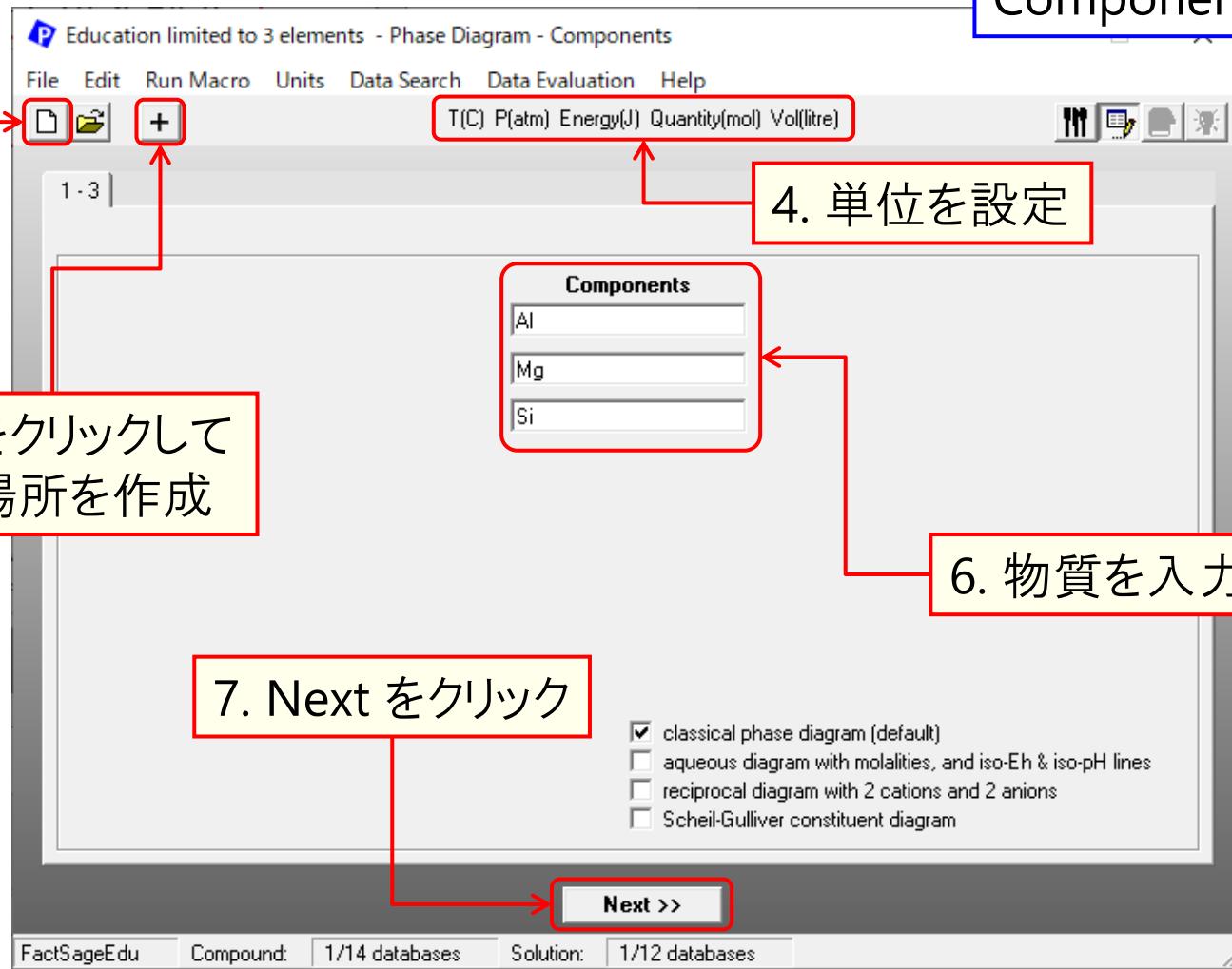


Al-Mg-Si 系は SGTE で計算可能であることがわかる。FTlite については三元系状態図が計算状態図データベースに収録されていないので、この画面では確認できない。Mg-Si, Al-Si, Al-Mg の二元系部分系が計算できることは確認できる。すべての組み合わせの部分系が計算できなければ三元系の予測精度は低いだろう

# Al-Mg-Si 系の状態図

3. 新規設定 ⇒ はい ⇒ いいえ ⇒ FTlite を選択

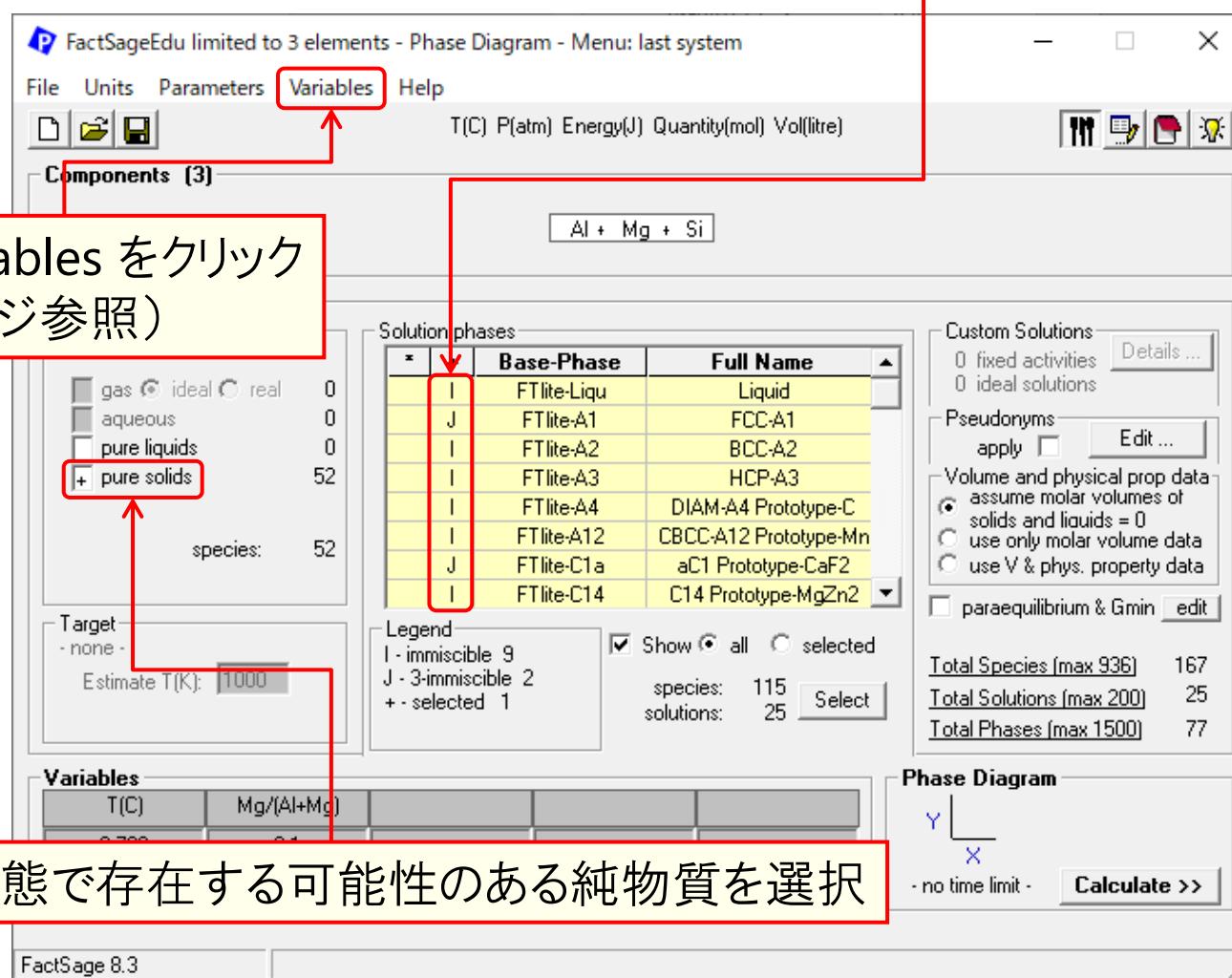
Components Window



# Al-Mg-Si 系の状態図

Menu Window

8. 平衡状態で存在する可能性のある溶体相を選択



# Al-Mg-Si 系の状態図

Variables

10-1. 三角形の状態

10-3. 温度と圧力を設定

10-2. Next をクリック

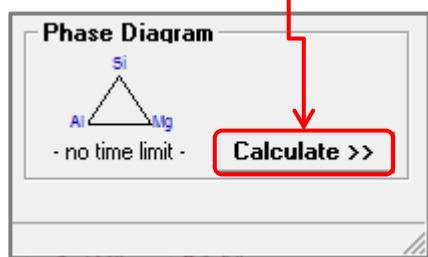
10-4. 三角形の頂点 A, B, C に  
対応する物質を選択  
A: Si, B: Al, C: Mg

