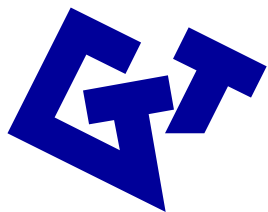


はじめて使う FactSage Education

(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ろこそ！

RCCM FactSage サポートチーム

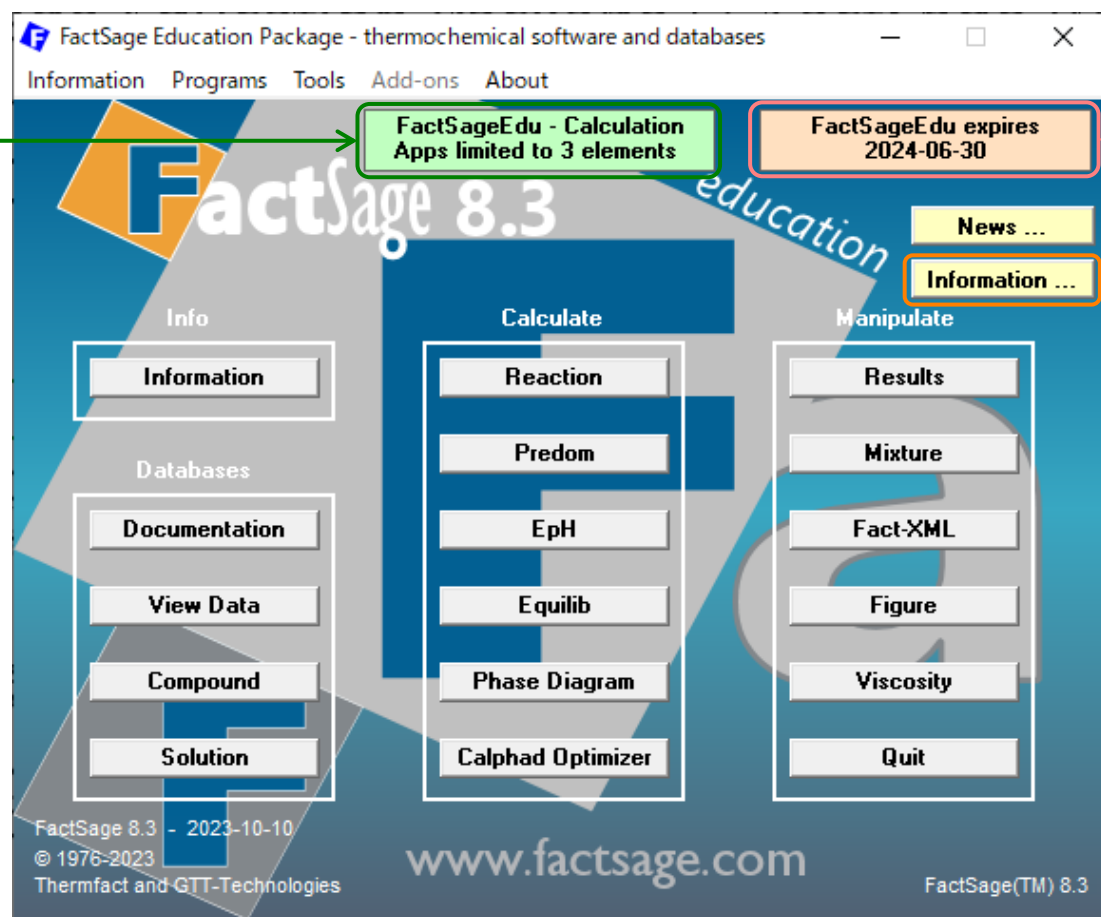
目次

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。

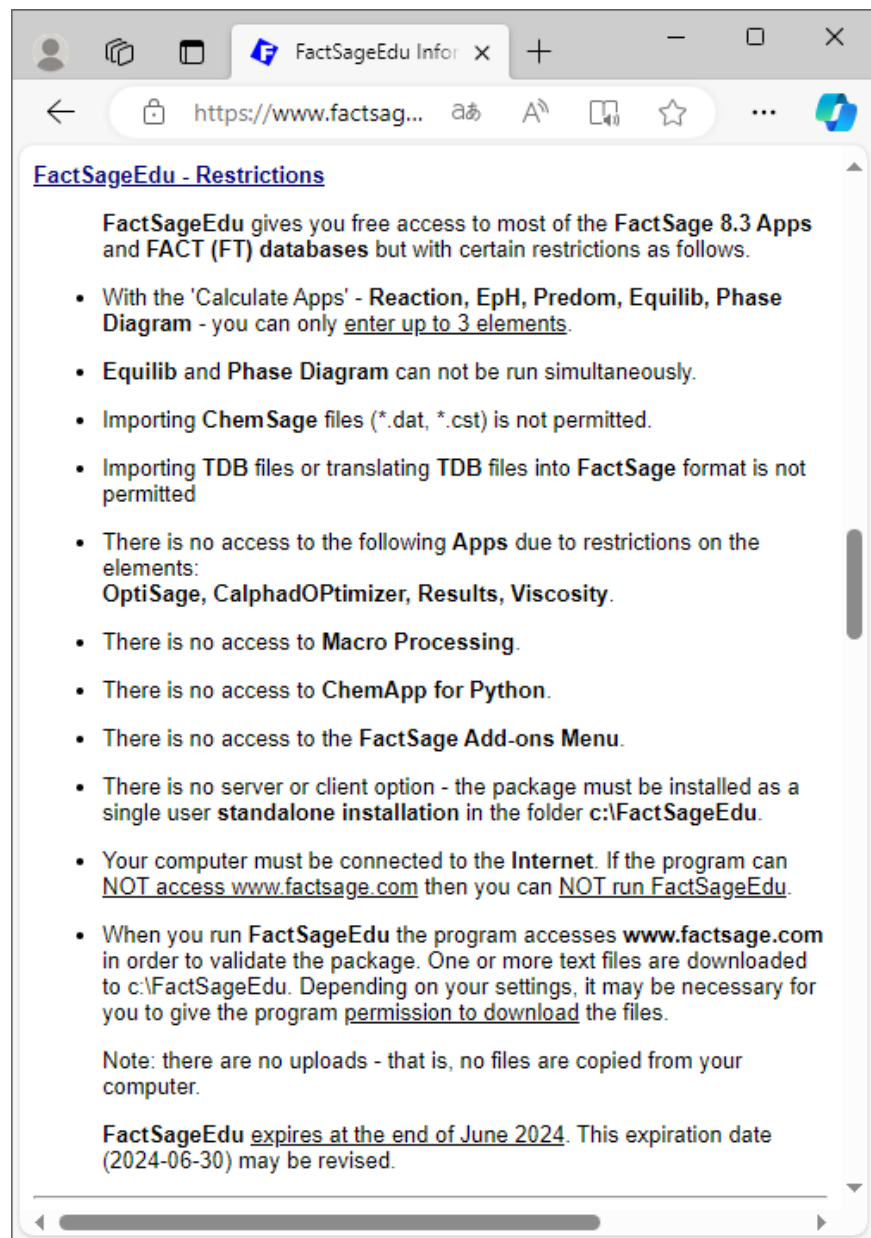


平衡計算、
状態図計算
などで、計
算できる元
素数は、最
大で 3 元素
まで

有効期限

機能制限の一
覧(次ページ)

FactSage Education Package



The screenshot shows a web browser window with the address bar displaying "https://www.factsage...". The page title is "FactSageEdu - Restrictions". The main content area contains a paragraph stating: "FactSageEdu gives you free access to most of the FactSage 8.3 Apps and FACT (FT) databases but with certain restrictions as follows." This is followed by a bulleted list of restrictions. At the bottom, there is a note about no uploads and an expiration date of June 2024.

FactSageEdu - Restrictions

FactSageEdu gives you free access to most of the FactSage 8.3 Apps and FACT (FT) databases but with certain restrictions as 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 then you can NOT run FactSageEdu.
- When you run FactSageEdu the program accesses 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.

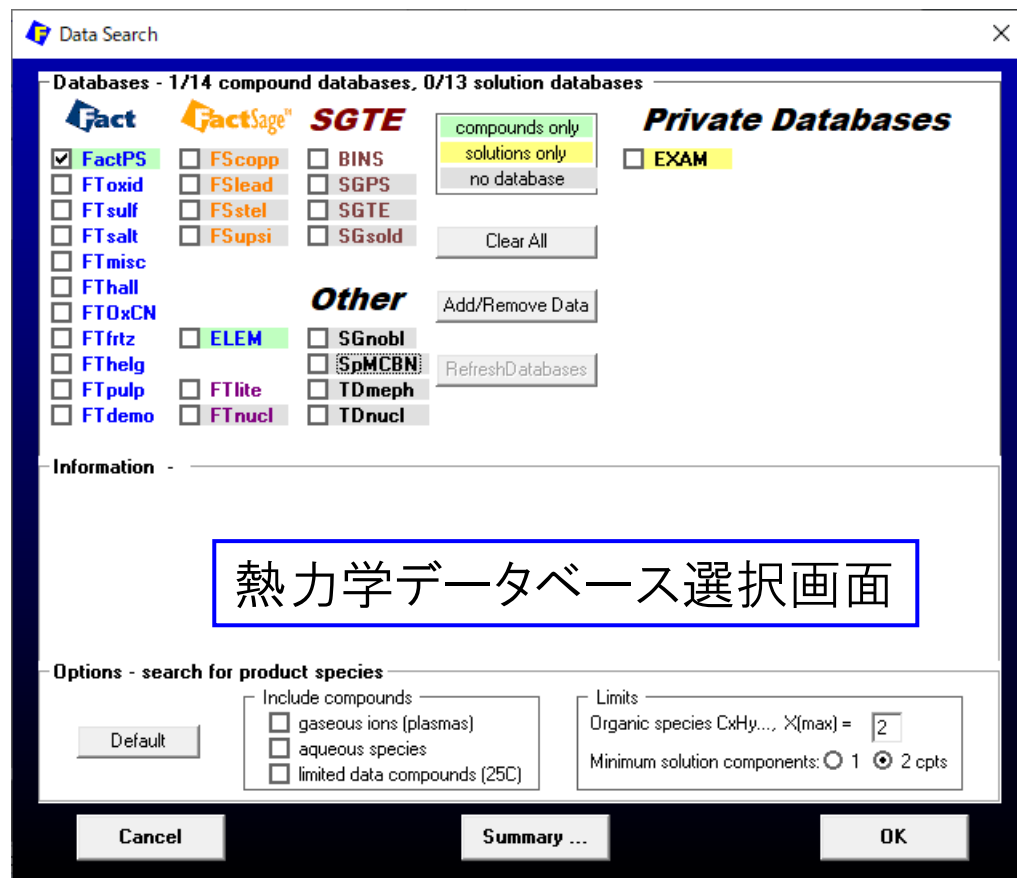
Note: there are no uploads - that is, no files are copied from your computer.

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 にアクセスできないなければならない
- 起動時に、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
FToxid	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	ホールエルー法の解析
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 the FactSage website interface. A red arrow points from the instruction text to the address bar, which contains <https://www.factsage.com>. Another red arrow points from the left sidebar to the 'FREE FACTSAGE DEMO & EDUCATION VERSION' button. The sidebar contains the following links: INTRODUCTION, DATABASE DOCUMENTATION, FACTSAGE APPLICATIONS, POSTERS AND PUBLICATIONS, ORDERING AND REPRESENTATIVES, PHASE DIAGRAMS & DOCUMENTATION DOWNLOAD, FACTSAGE PRODUCTS, CRCT CLIENTS, FACT-WEB, FREE FACTSAGE DEMO & EDUCATION VERSION, and FACTSAGE 8.2 ~ NEWS ~. The main content area features a 'FactSage 8.3' window with a menu bar (Information, Programs, Tools, Add-ons, Internet, About) and three columns of buttons: Info (Information, Databases, Documentation, View Data, Compound, Solution), Calculate (Reaction, Predom, EpH, Equilib, Phase Diagram, Calphad Optimizer), and Manipulate (Results, Mixture, Fact-XML, Figure, Viscosity, Quit). To the right is a book cover for 'PHASE DIAGRAMS AND THERMODYNAMIC MODELING OF SOLUTIONS' by ARTHUR PELTON. At the bottom, a note states: 'NOTE: Due to the current invasion of Ukraine, access to FactSageEdu, FactWeb and'.

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

有効期限を延長する方法、不具合の情報等が記載される

FactSage Demonstration Version - 個人 - Microsoft Edge

https://www.factsage.com/FSEdu_news.htm

Free FactSage 8.3 Demonstration Version

FactSage Education 8.3 - FactSageEdu

- replaces FactSage Education 8.2

~ News ~

(Revised 2023-10-18)
- refresh/reload the page to display the latest news

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.

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

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.

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**.

For information on the package and details on how to download and install **FactSage Education 8.3** on your computer visit [FactSage Education Package](#)

[FactSage Education 8.3 Report](#)

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

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:	john.smith@myworld.com
name (optional):	John Smith
affiliation (optional):	Smith Laboratory - Disney World

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.

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

The screenshot shows a web browser window with the URL `www.factsage.com/fsed...`. The page title is "Download FactSage Education Package". The form contains the following fields and text:

- 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** button
- Modified : April 17, 2024

Red annotations highlight the form fields and the privacy policy section, with arrows pointing to the Japanese instructions on the left and bottom.

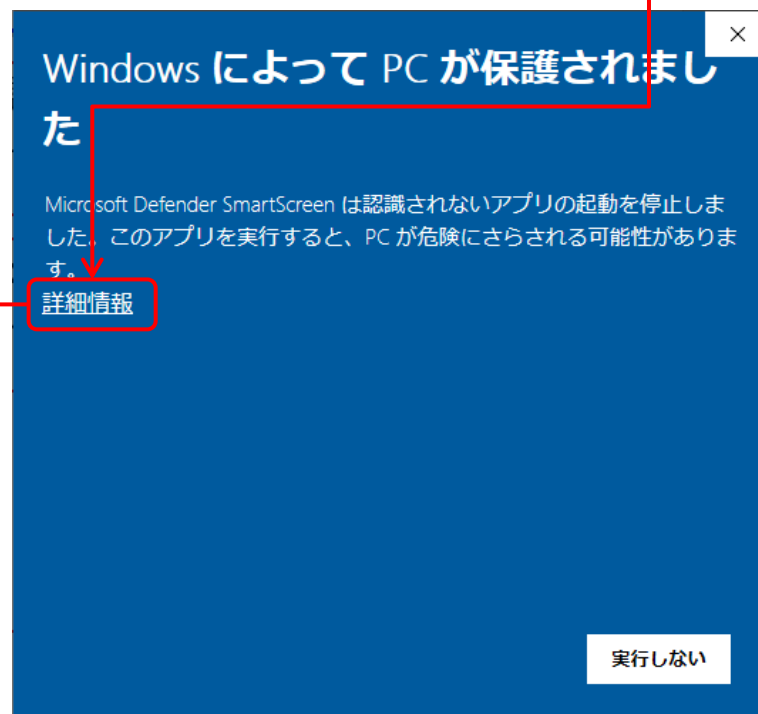
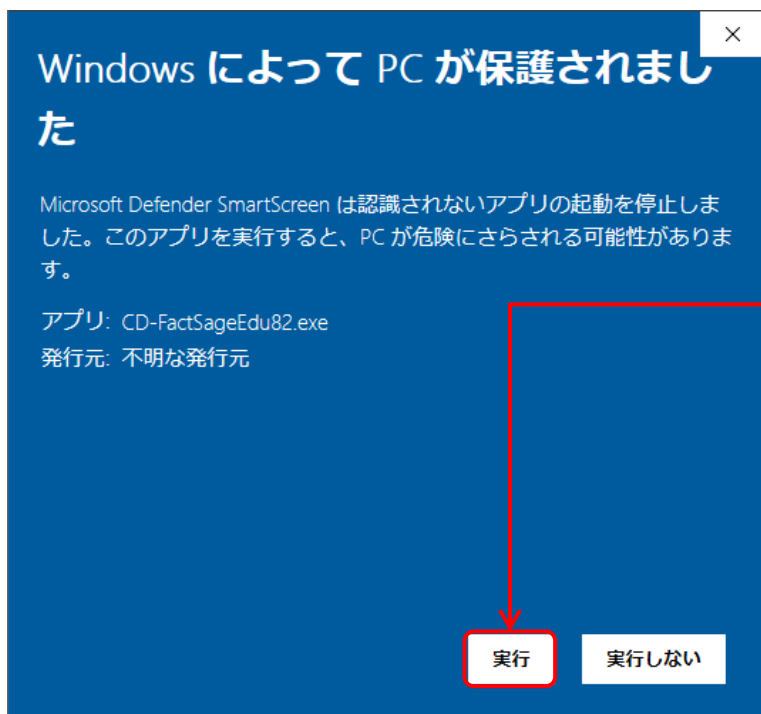
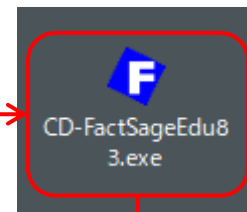
4. Privacy policy
を確認してメール
アドレスを入力。
名前と所属も入力
していただけると開
発者の励みになる
だろう