順番に注意  
#1: A-Corner  
#2: C-Corner  
#3: B-Corner

10-5. OK をクリック

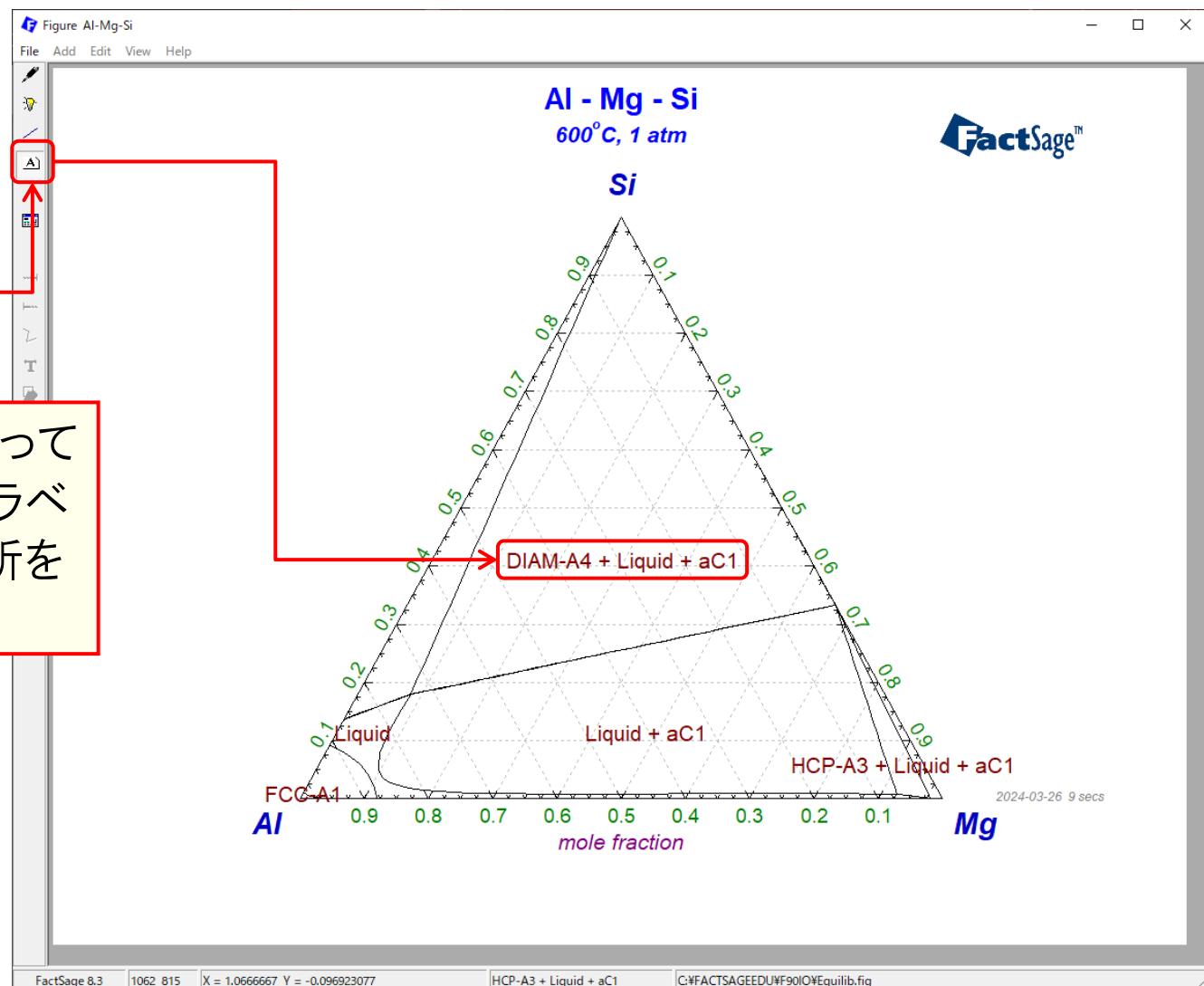
# Al-Mg-Si 系の状態図

11. Calculate をクリック



12. ラベルモードになっていることを確認して、ラベルを貼り付けたい場所をクリック

計算結果

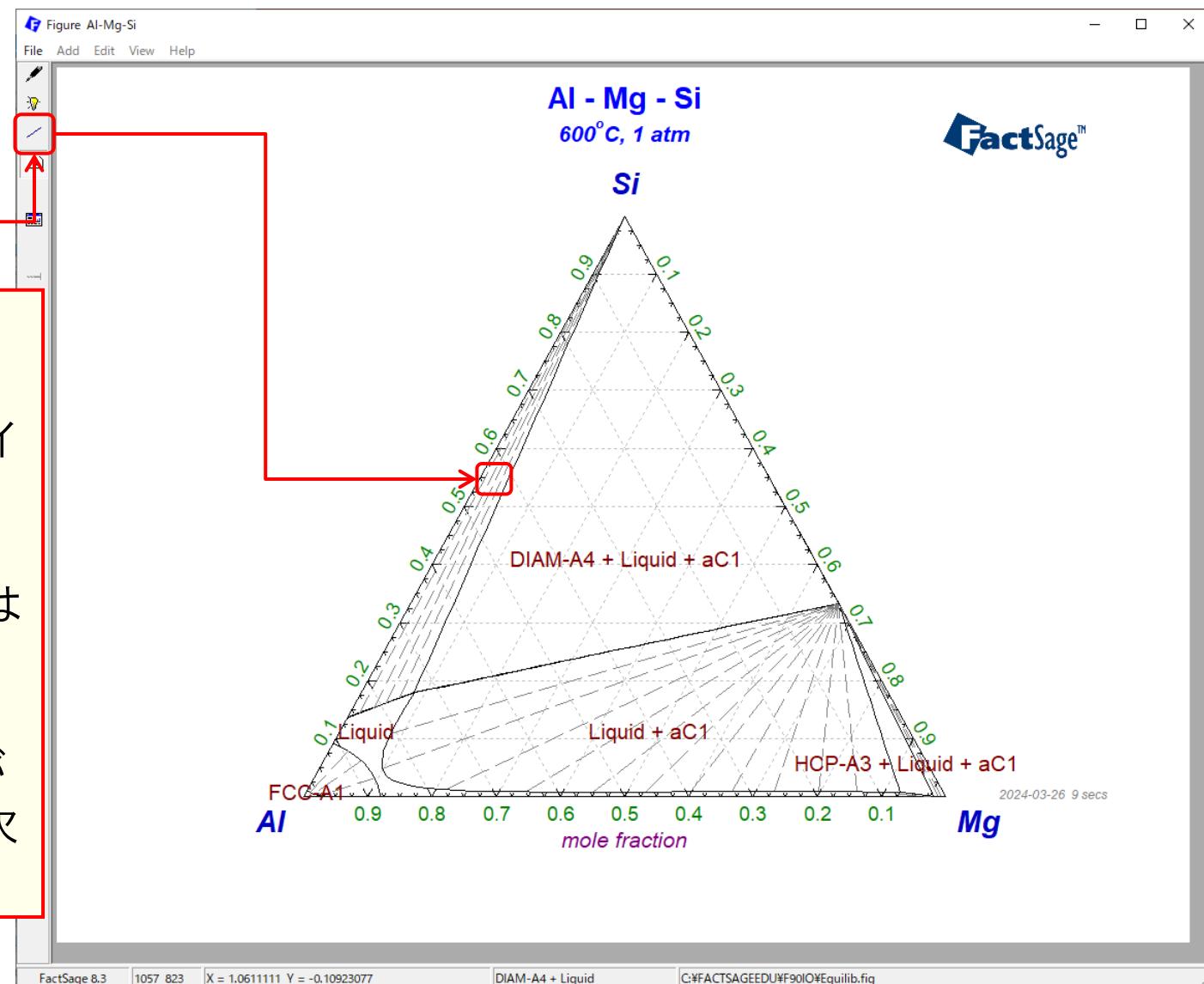


# Al-Mg-Si 系の状態図

タイラインモード