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

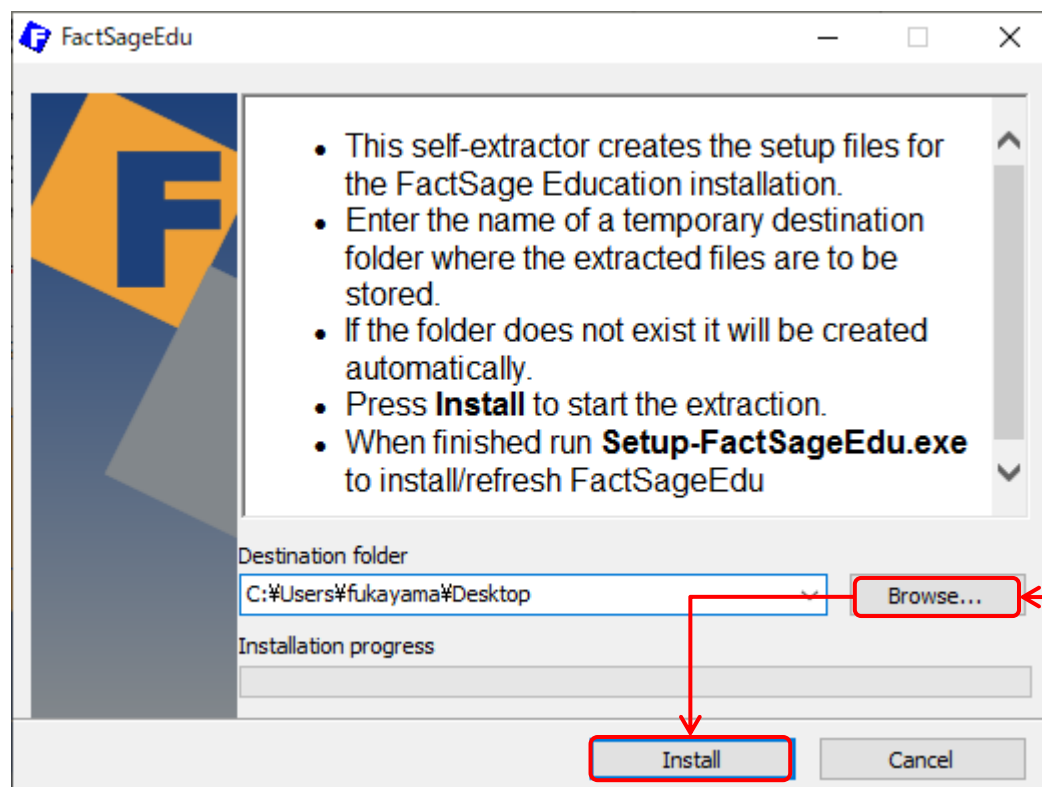
6. 開発元から英文メールが届く。メールに記載されているダウンロードリンクをクリックするとダウンロードが始まる。はじまらない場合は弊社にご連絡ください。ファイル名は CD-FactSageEdu83.exe であり、ファイルサイズは 414 MB 程度である

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



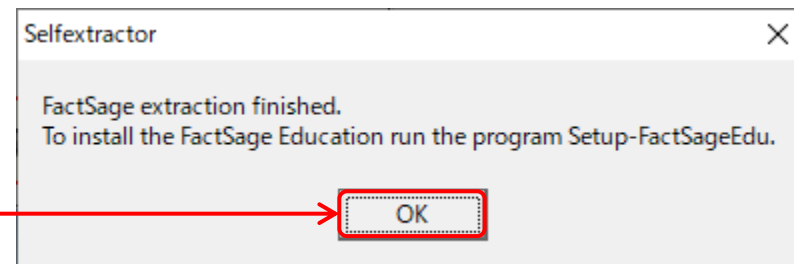
ダウンロードとインストール

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

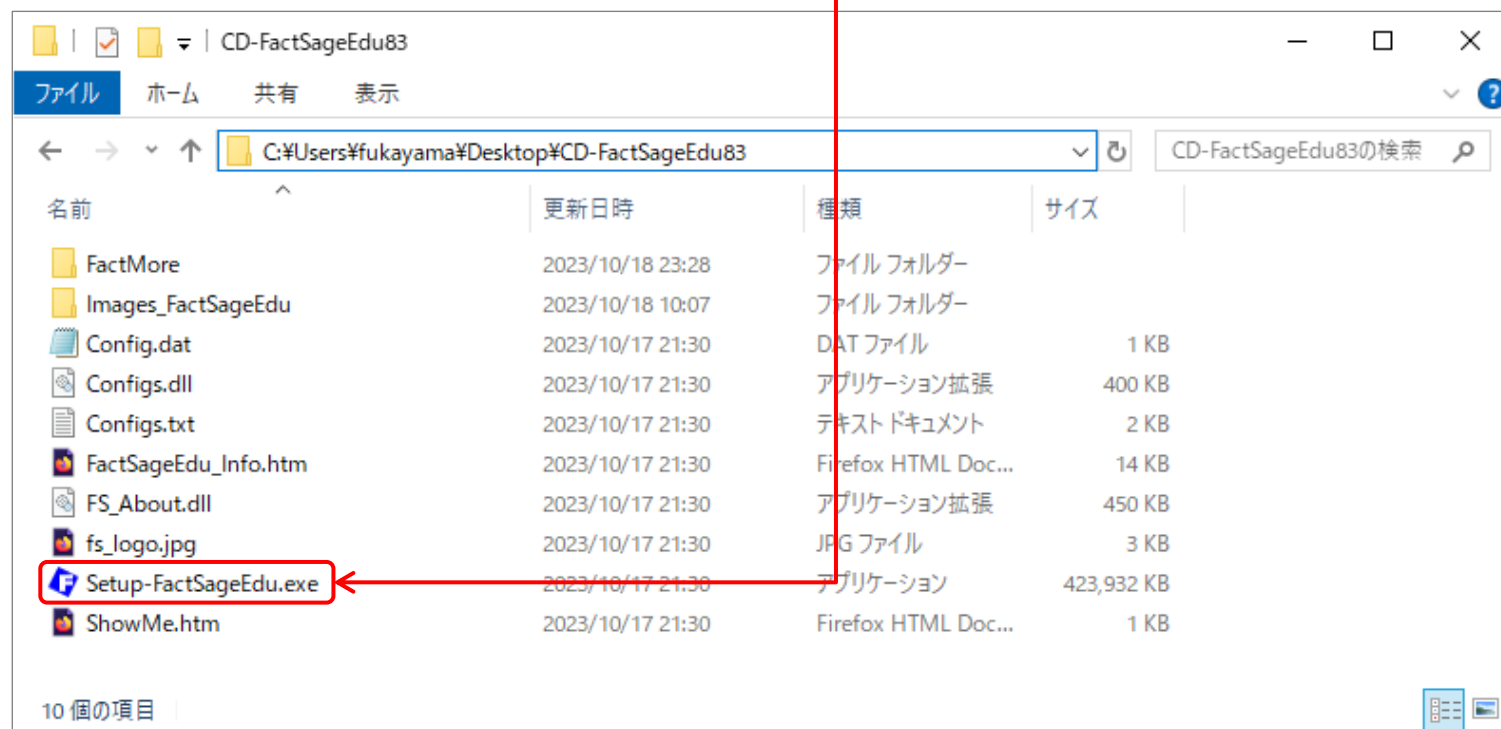


ダウンロードとインストール

9. 展開終了のメッセージ。OK をクリック

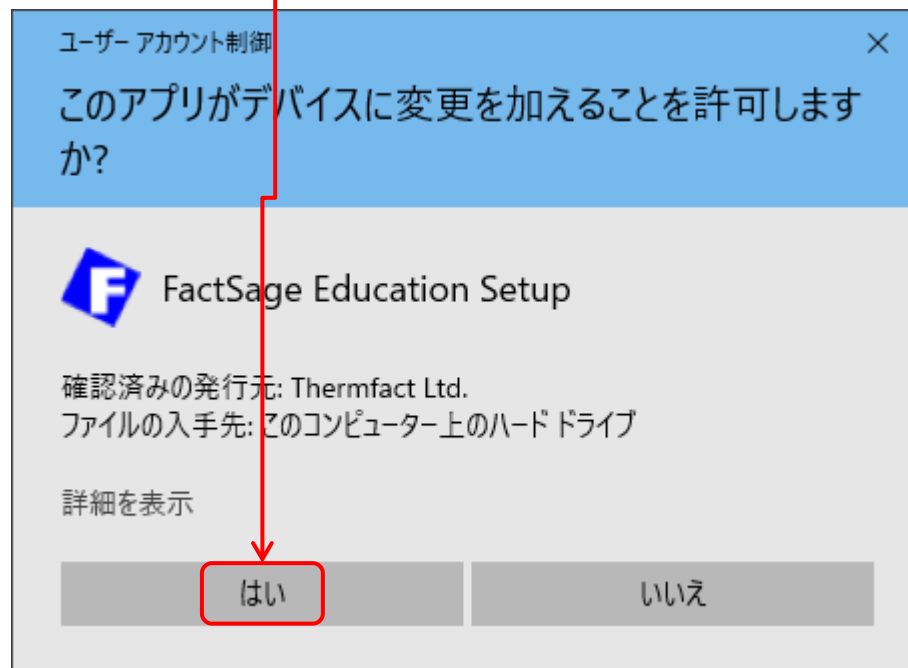


10. 展開して現れたフォルダーを開いて Setup-FactSageEdu.exe を起動

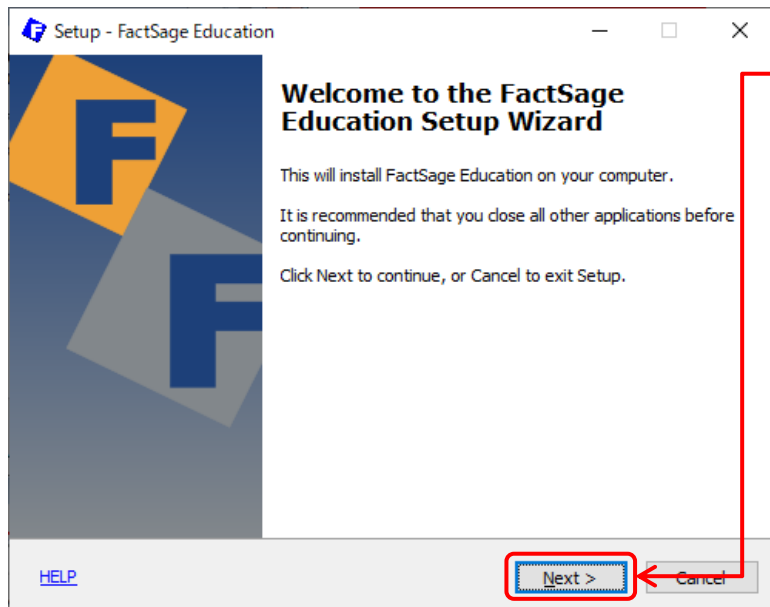


ダウンロードとインストール

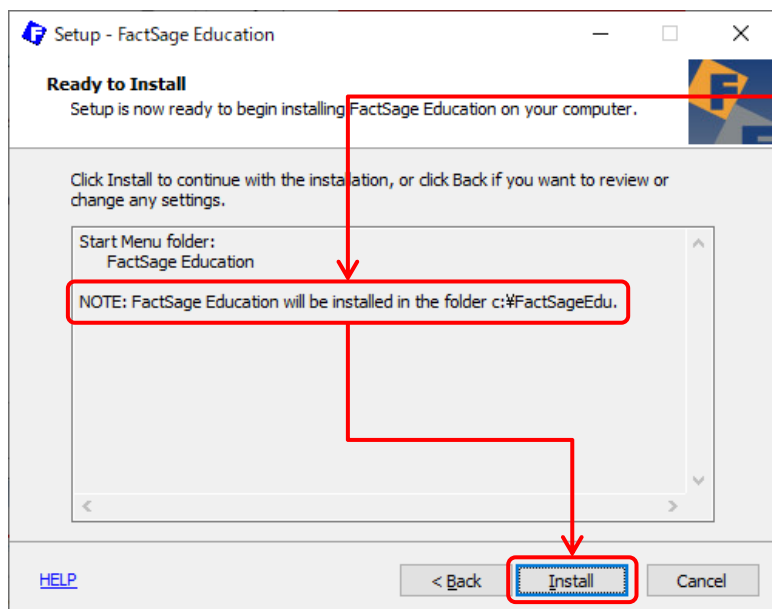
11. ユーザーアカウント制御の画面が表示された場合、許可する



ダウンロードとインストール

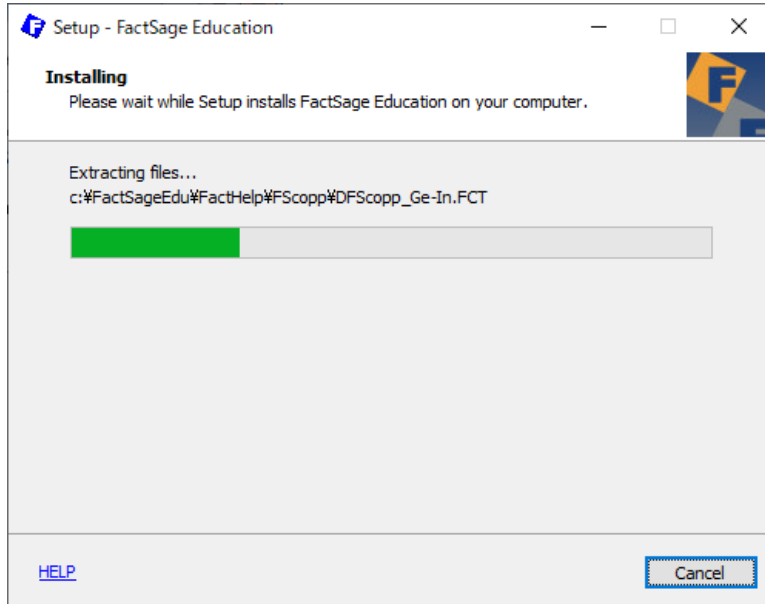


12. Next をクリック



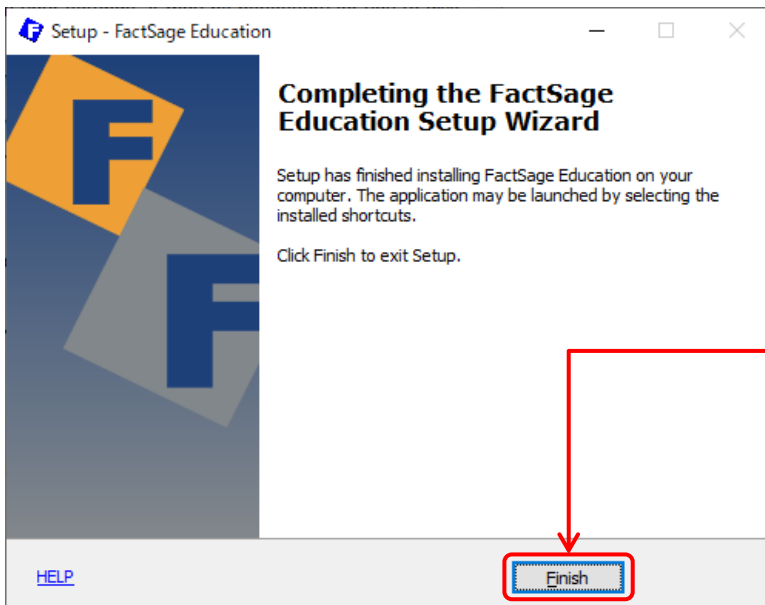
13. インストール先(c:\FactSageEdu)を確認して Install をクリック

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)

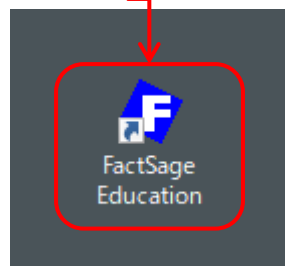
何かメッセージが表示されてインストールに失敗した場合、セキュリティソフトを一時的にオフにして再インストールを試してほしい