13. クリックすると、  
平衡している相を  
結ぶ直線(タイライ  
ン)が表示される。

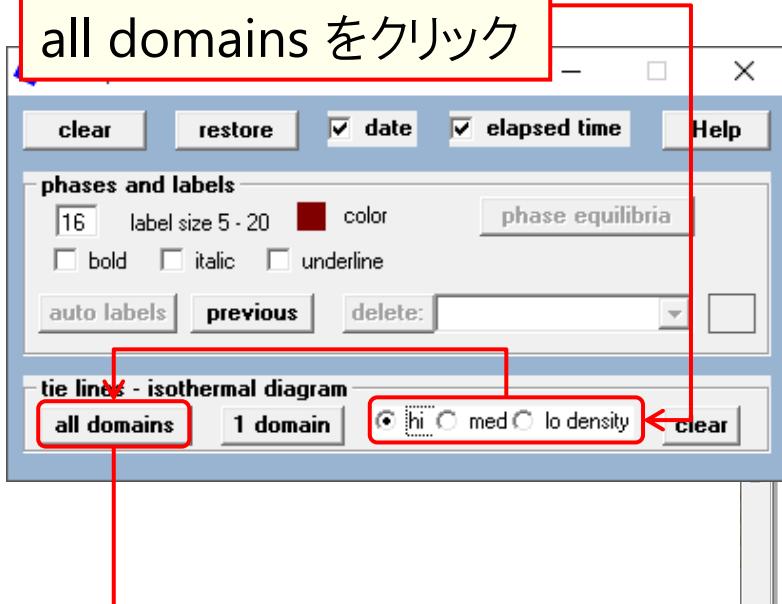
タイラインの表示は  
Manipulate and  
Refresh Window  
の機能を使う方が  
ずっと楽である。次  
ページに示す



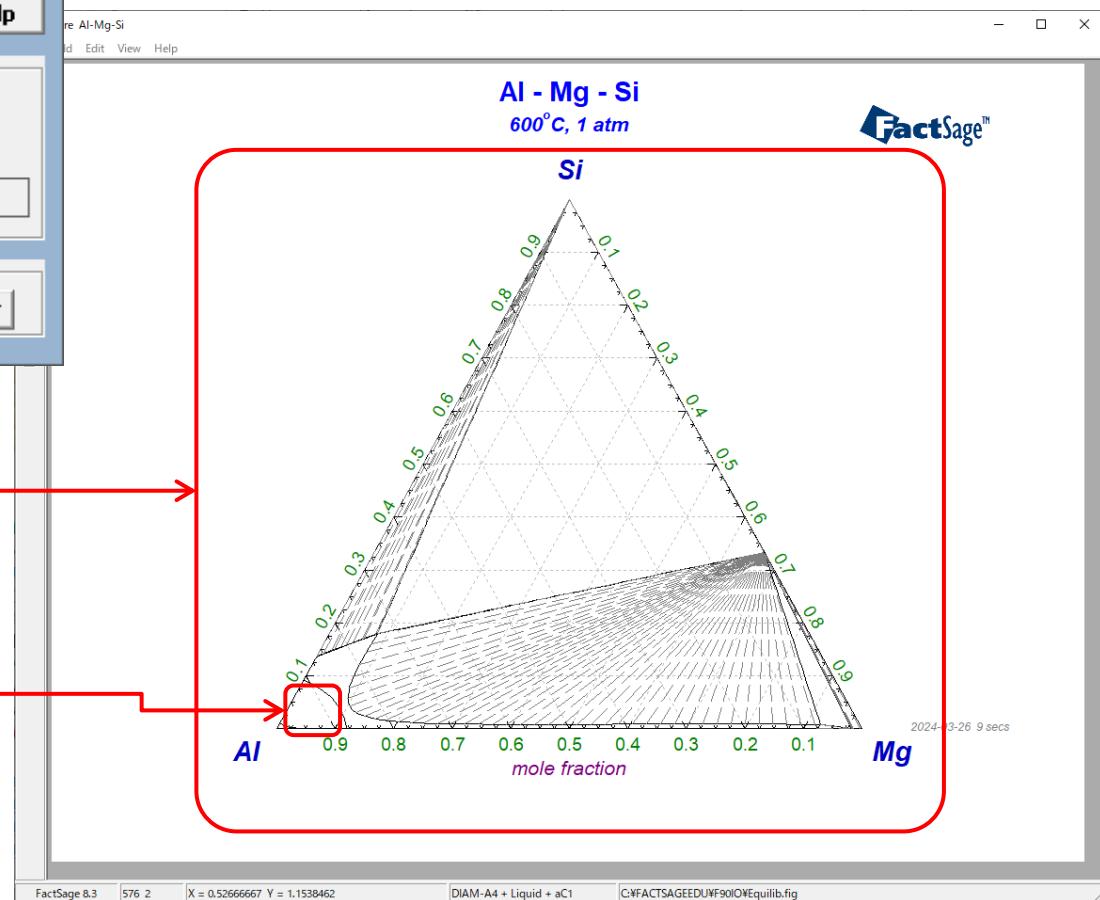
# Al-Mg-Si 系の状態図(Manipulate and Refresh)