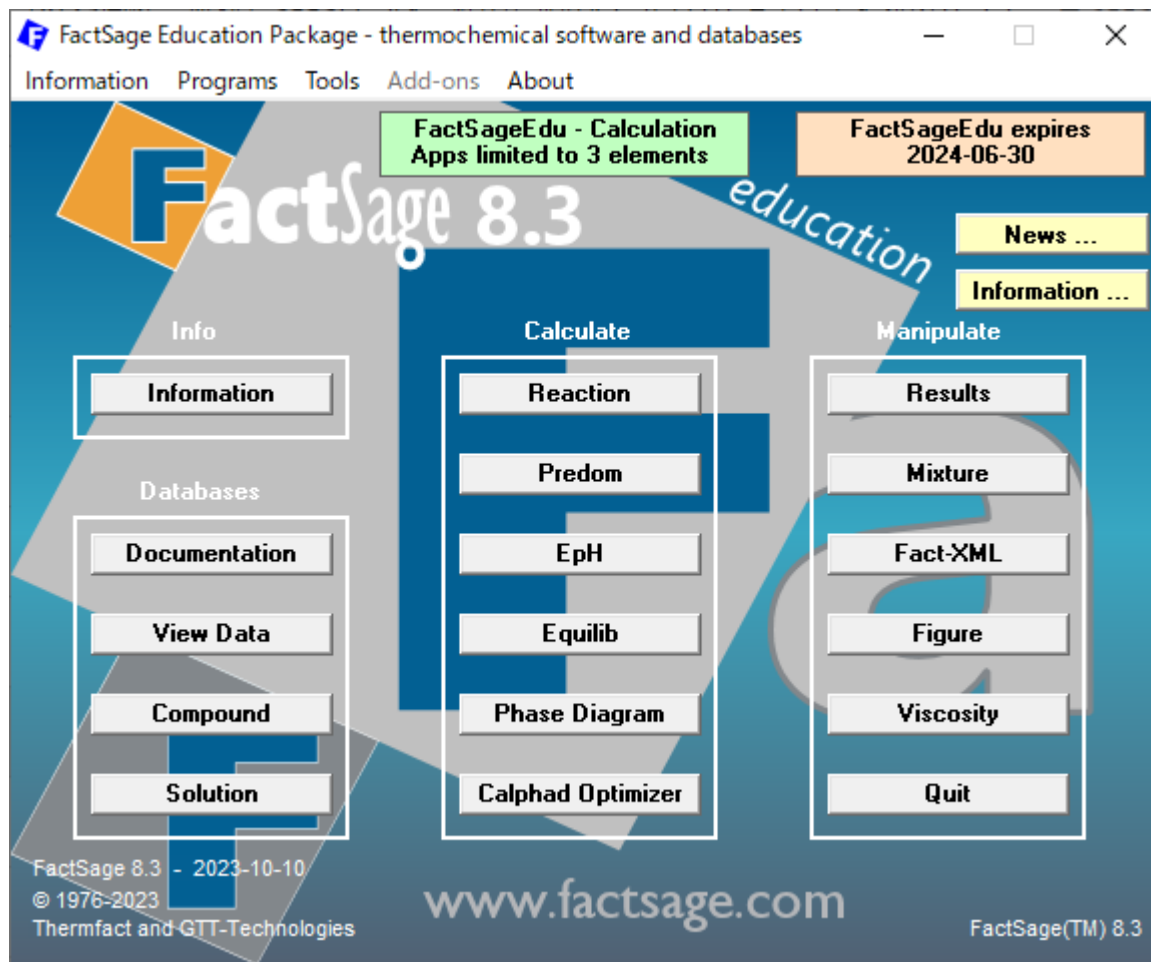
14. Finish をクリック

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



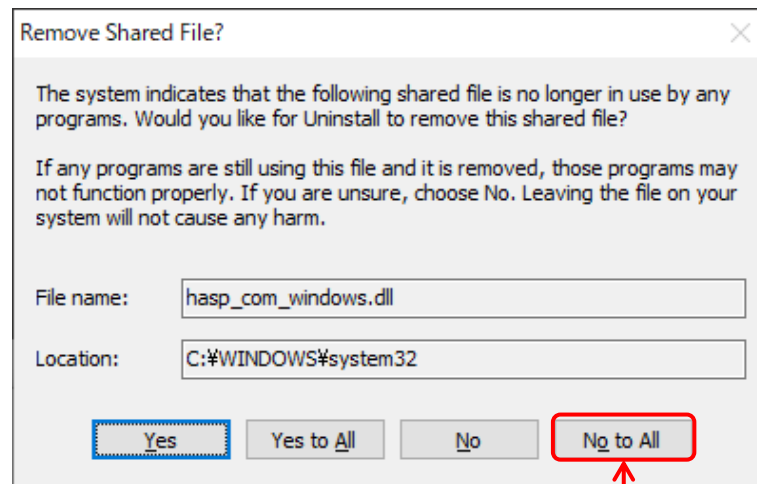
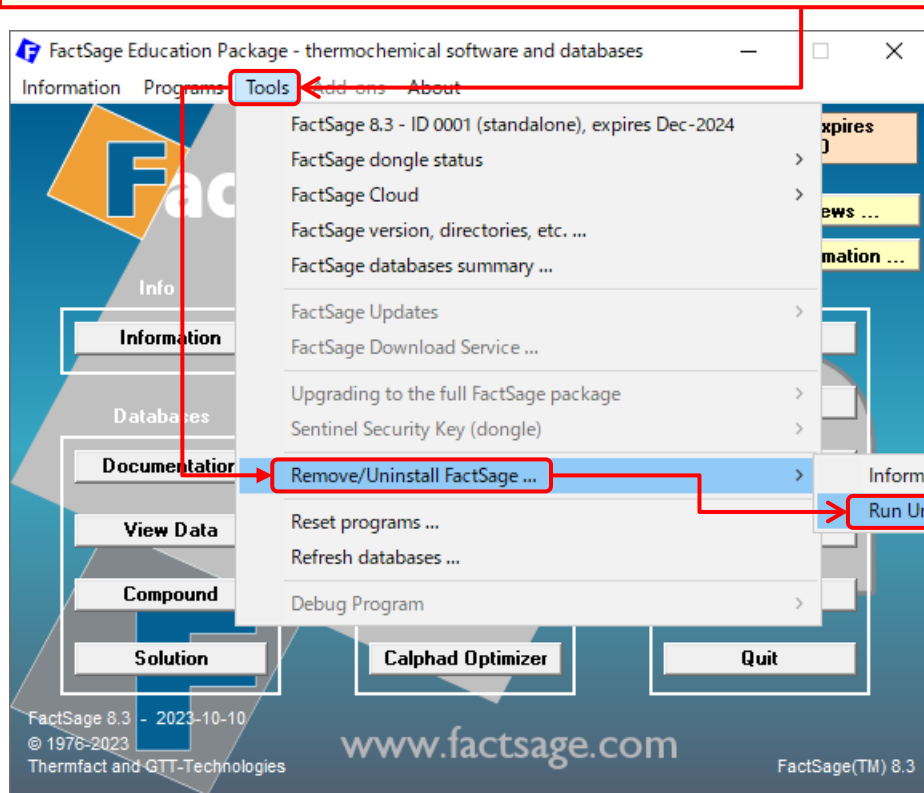
青い画面が表示されれば成功。
Equilib で H_2O の平衡計算をしてみてください



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



※途中、右の画面が表示されたら No to All をクリック

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。

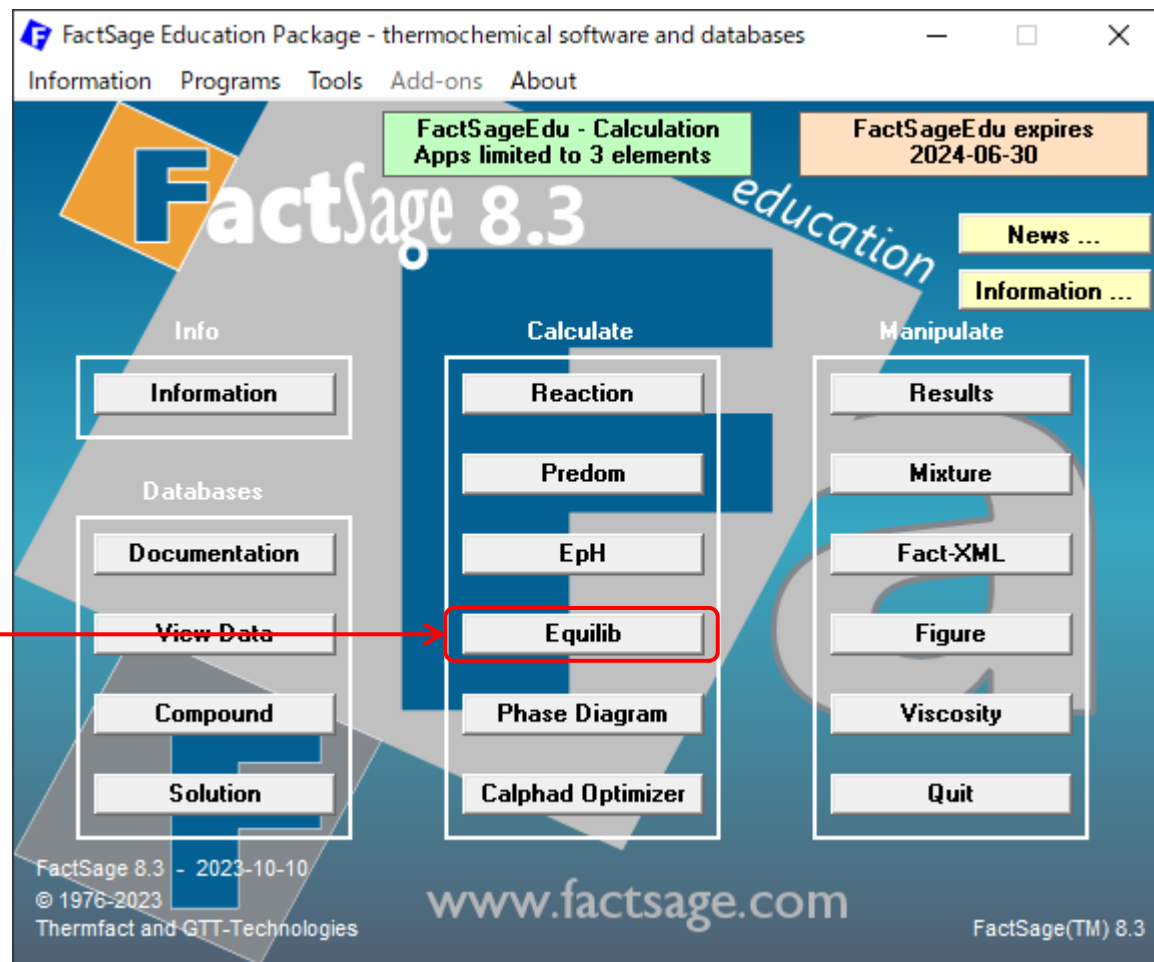
熱力学データベースに収録されている物質の数は、世界中の研究者が長年努力してきたにも関わらず数千種類に限られている。熱力学データが無いなどの理由で平衡状態で存在する物質を選択していない設定で計算すれば、当然ながら期待外れの予測結果になる。

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あまりないだろう。しかし複数の熱力学データベースを組み合わせる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

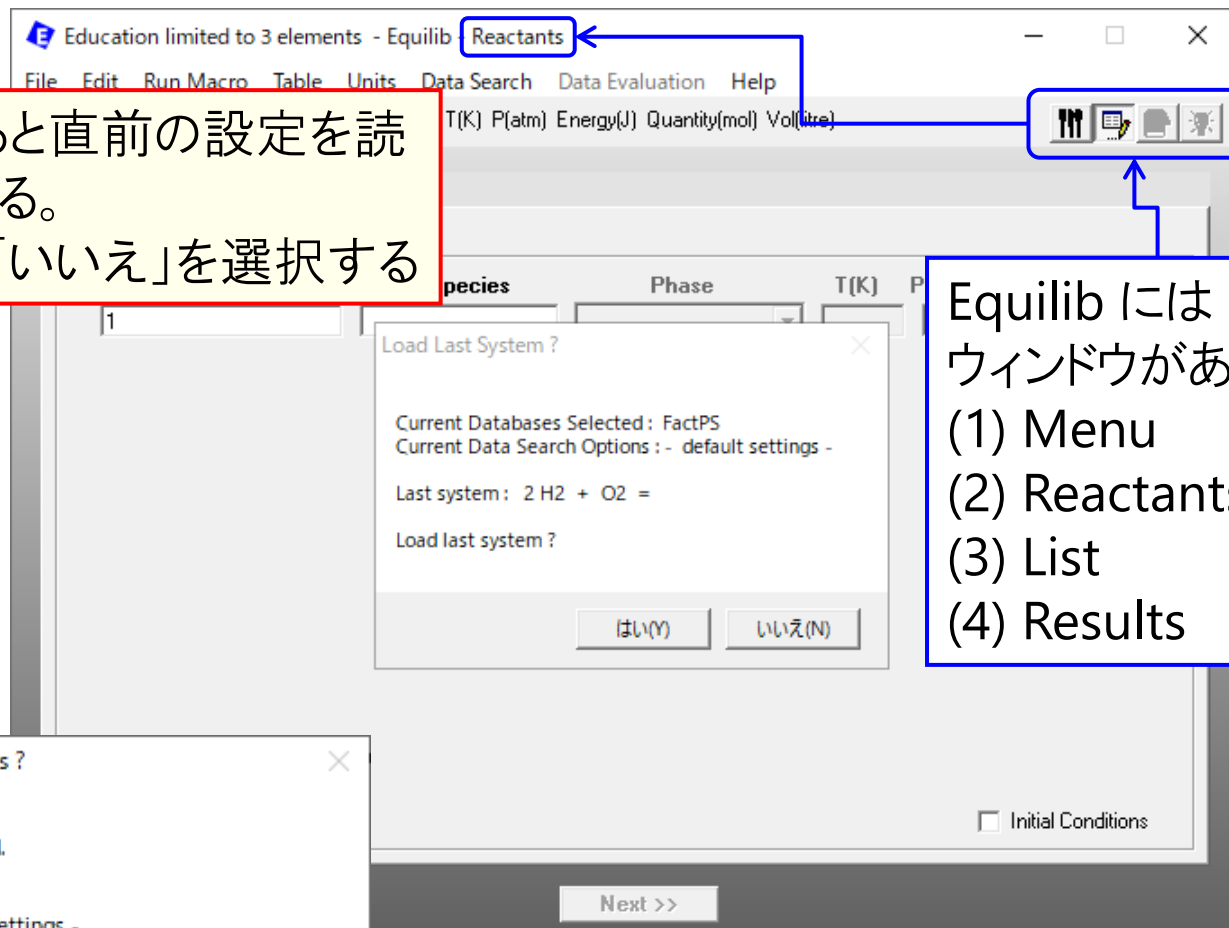
- 平衡状態の予測(熱力学平衡計算)
- 純物質データベースと溶体データベースを使用

Equilib の起動



Equilib の起動

Equilib を起動すると直前の設定を読み込むか尋ねられる。
新規設定のときは「いいえ」を選択する



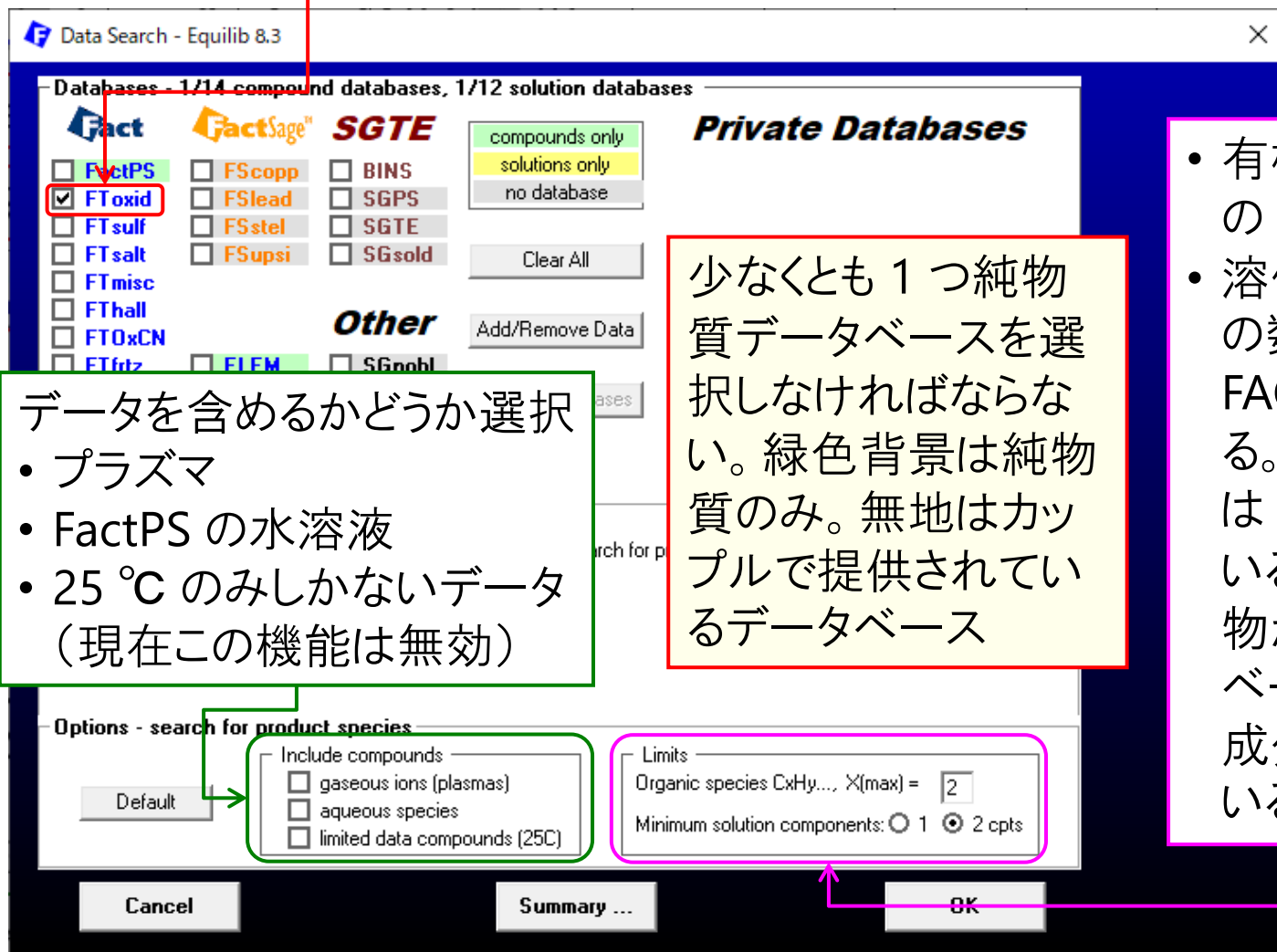
Equilib には 4 つのウィンドウがある。
(1) Menu
(2) Reactants
(3) List
(4) Results

「いいえ」を選択すると熱力学データベースの選択をそのままにするか尋ねられる。データベースを変更するときは「いいえ」を選択する

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)

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

- 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

The screenshot displays the FactSage software interface. The main window is titled "Equilib - Reactants" and has a menu bar with "File", "Edit", "Run Macro", "Table", "Units", "Data Search", "Data Evaluation", and "Help". A toolbar below the menu bar contains icons for file operations and calculations. A table with columns "Quantity(mol)", "Species", "Phase", "T(C)", "P(total)**", and "Stream#" is visible. The "Units" menu is highlighted, and a red arrow points from the text "Units または T(C) P(atm) ... Vol(litre) をクリックして、Units 画面で設定" to the "Units" menu item. Another red arrow points from the "Units" menu to the "Units: T(C), P(atm), Energy(J), Quantity(mol), Vol(litre)" dialog box. The dialog box has a yellow background and contains five groups of radio buttons for selecting units: Temperature (Kelvin, K; Celsius, -C; Fahrenheit, -F), Pressure (bar; atm; psi; Pa; GPa), Energy (J; cal; Btu; kwh), Quantity (mol; g; lb; kg; tonne), and Volume (litre (dm3); ft3). Below these groups, the "Universal gas constant:" is listed with three values: $R = 8.314510 \text{ J/mol-K}$, $= 8.314510/4.184 = 1.98722... \text{ cal/mol-K}$, and $= 22.4141/273.15 = 0.0820578... \text{ l-atm/mol-K}$. At the bottom of the dialog box are buttons for "Cancel", "SI", "Eng", and "OK". The status bar at the bottom of the main window shows "FactSageEdu", "Compound: 1/14 databases", and "Solution: 1/12 databases".

Equilib - Reactants

File Edit Run Macro Table Units Data Search Data Evaluation Help

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

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

1

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

Temperature

- ☐ Kelvin, K
- ☒ Celsius, -C
- ☐ Fahrenheit, -F

Pressure

- ☐ bar
- ☒ atm
- ☐ psi
- ☐ Pa
- ☐ GPa

Energy

- ☒ J
- ☐ cal
- ☐ Btu
- ☐ kwh

Quantity

- ☒ mol
- ☐ g
- ☐ lb
- ☐ kg
- ☐ tonne

Volume

- ☒ litre (dm3)
- ☐ ft3

Volume units are set by pressure units.

Universal gas constant:

$R = 8.314510 \text{ J/mol-K}$
 $= 8.314510/4.184 = 1.98722... \text{ cal/mol-K}$
 $= 22.4141/273.15 = 0.0820578... \text{ l-atm/mol-K}$

Cancel SI Eng OK

Next >>

FactSageEdu Compound: 1/14 databases Solution: 1/12 databases

H₂O の平衡計算

H₂O の平衡状態を解析する。Equilib の基本操作を学ぶ。

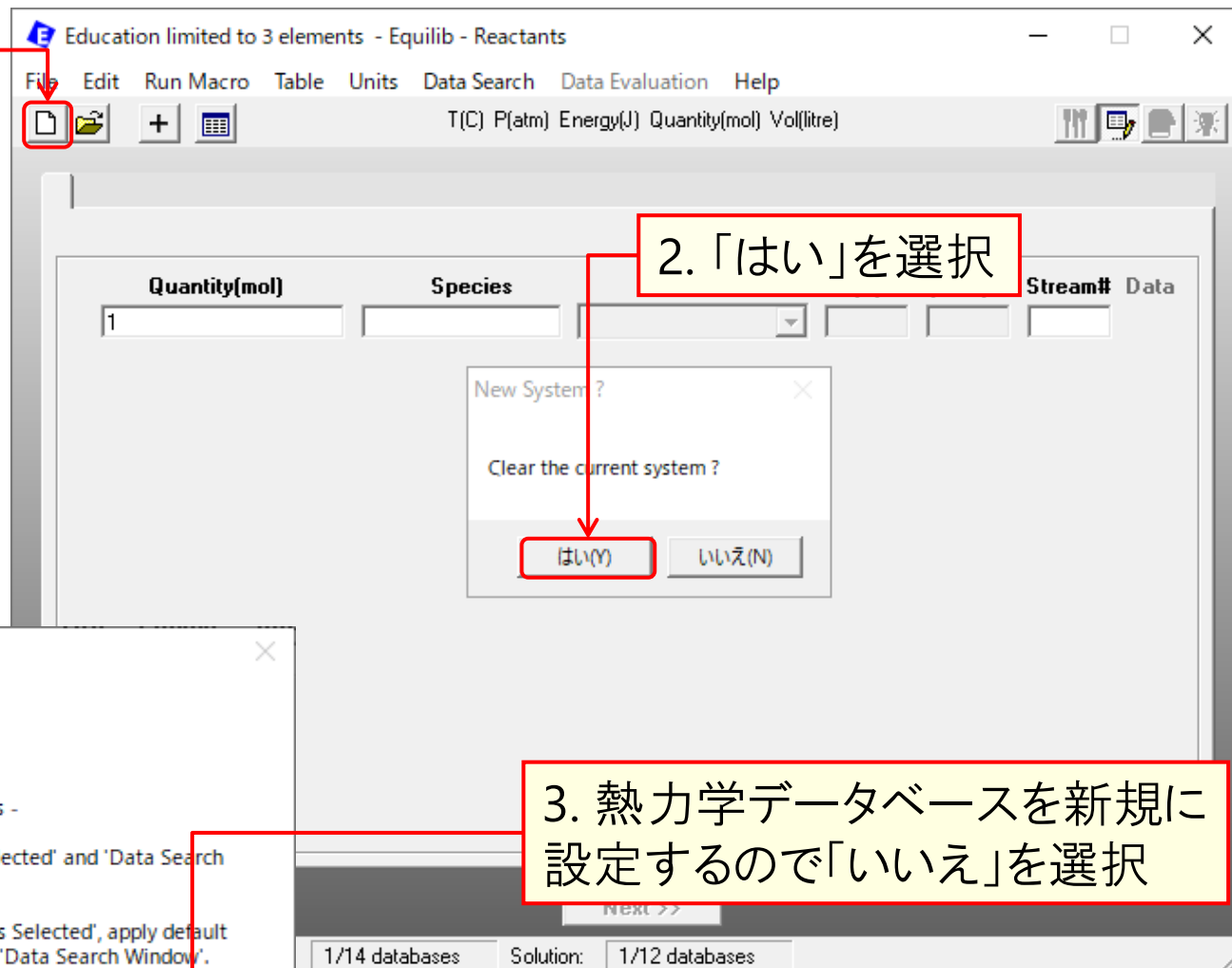
▼ 操作の流れ

- (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)

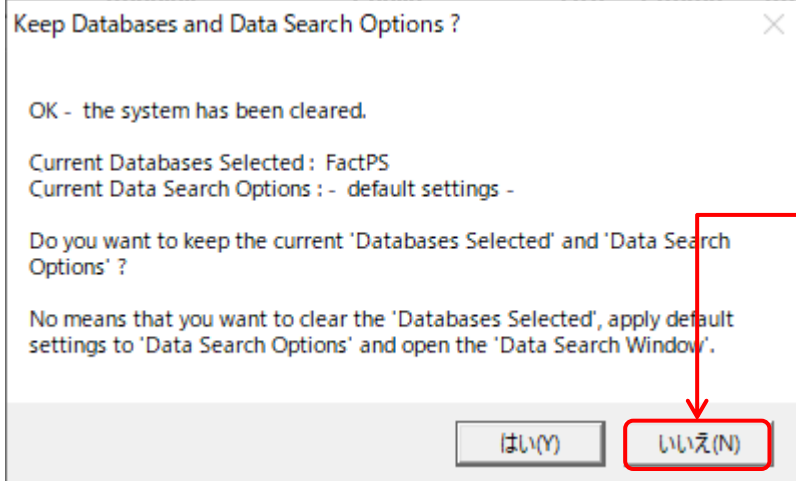
H₂O の平衡計算

■ 最初に H₂O 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



2. 「はい」を選択



3. 熱力学データベースを新規に設定するので「いいえ」を選択

H₂O 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

Data Search - Equilib 8.3

Databases - 1/14 compound databases, 0/12 solution databases

Fact **FactSage™** **SGTE**

☒ **FactPS** ☐ FScomp ☐ BINS ☐ compounds only ☐ solutions only ☐ no database

☐ FToxid ☐ FSlead ☐ SGPS ☐ Clear All

☐ FTsulf ☐ FSstel ☐ SGTE

☐ FTsalt ☐ FSupsi ☐ SGsold

☐ FTmisc ☐ Add/Remove Data

☐ FThall ☐ RefreshDatabases

☐ FT0xCN **Other**

☐ FTfritz ☐ ELEM ☐ SGnobl

☐ FThelg ☐ SpMCBN

☐ FTpulp ☐ FTlite ☐ TDmeph

☐ FTdemo ☐ FTnucl ☐ TDnucl

Information -

Click on 'Default' for the following recommended settings in the search:

- no gaseous ions (plasmas)
- no aqueous species
- CxHy, Y(max) = 2
- Minimum solution components = 2 cpts.

Options - search for product species

Include compounds:

- ☐ gaseous ions (plasmas)
- ☐ aqueous species
- ☐ limited data compounds (25C)

Limits:

Organic species CxHy..., X(max) = 2

Minimum solution components: ☐ 1 ☒ 2 cpts

Cancel Summary ... **OK**

H₂O 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

Education limited to 3 elements - Equilib - Reactants

File Edit Run Macro Table Units Data Search Data Evaluation Help

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

物質を追加するときは + をクリック

Quantity(mol)	Species	Phase	T(C)	P(total)**	Stream#	Data
1	H2O				1	

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。H₂O の代わりに H₂ + 0.5 O₂ と入力しても同じ結果になる

8. Next をクリック

☐ Initial Conditions

Next >>

databases: Solution: 0/12 databases

H₂O 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 °C, 1 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

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

混合気体の成分を選択
する場合は gas を右ク
リック ⇒ 次ページ

溶体相の表示。
FactPS に溶体相はな
いので表示されない

Compound species

Compound species	Count
+ gas <input checked="" type="radio"/> ideal <input type="radio"/> real	9
- aqueous	0
+ pure liquids	2
- pure solids	0

Solution phases

*	+	Base-Phase	Full Name
溶体相の表示。 FactPS に溶体相はないので表示されない			

Legend

☒ Show ☐ all ☐ selected

species: 0
solutions: 0

Final Conditions

<A>		T(C)	P(atm)	Product H(J)
10	steps	25 150	1	

Equilibrium

☒ normal ☐ normal + transitions
☐ transitions only ☐ open

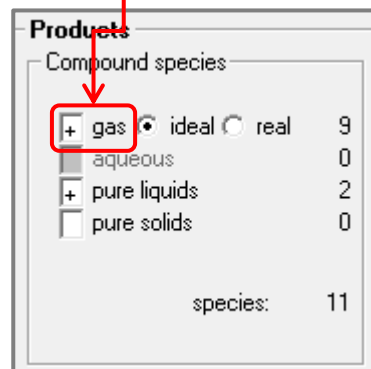
- no time limit -

Calculate >>

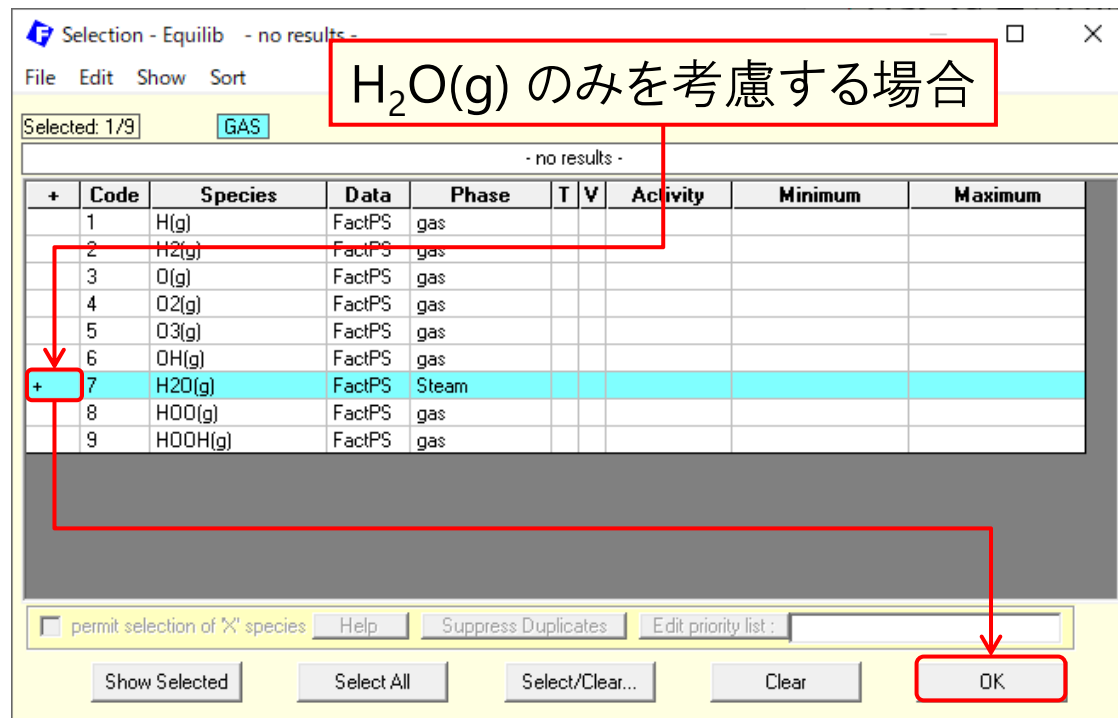
9. 温度が 25 °C と 150 °C の場合を一度に計算。圧力は 1 atm に設定。平衡状態におけるエンタルピー (Product H(J)) は計算して求めたいので空白