## ■ タイラインを表示する別 の方法

1. 線の多さを選択して  
all domains をクリック



2. 正常に表示されない領域は  
1 domain ボタンをクリックして  
表示されない領域をクリック

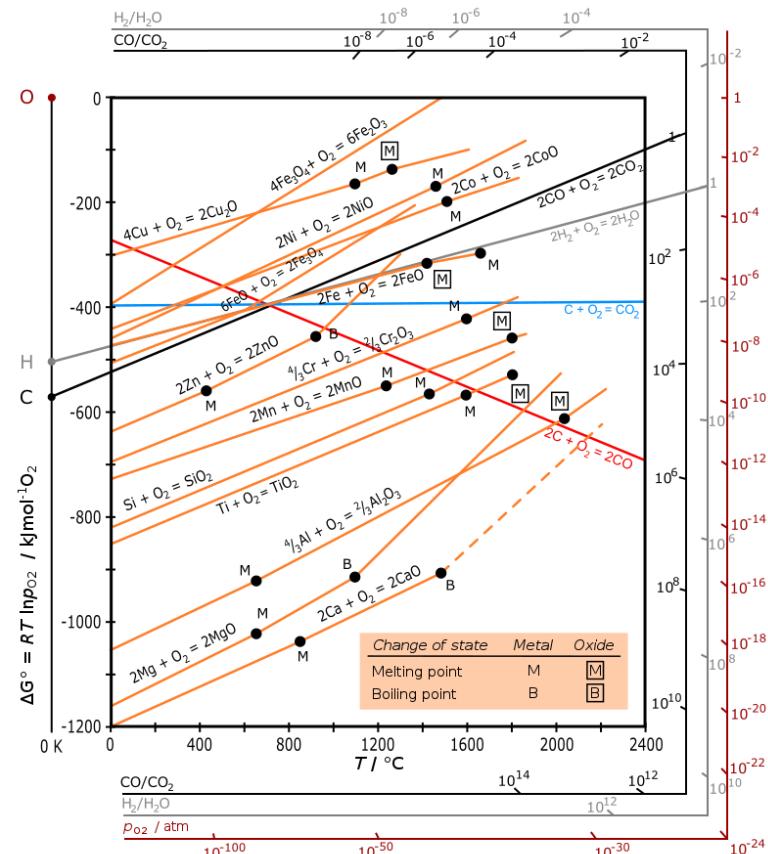


# Fe-O<sub>2</sub> 系の状態図 / エリンガム図

Fe-O<sub>2</sub> 系の状態図を計算する。平衡状態で存在する可能性のある物質は純物質のみと考えて FactPS のみを用いる。

鉄の酸化物が固溶体として表現されているデータベース(FToxid)を用いると酸化物についてより信頼性の高い解析を行うことができる。

一般的によく知られているエリンガム図では溶体・固溶体は考慮されていない。ここでは FactPS のみを使って解析しよう。

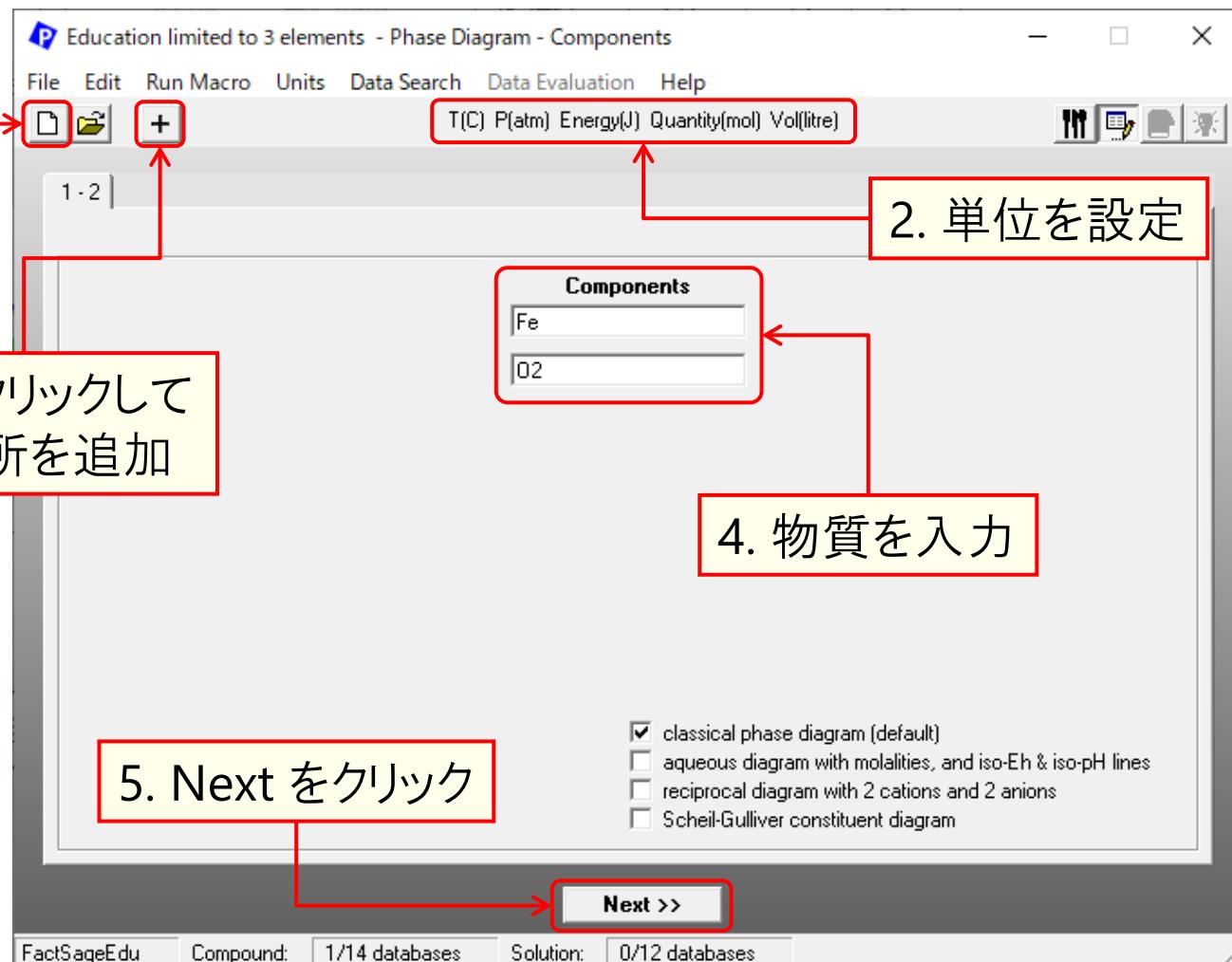


「エリンガムダイアグラム」ウィキペディア日本語版 2024 年 4 月 30 日 16:20(日本時間) 現在での最新版を取得。  
<https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%82%A8%E3%83%AA%E3%83%B3%E3%82%AC%E3%83%A0%E3%83%80%E3%82%A4%E3%82%A2%E3%82%80>

# Fe-O<sub>2</sub> 系の状態図 / エリンガム図

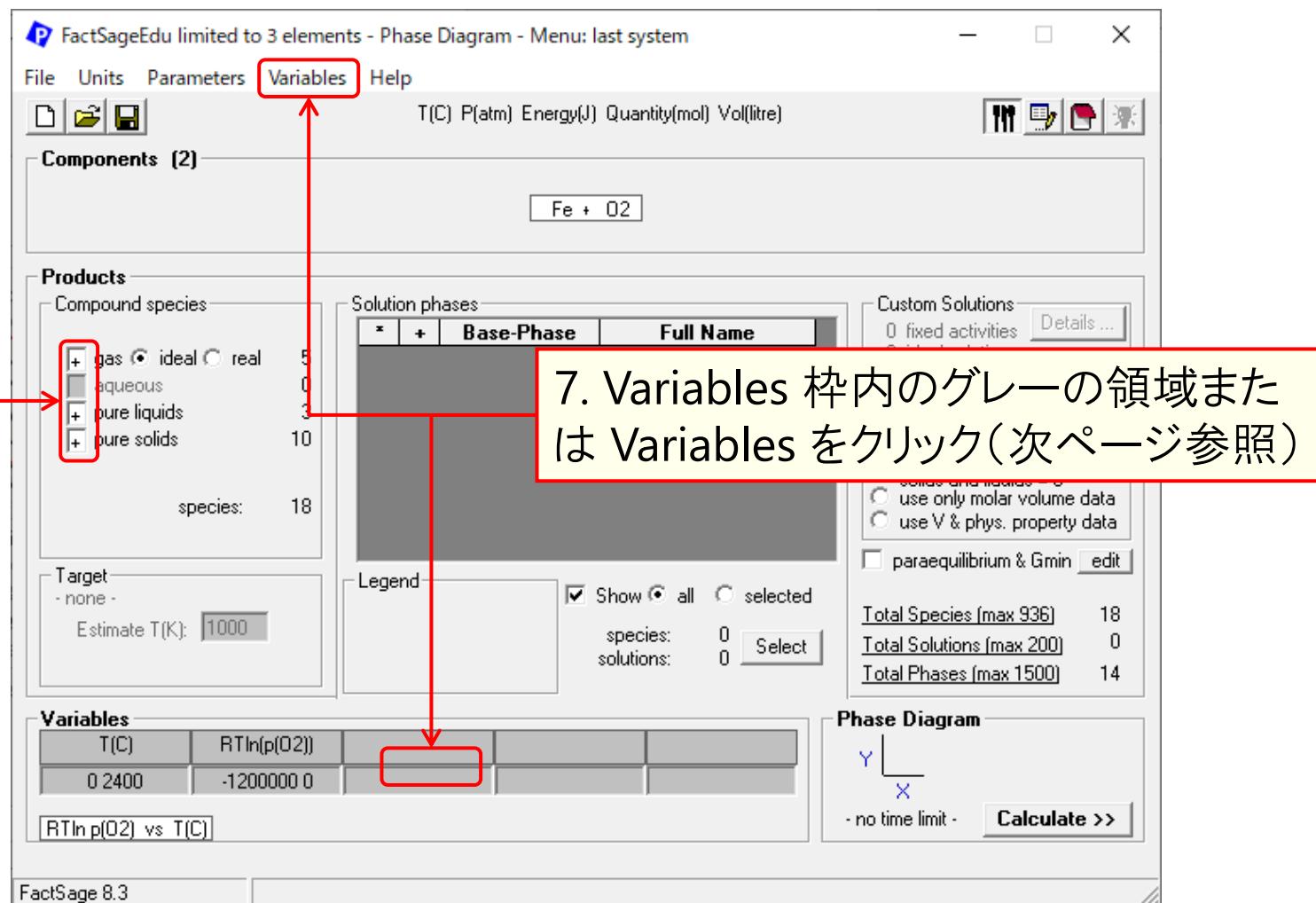
■ Fe-O<sub>2</sub> 系の状態図を計算する。縦軸を RTln(p(O<sub>2</sub>)) とする