H₂O の平衡計算

gas を右クリック



H₂O(g) のみを考慮する場合

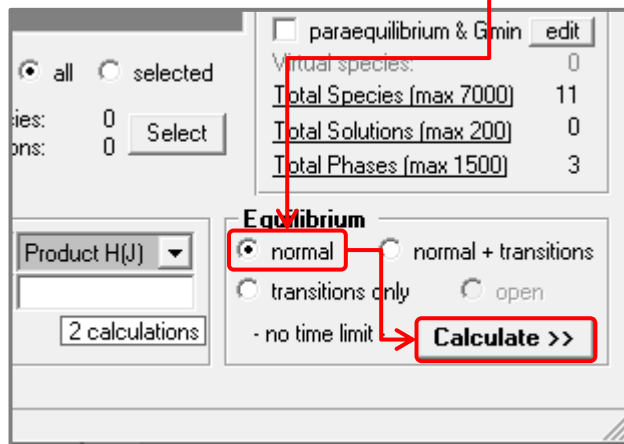


平衡計算に考慮しない物質を設定する場合の例

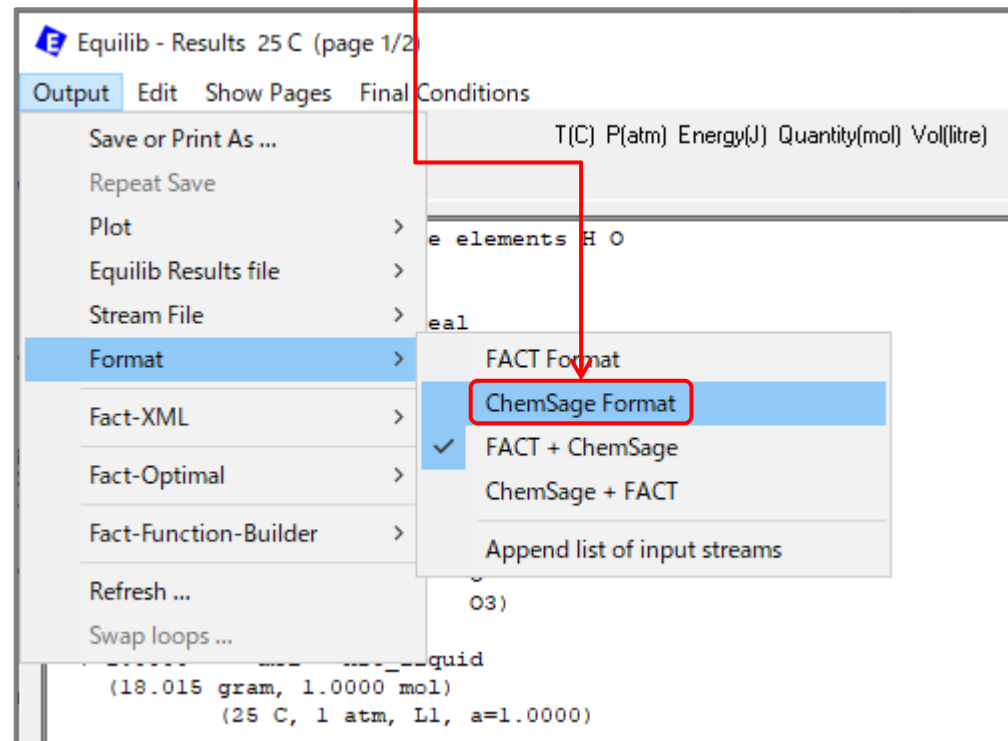
- 準安定相の挙動を調べる場合。Fe-C 系では、安定になるまで長時間必要な C(s) を外して、準安定相の Fe₃C(s) の挙動を調べることがある。
- 有効温度範囲外の温度で計算する場合(気体の成分は間引かないことが多い)
- 選択した化学種の数 Equilib で扱える限界の数(7000)を超える場合。
- 特定の物質(例、混合気体)のギブズエネルギーを求めたい場合。特定の物質のみ選択する

H₂O の平衡計算

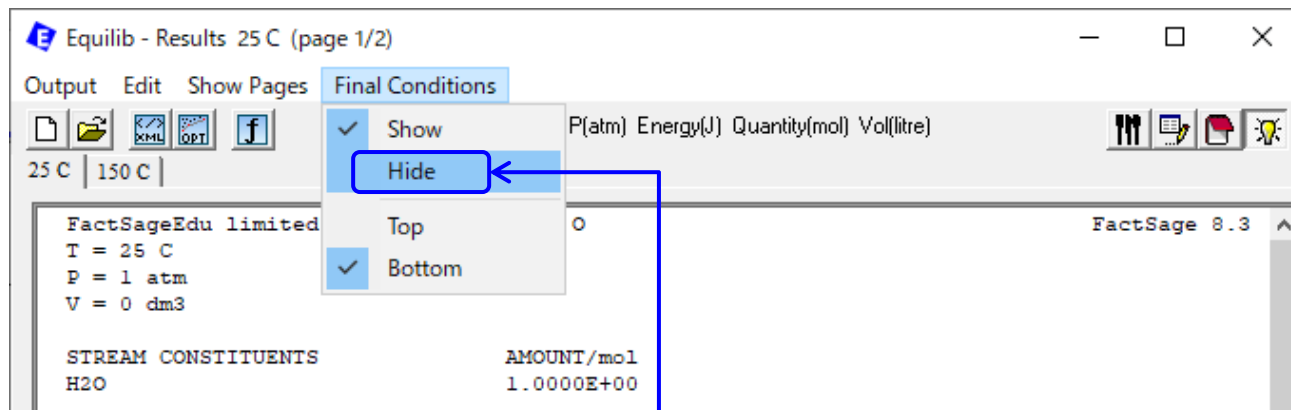
11. normal を選択して Calculate をクリック



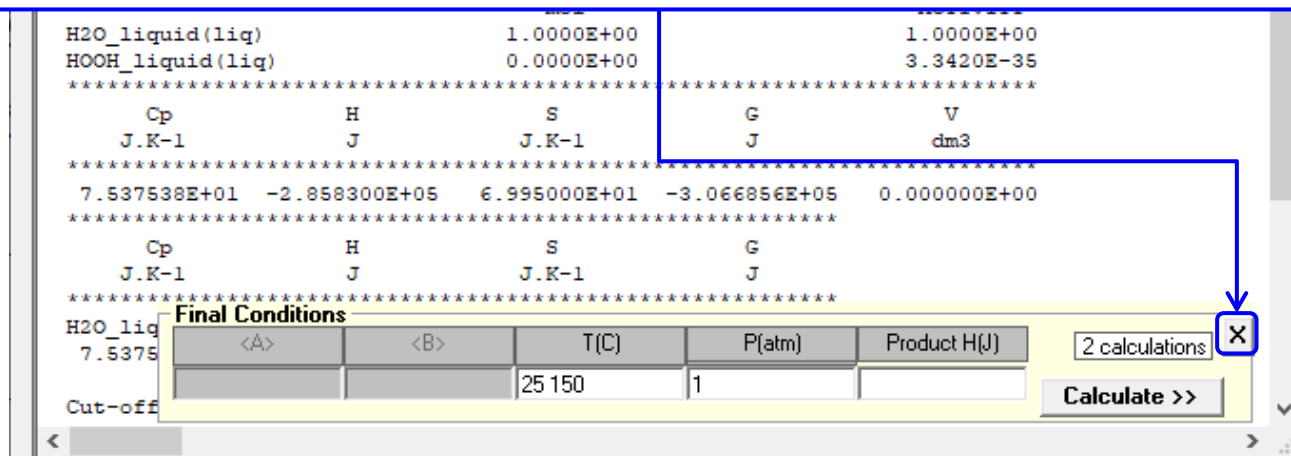
12. 出力形式を選択。
弊社では ChemSage フォーマットを推奨



H₂O 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



H₂O の平衡計算

25 °C の場合

計算設定

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)

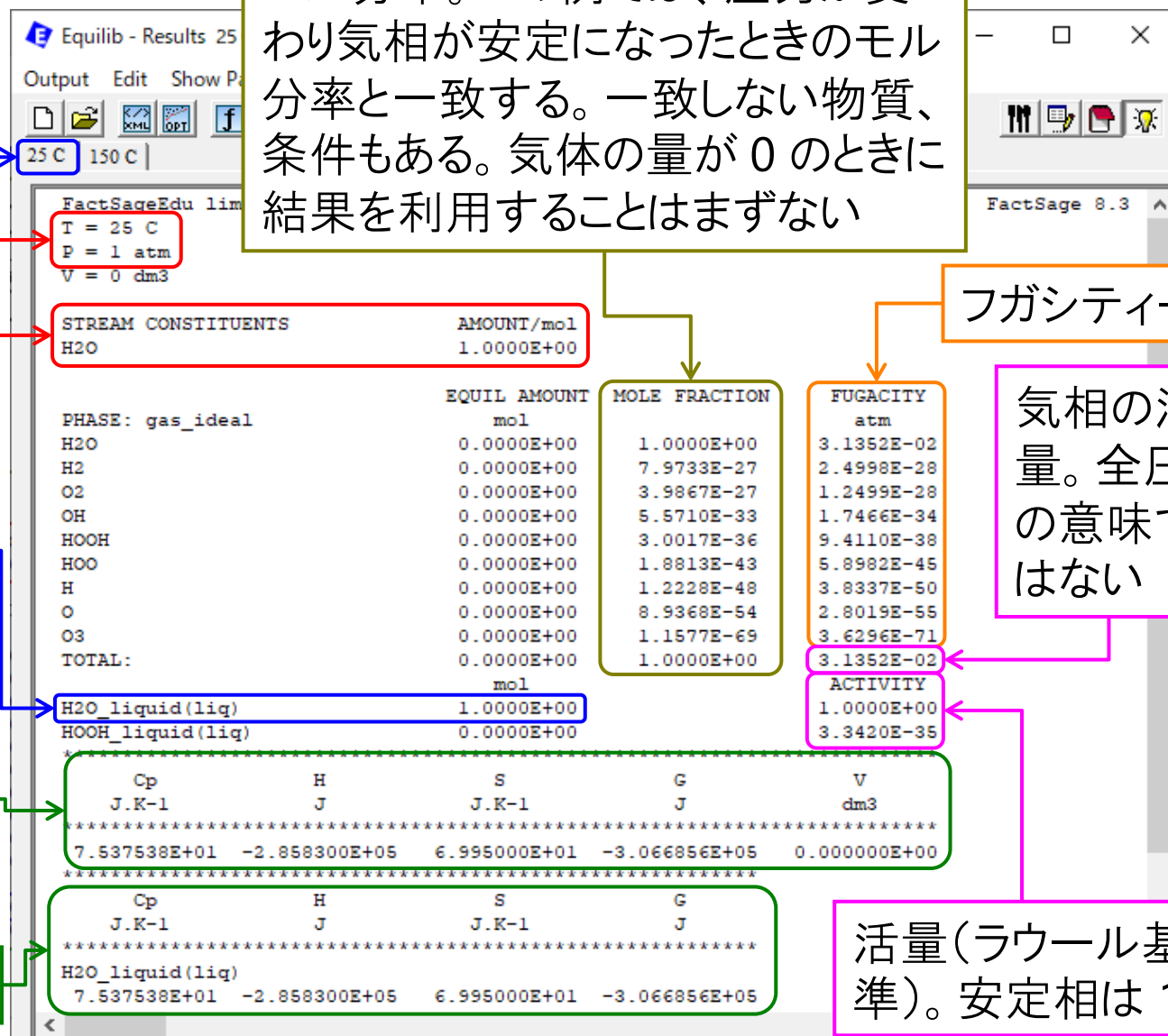
安定相の熱力学量

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

フガシティー

気相の活量。全圧の意味ではない

活量(ラウル基準)。安定相は 1



H₂O 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)

混合気体の組成。
H₂O 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

温度など
条件を変えて計算
する場合

気相の活量
(ラウール基
準)。安定相
なので 1

Equilib - Results

Output Edit Sh

25 - 150 C -

FactSageEdu limited to the elements H O

T = 150 C
P = 1 atm
V = 34.723 dm3

STREAM CONSTITUENTS

	AMOUNT/mol
H2O	1.0000E+00

	EQUIL AMOUNT mol	MOLE FRACTION	FUGACITY atm
PHASE: gas_ideal			
H2O	1.0000E+00	1.0000E+00	1.0000E+00
H2	5.7955E-19	5.7955E-19	5.7955E-19
O2	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
O3	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

	mol	ACTIVITY
H2O_liquid(liq)	0.0000E+00	2.2190E-01
HOOH_liquid(liq)	0.0000E+00	4.3860E-26

Cp	H	S	G	V
J.K-1	J	J.K-1	J	dm3
3.446907E+01	-2.375865E+05	2.006131E+02	-3.224759E+05	3.472278E+01

Cp	H	S	G
J.K-1	J	J.K-1	J
3.446907E+01	-2.375865E+05	2.006131E+02	-3.224759E+05

gas_ideal

3.446907E+01	-2.375865E+05	2.006131E+02	-3.224759E+05
--------------	---------------	--------------	---------------

H₂O の平衡計算

● 練習 1

H₂O は 2500 °C, 1 atm で混合気体になります。H₂(g) の分圧を予測してください。

● 練習 2

(mole) 2 H₂O + 0.79 N₂ + 0.21 O₂ について、25 °C, 1 atm における平衡状態を計算して、H₂O(g) の分圧を予測してください。

● 練習 3

Ag₂O を加熱すると、Ag と O₂ 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 °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

H₂O の平衡計算

● 練習 4

水は電離します。25 °C、1 atm における H₂O 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 H₂O 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。

H₂O(s), H₂O(liq), H₂O(g)

H₂O 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

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

Education limited to 3 elements - Equilib - Reactants

File Edit Run Macro Table Units Data Search Data Evaluation Help

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

Quantity[g]	Species	Phase	T(C)	P(total)**	Stream#	Data
1	H2O	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.

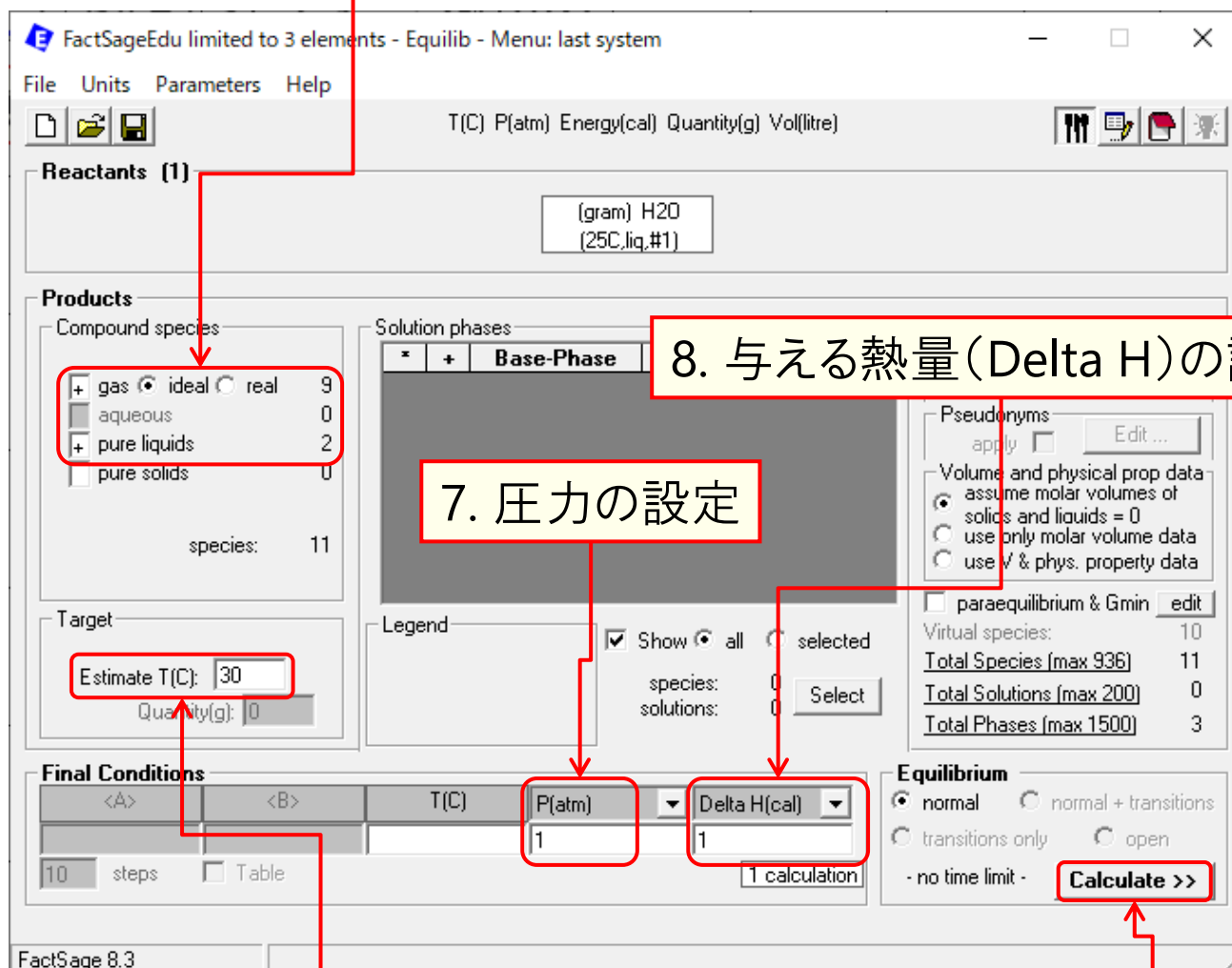
☒ Initial Conditions

Next >>

FactSageEdu Compound: 1/14 databases Solution: 0/12 databases

H₂O 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

10. Calculate をクリック

H₂O の平衡計算(水の加熱)

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 FactSage 8.3

*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

PHASE:	EQUIL AMOUNT	MOLE FRACTION	FUGACITY
	mol		atm
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	ACTIVITY
H2O_liquid(liq)	1.0000E+00	1.0000E+00
HOOH_liquid(liq)	0.0000E+00	

DELTA Cp	DELTA H	DELTA S	DELTA G
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

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

設定した ΔH 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

H₂O 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 mol N₂ + 210 mol O₂ 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。N₂ と O₂ の Stream を同じにすると N₂ と O₂ の混合気体、別にすると、N₂ と O₂ 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

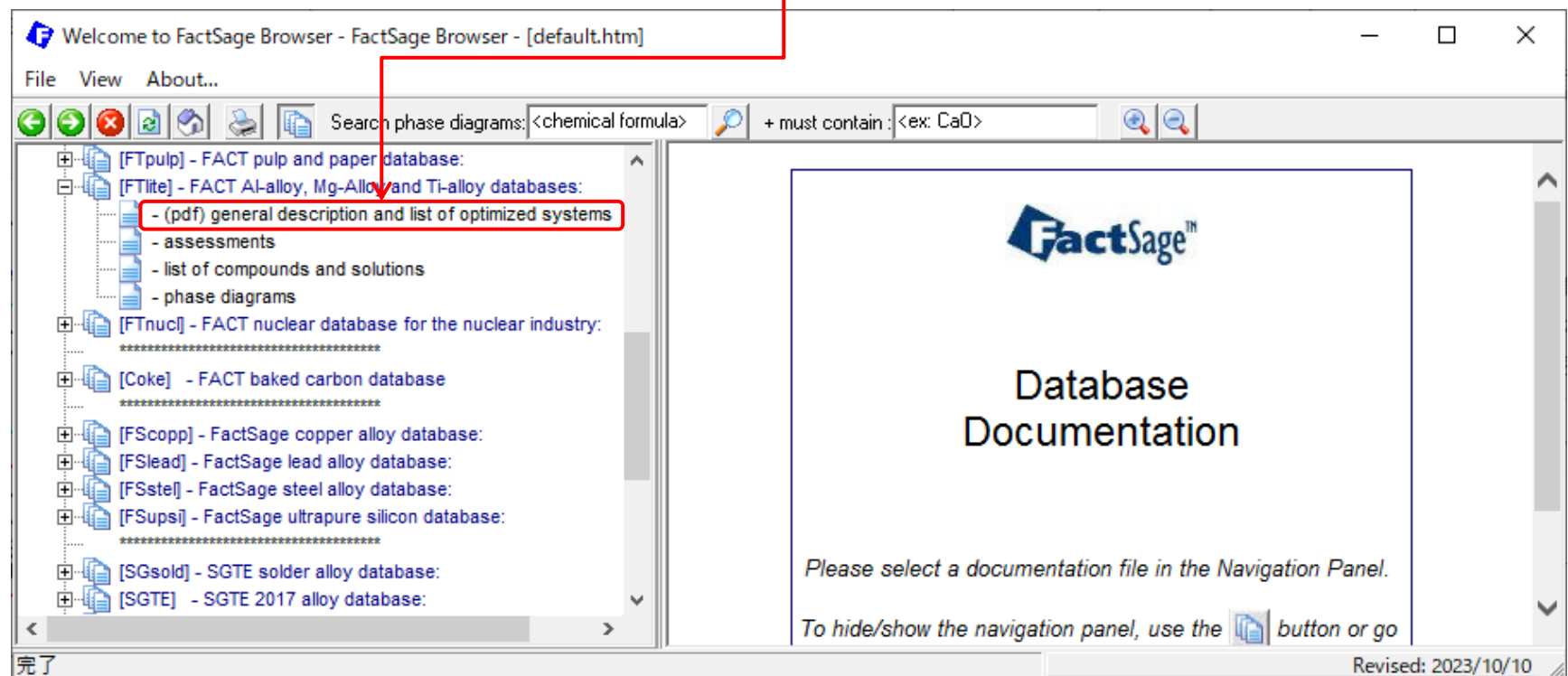
Al-Mg-Si 系 (A6101) の挙動を予測する。

FTlite データベースを用いて解析する。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 \Rightarrow (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

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

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.

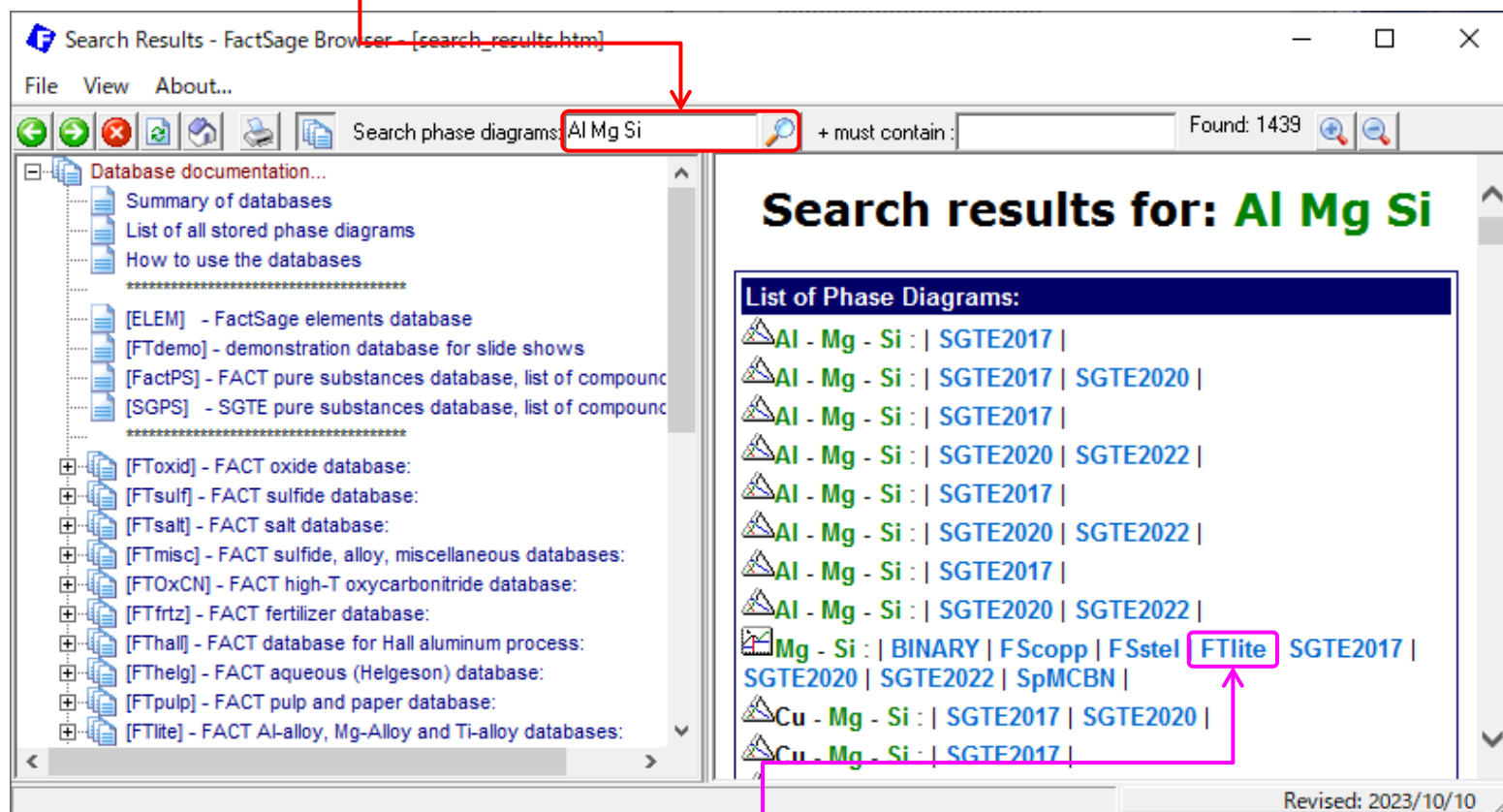
Phase selection in the EQUILIB or PHASE DIAGRAM modules using FTLite is simple: simply follow these instructions:

- 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

Education limited to 3 elements - Equilib - Reactants

File Edit Run Macro Table Units Data Search Data Evaluation Help

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

1 - 3

Quantity(g)	Species	Phase	T(C)	P(total)**	Stream#	Data
0.7	Si				1	
+ 0.8	Mg				1	
+ 98.5	Al				1	

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

Database evaluation

Elements: Mg Al Si Search

FScopt (binaries) FSlead (binaries) FSstel (binaries) FTlite (binaries) SGNobl (binaries) SpMCBN (binaries)

	12	13	14
	Mg	Al	Si
12	Mg	U	
13	Al	Q	U
14	Si	Q	Q

Legend:

- Top quality
- High quality
- Estimated
- Rough
- Noble gas

Model descriptions:

- BW Liquid model = Bragg-Williams Approximation
- Q Liquid model = Modified Quasichemical Model in the Pair
- id Ideal model for Liquid, FCC-A1, BCC-A2, HCP-A3 and L

Note that these are only for binary evaluations, ternary evaluations may differ from database to database.

Close

溶融合金のモデルは修正擬化学モデル

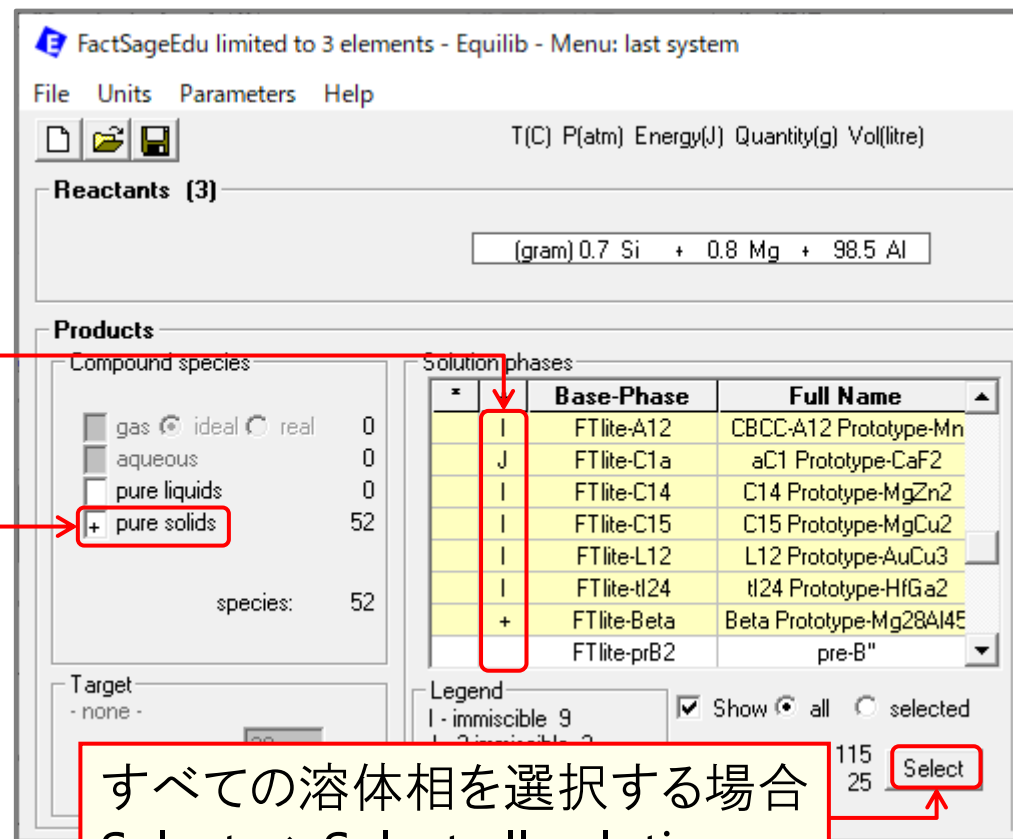
すべて Top quality なので悪くない状況。三元系は Documentation ⇒ general description で確認する

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



すべての溶体相を選択する場合
Select => Select all solutions

アルミニウム合金の平衡計算

FactSageEdu limited to 3 elements - Equilib - Menu: last system

File Units Parameters Help

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

Reactants [3]

(gram) 0.7 Si + 0.8 Mg + 98.5 Al

Products

Compound species

gas ☒ ideal ☐ real 0

aqueous 0

pure liquids 0

pure solids 52

species: 52

Solution phases

*	+	Base-Phase	Full Name
	I	FTlite-A12	CBCC-A12 Prototype-Mn
	J	FTlite-C1a	aC1 Prototype-CaF2
	I	FTlite-C14	C14 Prototype-MgZn2
	I	FTlite-C15	C15 Prototype-MgCu2
	I	FTlite-L12	L12 Prototype-AuCu3
	I	FTlite-tl24	tl24 Prototype-HfGa2
	I	FTlite-Beta	Beta Prototype-Mg28Al45

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) 167
Total Solutions (max 200) 25
Total Phases (max 1500) 77

Final Conditions

<A> T(C) P(atm) Product H(J)

10 steps ☐ Table 51+ calculations

200 700 10 1

Equilibrium

☐ normal ☒ normal + transitions

☐ transitions only ☐ open

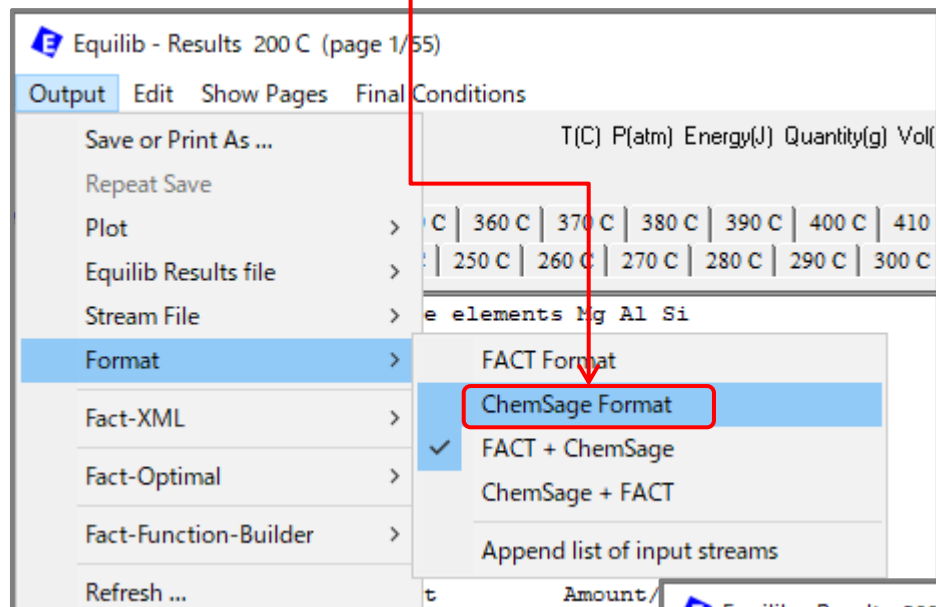
- no time limit - Calculate >>

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

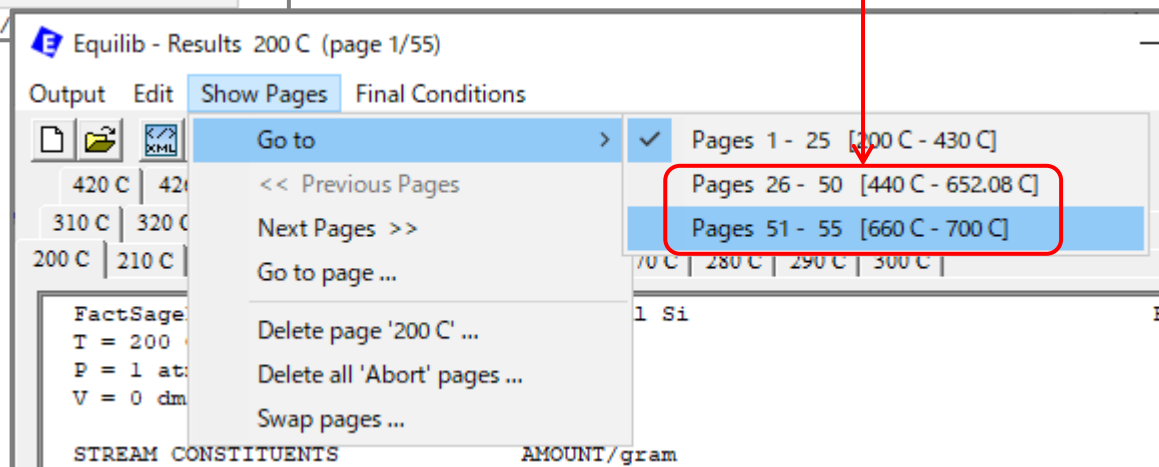
11. normal + transitions を選択して Calculate をクリック。transitions は相変
態点または相転移点を探してその条件で計算させるオプション。探し出せない場
合は温度刻み幅を小さくしたり、FactPS の Ar を微量追加して再計算してみる