1. 新規設定 ⇒ はい ⇒ いいえ ⇒ FactPS を選択



# Fe-O<sub>2</sub> 系の状態図 / エリンガム図

## 6. 平衡状態で存在する可能性のある物質を選択

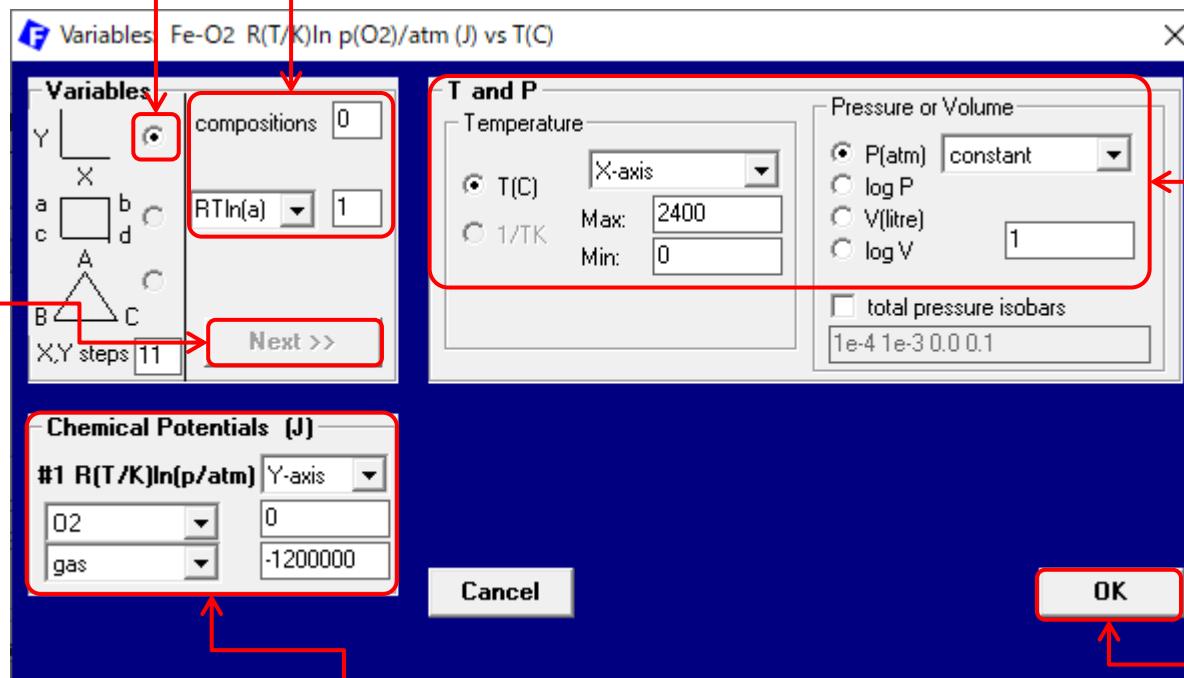


# Fe-O<sub>2</sub> 系の状態図 / エリンガム図

7-1. X-Y 座標系を選択

7-2. エリンガム図の縦軸である RTIn(a) を選択して、設定する個数を 1 にする。a は活量の意味。組成は設定しないので 0 である

7-4. 温度と圧力の設定



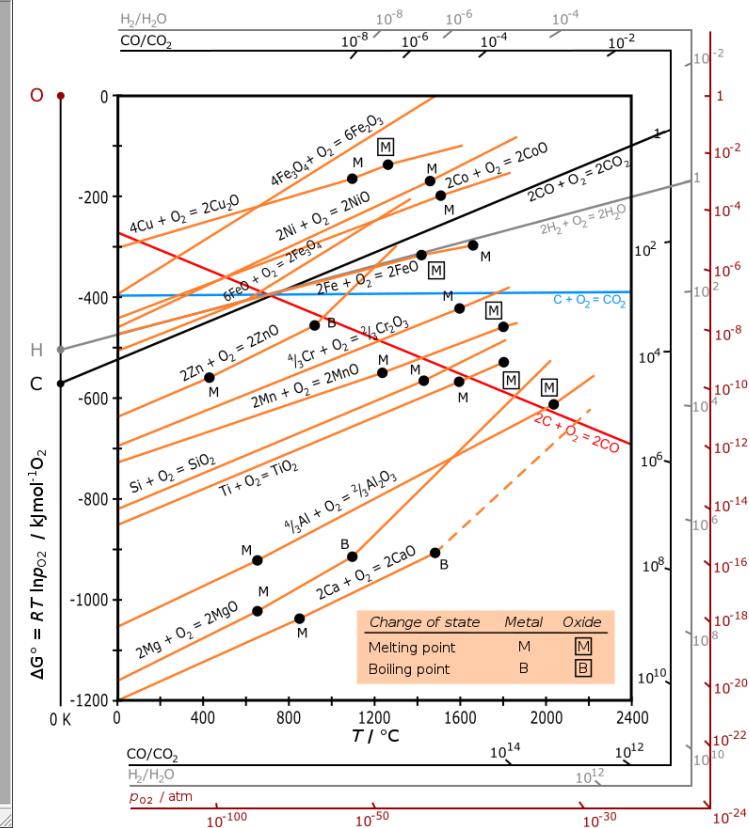
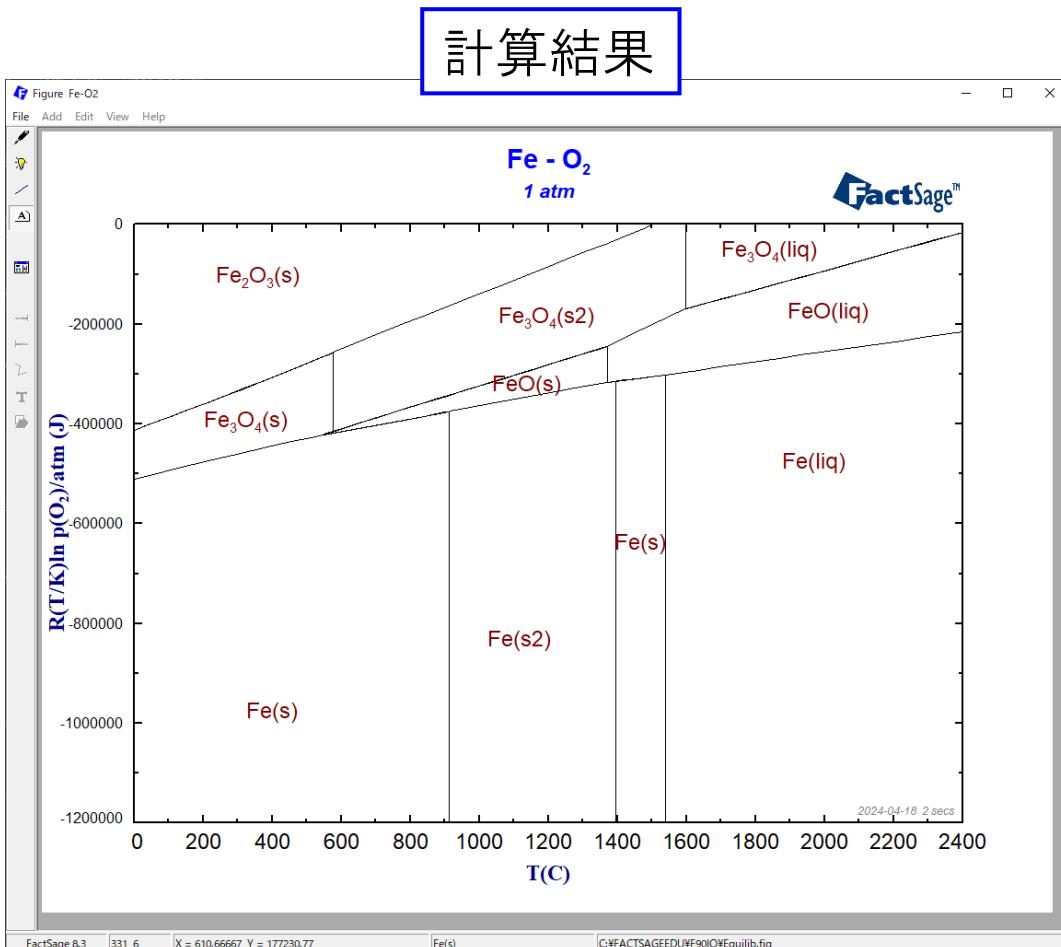
7-3. Next  
をクリック

7-5. RTIn(p) を設定する。気体なので分圧 p と表示される

7-6. OK をクリック

# Fe-O<sub>2</sub> 系の状態図 / エリンガム図

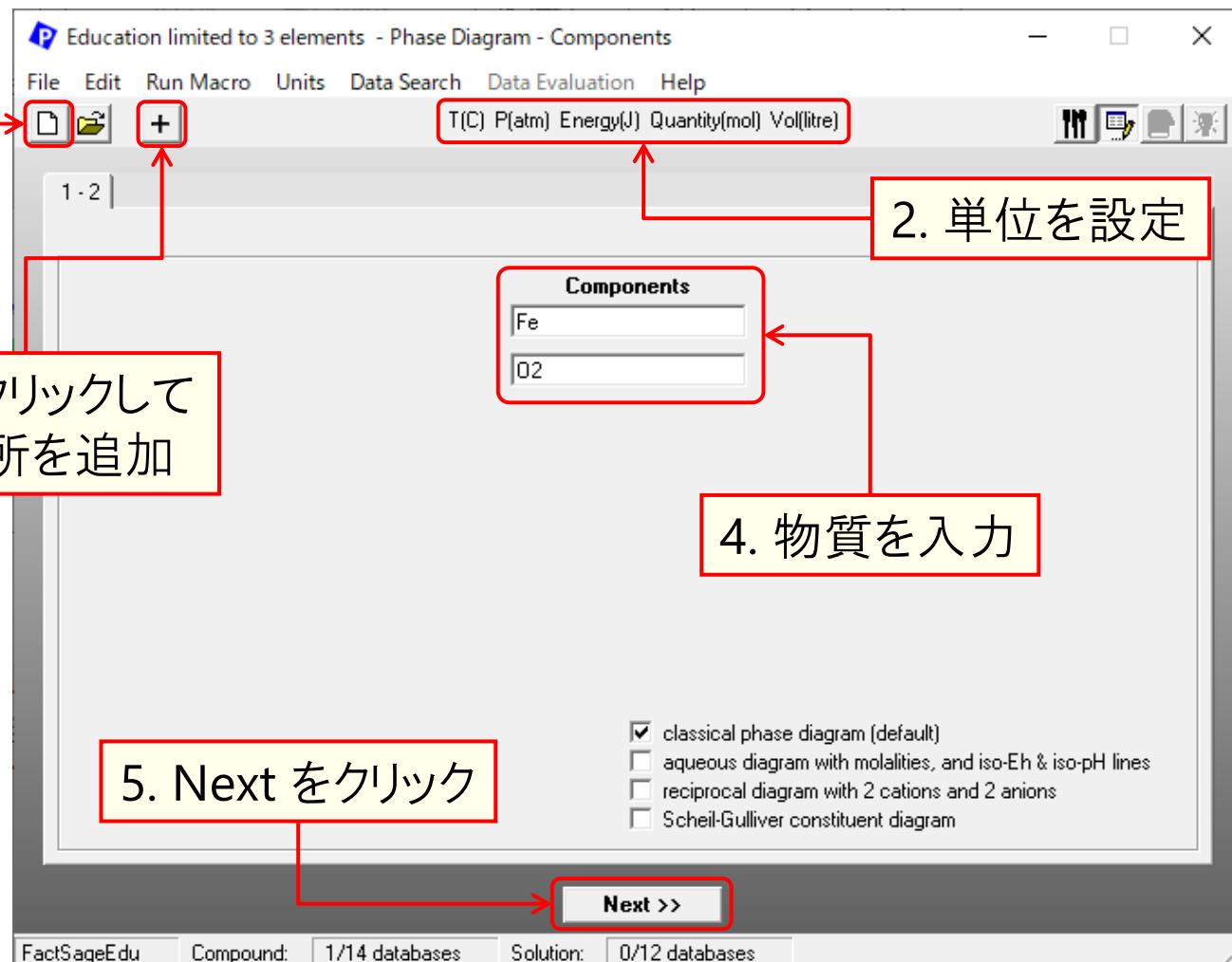
## 8. Calculate をクリック



# Fe-O<sub>2</sub> 系の状態図 / エリンガム図

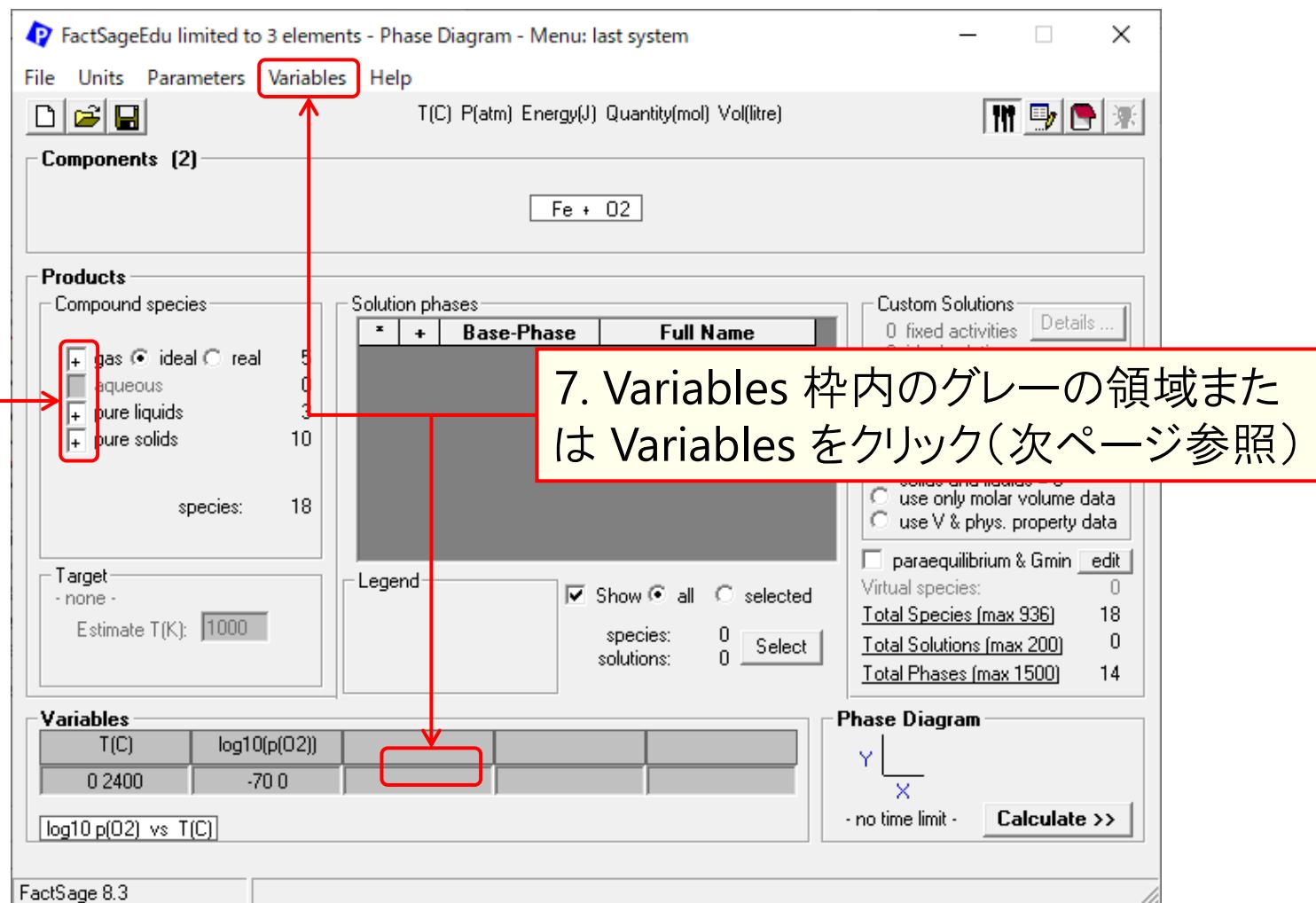
■ Fe-O<sub>2</sub> 系の状態図を計算する。縦軸を p(O<sub>2</sub>) とする

1. 新規設定 ⇒ はい ⇒ いいえ ⇒ FactPS を選択