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

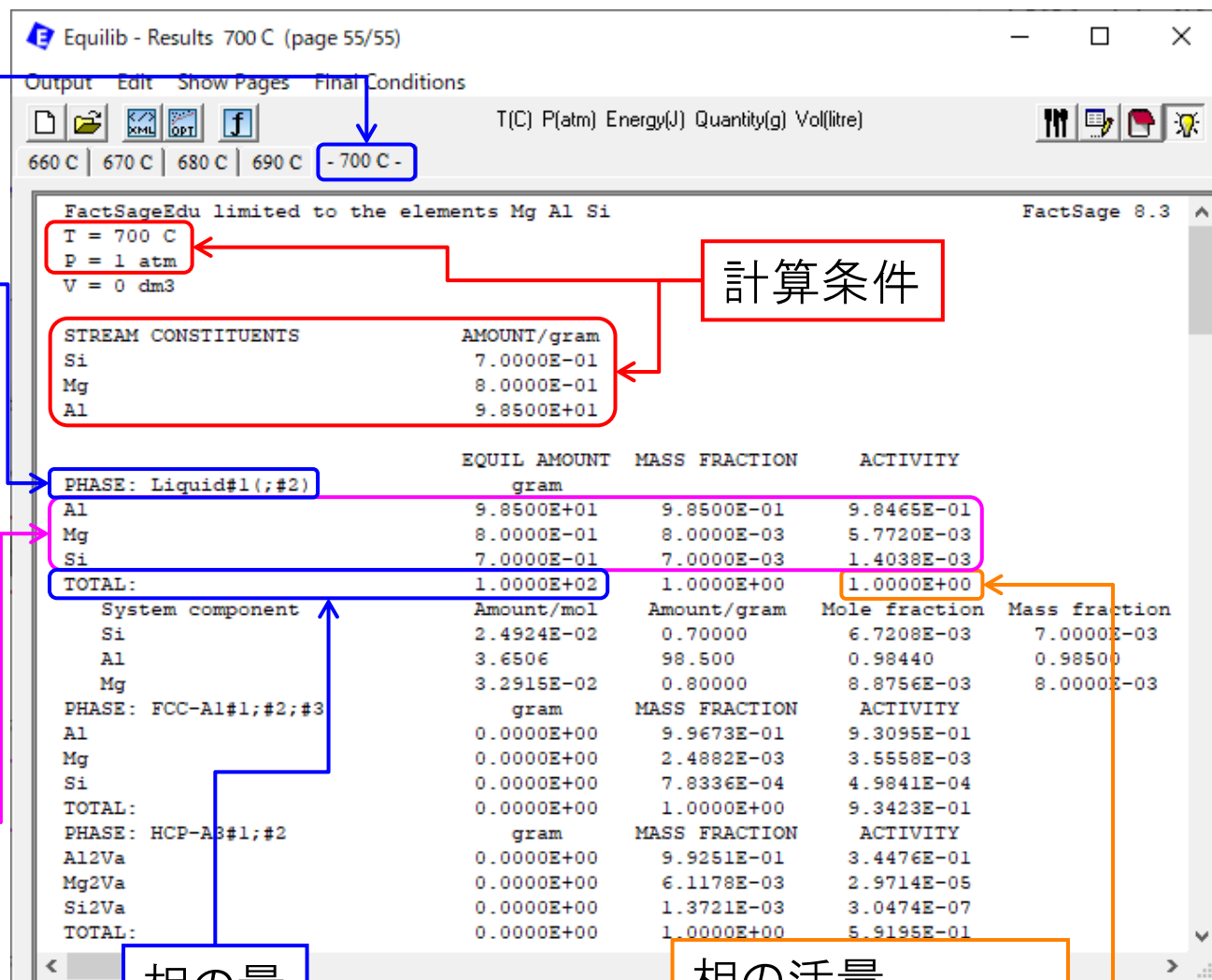


アルミニウム合金の平衡計算

700 °C の場合

溶体相の名前。
#1(;#2) は相分離して
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



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 -

PHASE: CBCC-Al2#2	gram	MASS FRACTION	ACTIVITY
Mg10Al24Al24	0.0000E+00	8.6216E-01	7.6152E-24
Mg10Al24Mg24	0.0000E+00	3.9001E-03	<1.0000E-75
Mg10Mg24Al24	0.0000E+00	4.5557E-03	2.5133E-71
Mg10Mg24Mg24	0.0000E+00	2.0570E-05	<1.0000E-75
Si10Al24Al24	0.0000E+00	1.2810E-01	2.7939E-32
Si10Al24Mg24	0.0000E+00	5.8011E-04	<1.0000E-75
Si10Mg24Al24	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
Al19Al2Mg12-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
	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_Al2(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) T	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
1.176972E+02	1.119086E+05	2.726756E+02	-1.534457E+05

Liquid#1

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

Equilib - Results 595.66 C (page 43/55)

Output Edit Show Pages Final Conditions

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

440 C | 450 C | 460 C | 470 C | 480 C | 490 C | 500 C | 510 C | 520 C | 530 C | 540 C |
640 C | 650 C | 652.08 C |
549.52 C | 550 C | 560 C | 570 C | 580 C | 590 C | **595.66 C** | 600 C | 610 C | 620 C | 630 C |

FactSageEdu limited to the elements Mg Al Si FactSage 8.3

*T = 595.66 C
P = 1 atm
V = 0 dm3

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

PHASE: FCC-Al#1(;#2;#3)	EQUIL AMOUNT	MASS FRACTION	ACTIV
Al	9.8500E+01	9.8500E-01	9.8454
Mg	8.0000E-01	8.0000E-03	1.2709
Si	7.0000E-01	7.0000E-03	4.5354
TOTAL:	1.0000E+02	1.0000E+00	1.0000

System component	Amount/mol	Amount/gram	Mole fra
Si	2.4924E-02	0.70000	6.7208
Al	3.6506	98.500	0.9844
Mg	3.2915E-02	0.80000	8.8756

PHASE: Liquid#1;#2	gram	MASS FRACTION	ACTIVITY
Al	0.0000E+00	8.7668E-01	8.8789E-01
Mg	0.0000E+00	4.3173E-02	1.8526E-02
Si	0.0000E+00	8.0145E-02	1.2833E-02
TOTAL:	0.0000E+00	1.0000E+00	1.0000E+00

System component	Amount/mol	Amount/gram	Mole fraction	Mass fraction
Si	0	0	7.6871E-02	8.0145E-02
Al	0	0	0.87528	0.87668
Mg	0	0	4.7851E-02	4.3173E-02

PHASE: tI24#1;#2	gram	MASS FRACTION	ACTIVITY
------------------	------	---------------	----------

相転移が起こる
温度で

- 相の活量: 1
- 相の物質質量: 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 $\text{Mg}_2\text{Si}(\text{s})$ 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)

20 C | 426.1 C | 430 C |
320 C | 320 C | 330 C | 340 C | 350 C | 360 C | 370 C | 380 C | 390 C | 400 C | 410 C |
- 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 dm3

FactSage 8.3

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

PHASE: FCC-Al#1(;;#2;#3)	gram	EQUIL AMOUNT	MASS FRACTION	ACTIVITY
Al	9.8500E+01	9.9984E-01	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	

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)	gram	MASS FRACTION	ACTIVITY
Al2Si	2.8505E-08	2.2839E-08	7.8809E-07
Mg2Si	1.2481E+00	1.0000E+00	1.0000E+00
Si2Si	6.0393E-12	4.8388E-12	3.3546E-14
Va2Si	6.3563E-15	5.0927E-15	1.9341E-28
TOTAL:	1.2481E+00	1.0000E+00	1.0000E+00

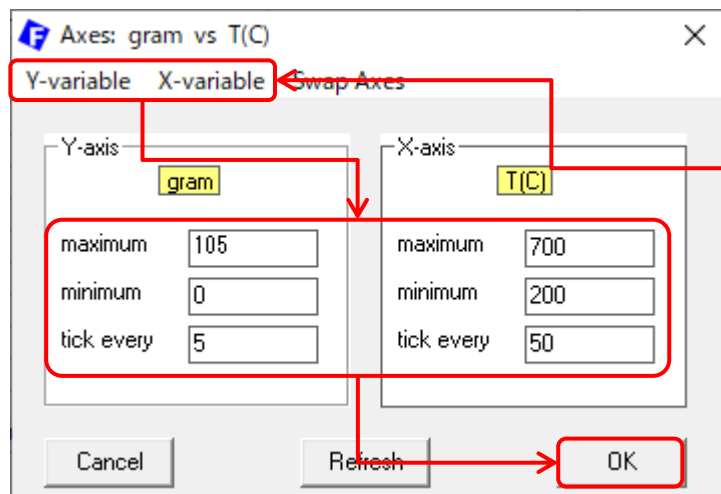
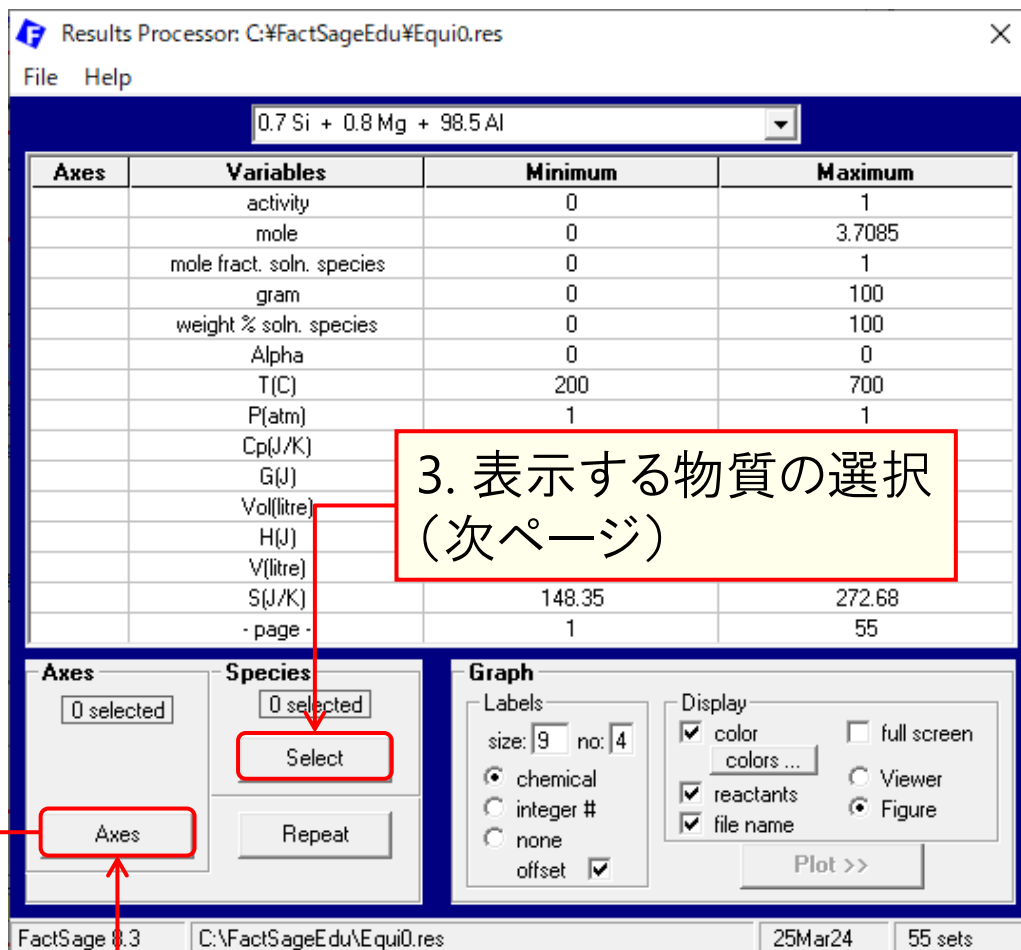
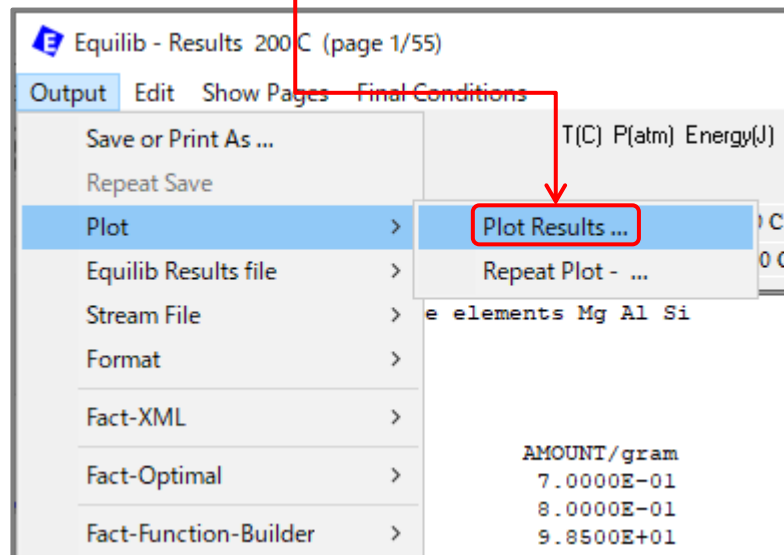
Site fraction of sublattice constituents:

Mg_8c	1.0000	Stoichiometry = 2
Si_8c	4.4045E-12	
Al_8c	2.1348E-08	
Va_8c	1.3907E-14	

Si 4a	1.0000	Stoichiometry = 1		
System component	Amount/mol			
Si	1.6274E-02	Amount/gram	Mole fraction	Mass fraction
Al	6.9483E-10	0.45705	0.33333	0.36619
Mg	3.2547E-02	1.8748E-08	1.4232E-08	1.5021E-08

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



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

Select all stable phases

Select stable pure liquids

Select stable pure solids

Select stable solution phases

Clear

#		Gram (max)	Wt.% (min)	Wt.% (max)	Activity (min)	Activity (max)
158		0	0	0	2.3919E-22	1.0E76E-12
159		0	0	0	2.3919E-22	1.0E76E-12
160		0	0	0	2.3919E-22	1.0E76E-12
161		0	0	0	2.3919E-22	1.0E76E-12
162		0	0	0	2.3919E-22	1.0E76E-12
163		0	0	0	2.3919E-22	1.0E76E-12
164	Mg9Si7Al3(s)	0	0	0	2.3919E-22	1.0E76E-12
165	Mg11Si7Al3(s)	0	0	0	2.3919E-22	1.0E76E-12
166	Mg9Si7Al5(s)	0	0	0	2.3919E-22	1.0E76E-12
167	Mg9Si9Al3(s)	0	0	0	2.3919E-22	1.0E76E-12
SOLUTIONS						
168	GAS	0	0	0	0.255495	1
169	Liqu#1	100	0	0	0.255495	1
170	Liqu#2	0	0	0	0.255495	1
171	A1#1	100	0	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)

units

Clear

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

55 pages

OK

Select ...

ignore species and phases with zero mass

単位の変更

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ずつ選んでもよい。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

選択した物質をクリア

相(s), (g) などが表示される

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	Mg ₁₁ Si ₇ Al ₃ (s)	0	0	0	0	5.0524E-33 [56]
	166	Mg ₉ Si ₇ Al ₅ (s)	0	0	0	0	2.0418E-26 [56]
	167	Mg ₉ Si ₉ Al ₃ (s)	0	0	0	0	4.0940E-31 [56]
		SOLUTIONS					
	168	GAS	0	0	0	0	0
+	169	Liqu#1	0 [2]	100 [51]	0	0	0.255495 [2]
	170	Liqu#2	0	0	0	0	0.255495 [2]
+	171	A1#1	0 [51]	100 [38]	0	0	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]			1.9793E-02 [56]
+	179	A4#2	0	0	0	0	2.0959E-27 [2]
	180	A12#1	0	0	0	0	2.0959E-27 [2]
	181	A12#2	0	0	0	0	2.0959E-27 [2]
+	182	C1a#1	0 [38]	1.2481 [2]	0	0	5.2350E-04 [56]
+	183	C1a#2	0	0	0	0	5.2350E-04 [56]