# Fe-O<sub>2</sub> 系の状態図 / エリンガム図

## 6. 平衡状態で存在する可能性のある物質を選択

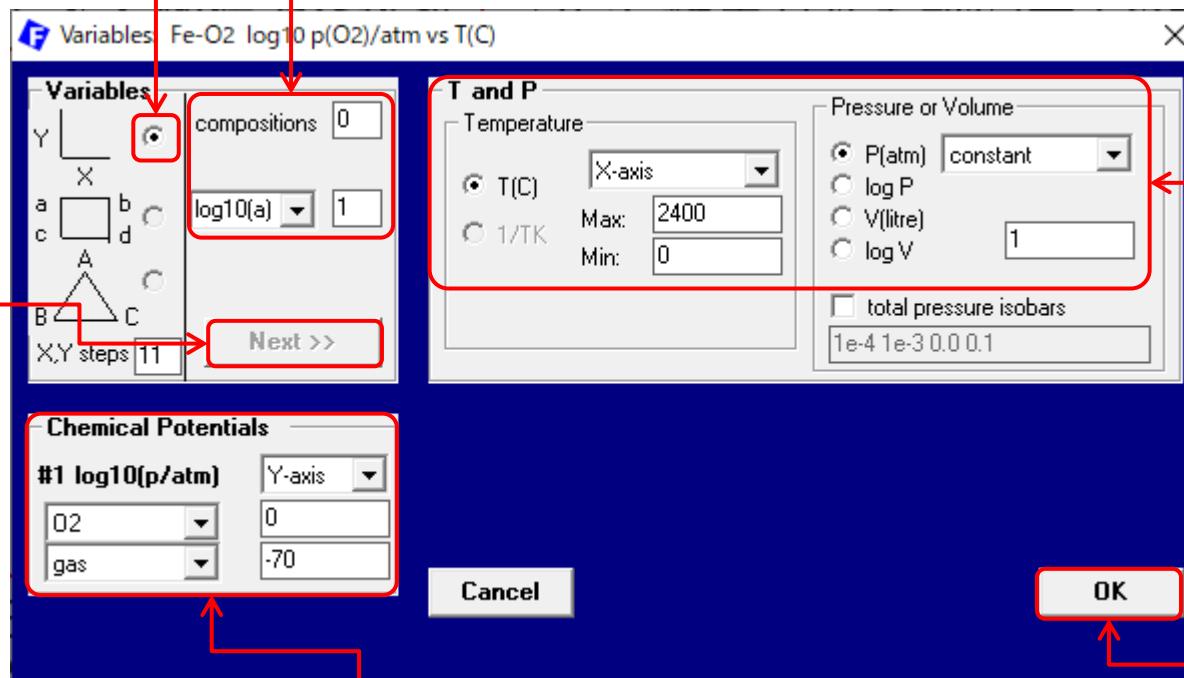


# Fe-O<sub>2</sub> 系の状態図 / エリンガム図

7-1. X-Y 座標系を選択

7-2. 酸素分圧を設定するので log10(a) を選択して、設定する個数を 1 にする。a は活量の意味。組成は設定しないので 0 である

7-4. 温度と圧力の設定



7-3. Next  
をクリック

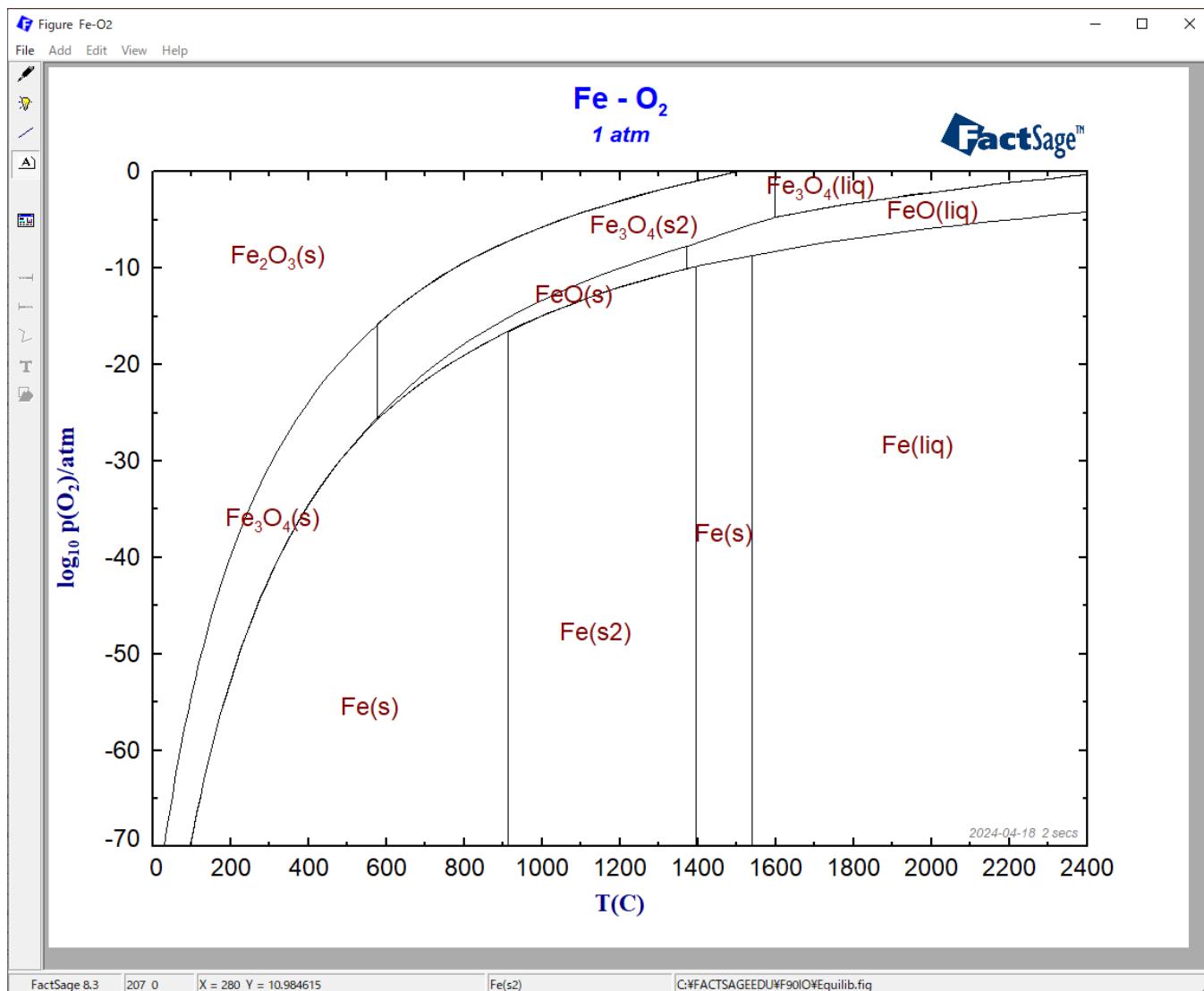
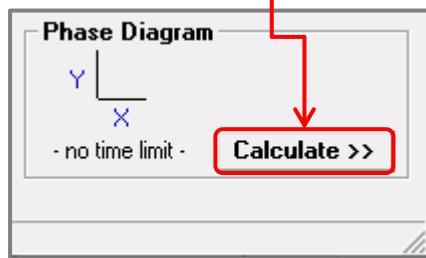
7-5. log10(p) を設定する。気体なので分圧 p と表示される

7-6. OK をクリック

# Fe-O<sub>2</sub> 系の状態図 / エリンガム図

8. Calculate をクリック

計算結果

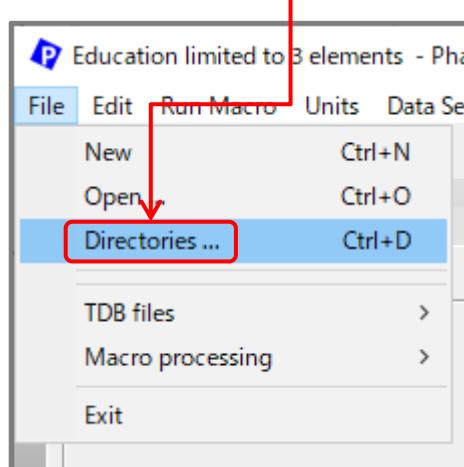


## サンプルの表示

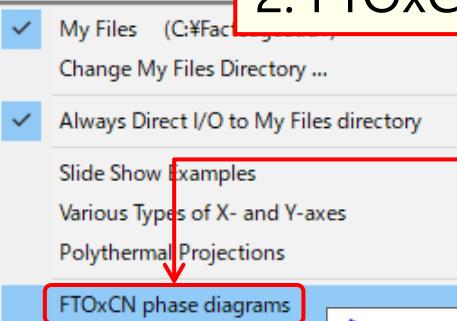
Phase Diagram アプリの計算設定方法はサンプルで確認しよう。

# サンプルの表示

## 1. File ⇒ Directories ...

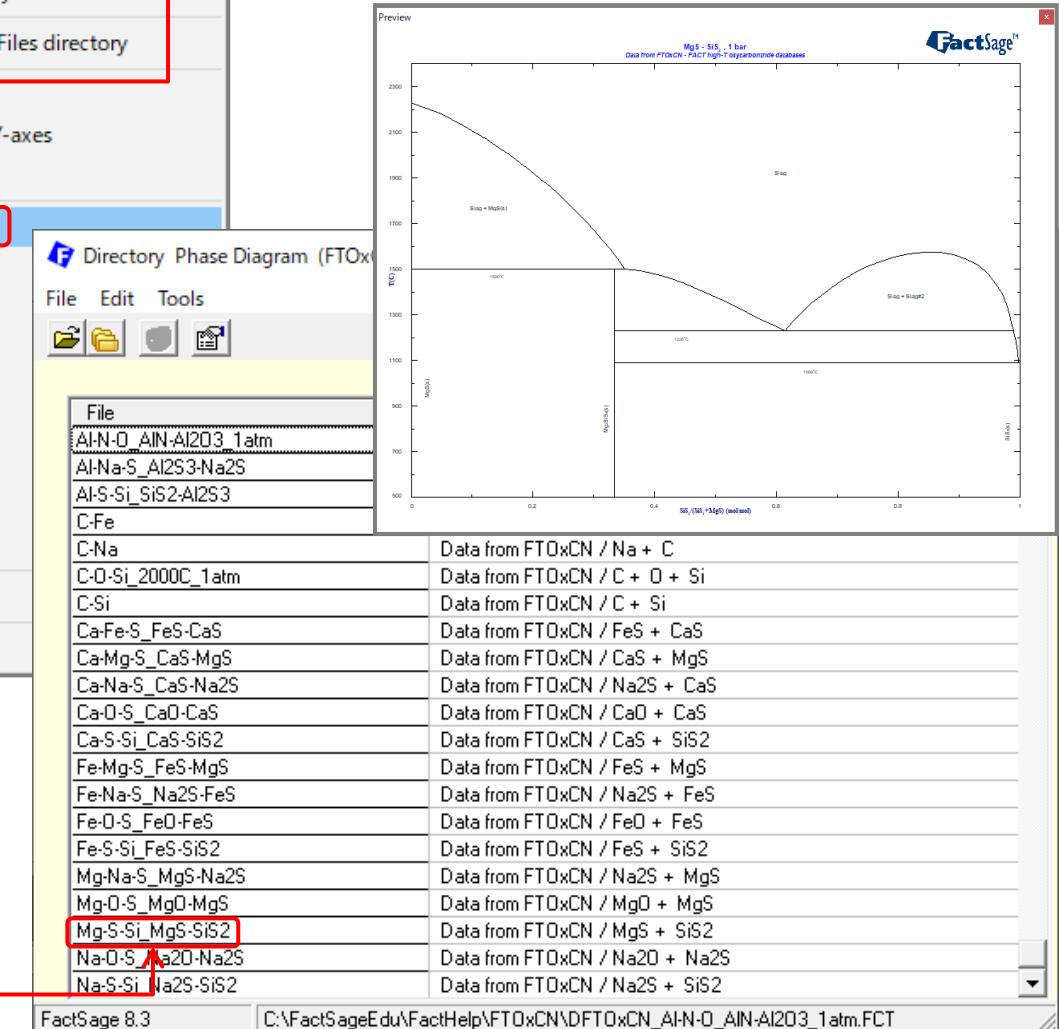


## 2. FTOxCN を選択



## 3. サンプルの表示。

シングルクリックでプレビュー、  
ダブルクリックで設定と状態  
図の読み込み



# あとがき

FactSage Education には多くのドキュメントが含まれています。

実用的な計算事例がスライドショーのサンプルにあるのでご覧ください。

## ▼ サンプルの表示方法

FactSage メイン画面の Information ⇒ FactSage Applications ... ⇒ 各サンプル

FactSage が内部でどのような計算をしているか知りたい場合は、Information から開くことができる FactSage-TEACH で勉強するとよいでしょう。

平衡計算が複数回必要な解析(例、平衡計算結果から気体を取り出し、それを冷やしたらどうなるか)は FactSage では困難な場合があります。このような解析には、専用のツール(ChemSheet, KilnSimu)、または C 言語 や Python 等の平衡計算ライブラリー(ChemApp)が便利です。

皆様が FactSage Education を用いて熱力学平衡計算の世界に興味を持っていただけたのなら望外の喜びです。

RCCM FactSage チーム

# はじめて使う FactSage Education (インストール・熱力学平衡計算・状態図計算)

作成日 / 2024 年 4 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
- office@rccm.co.jp
- <https://www.rccm.co.jp/>