[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

Display: ☐ source, ☒ phase, ☐ name, ☒ [page]

Mass: ☐ mole, ☒ gram

Order: ☒ integer #, ☐ mass (max), ☐ fraction (max), ☐ activity (max)

Select Top: 15, 10 species selected

☐ ignore species and phases with zero mass

Clear

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

55 pages

OK

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

Plot: gram vs T(C)

File Help

0.7 Si + 0.8 Mg + 98.5 Al

Axes	Variables	Minimum	Maximum
	activity	0	1
	mole	0	3.7085
	mole fract. soln. species	0	1
Y-axis	gram	0	100
	weight % soln. species	0	100
	Alpha	0	0
X-axis	T(C)	200	700
	P(atm)	1	1
	Cp(J/K)	99.32	3904.8
	G(J)	-1.5345E+05	-5.4671E+04
	Voll(litre)	0	0
	H(J)	1.5523E+04	1.1191E+05
	V(litre)	0	0
	S(J/K)	148.35	272.68
	- page -	1	55

Axes
gram vs T(C)
Axes

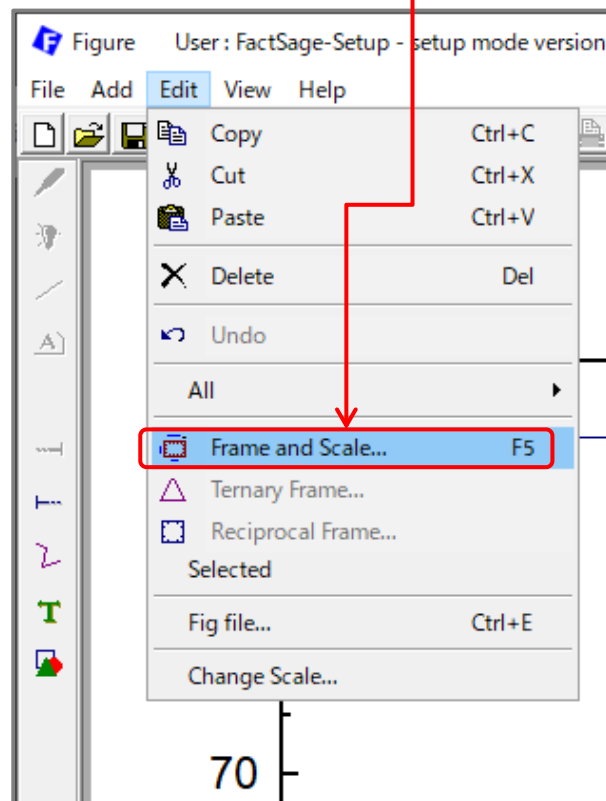
Species
10 selected
Select
Repeat

Graph
Labels
size: 18 no: 3
☒ chemical
☐ integer #
☐ none
offset ☒
Display
☒ color
colors ...
☐ full screen
☐ Viewer
☒ Figure
Plot >>

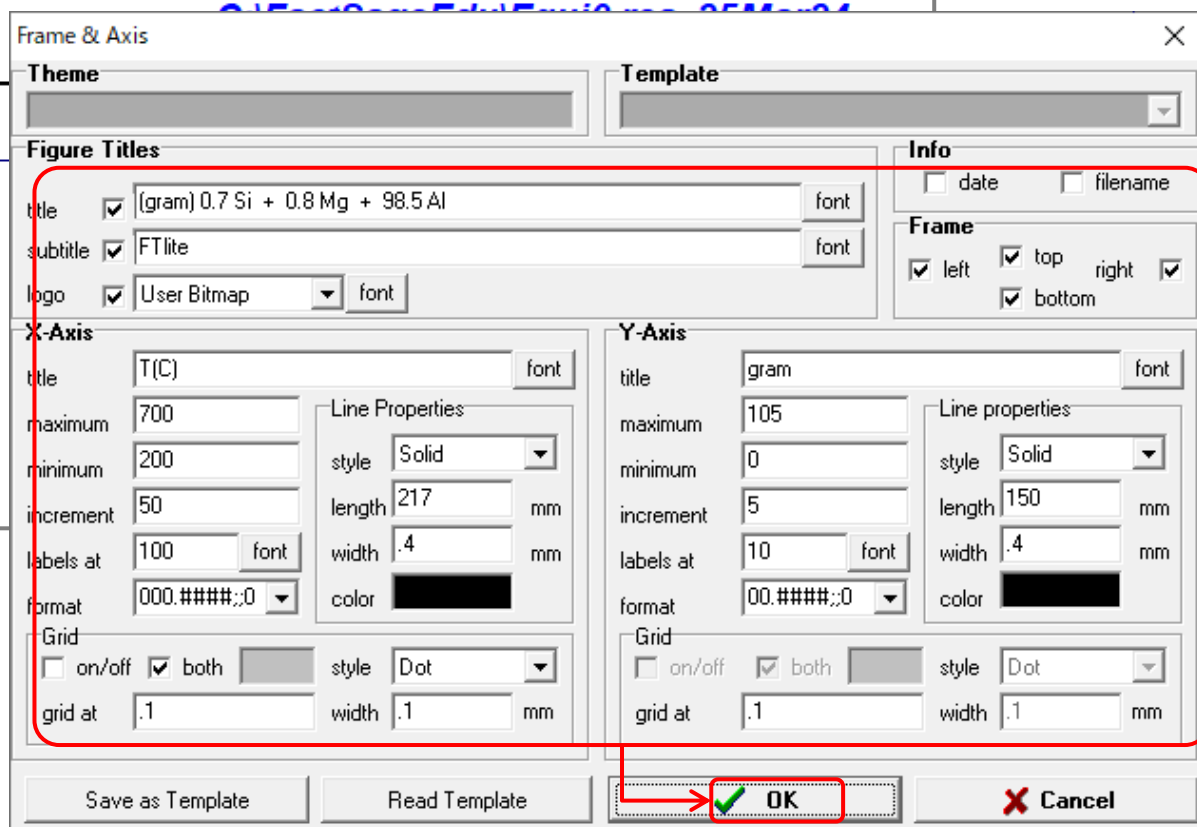
FactSage 8.3 C:\FactSageEdu\Equi0.res 25Mar24 55 sets

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

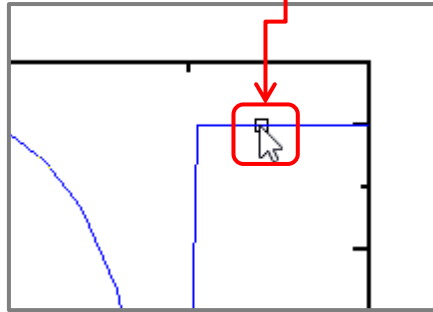


※線上にラベルが表示されない場合は、線を選択してから
Add ⇒ Text をクリック(次ページ)
※文字を {} で囲むと下付きで表示される(例: SiO_2 ⇒ SiO_2)

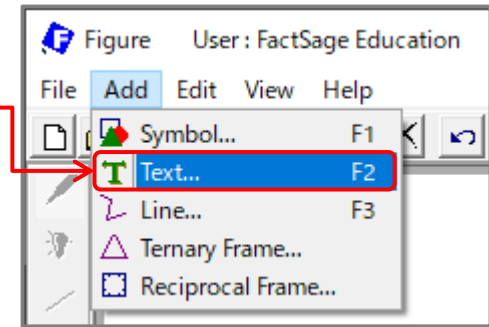


アルミニウム合金の平衡計算(グラフの作成)

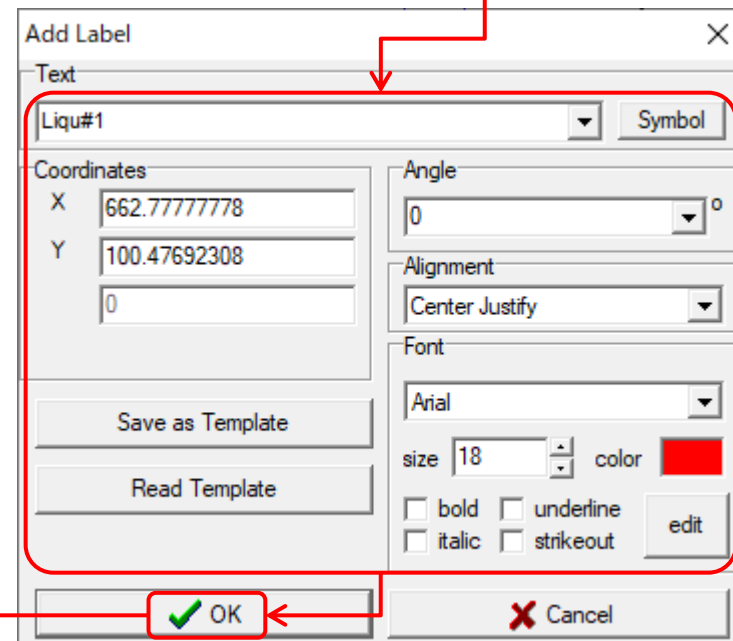
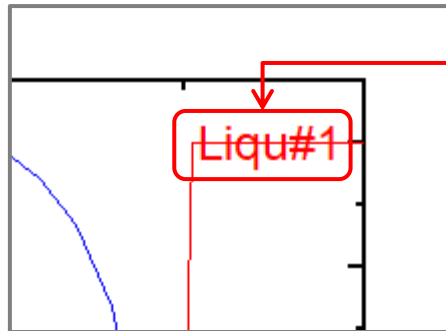
(1) 線をクリックして選択
⇒ 色が変化する



(2) Add ⇒ Text
を選択



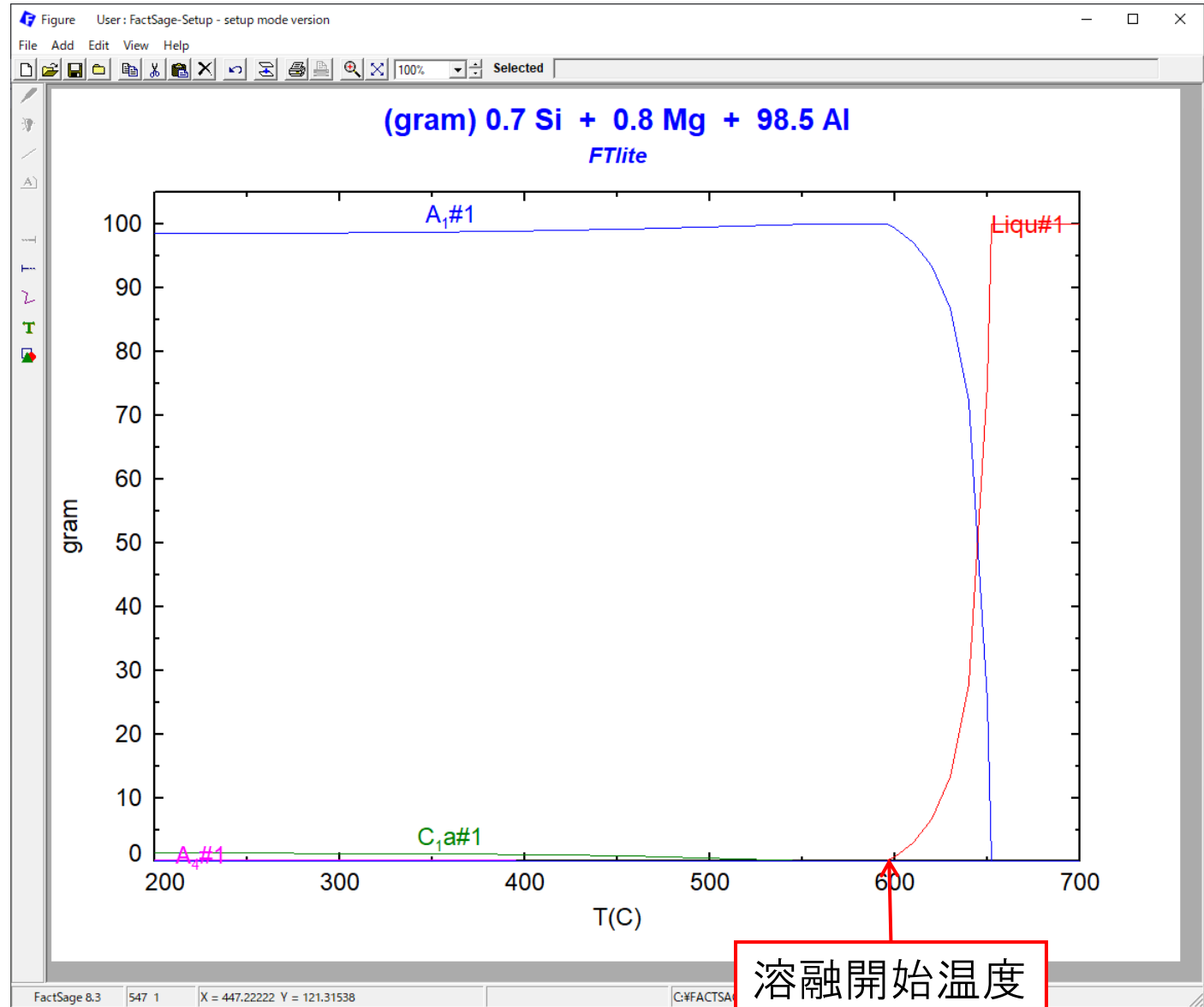
(3) 文字の位置、色、大きさなどを設定して OK
をクリック。テキストを {} で囲むと下付きになる



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。

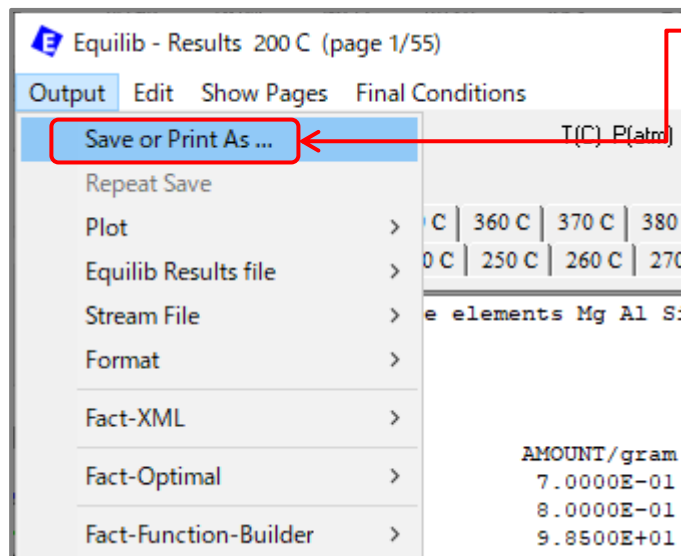
- ラベルの移動: マウスの右ボタンでドラッグ & ドロップ
- ラベルの色: ラベルを右クリック ⇒ Edit
- 線の色: 線を右クリック ⇒ Edit



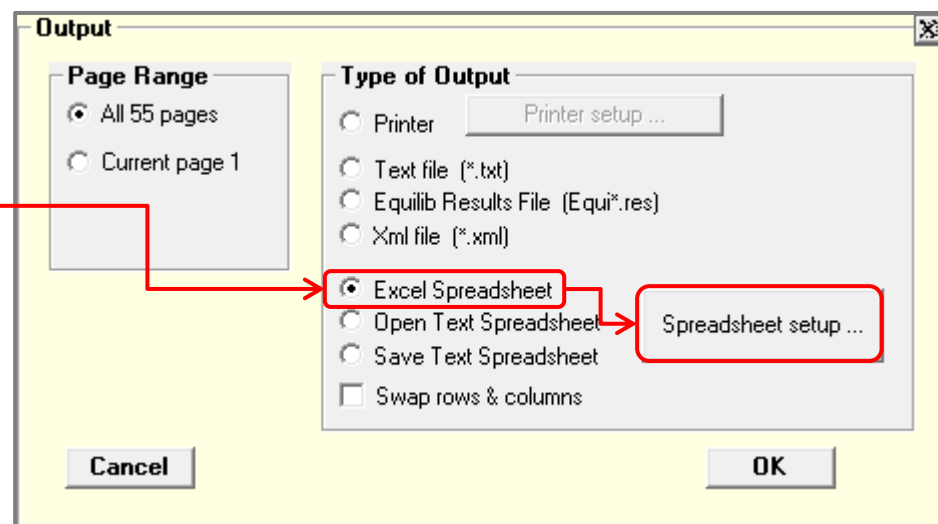
アルミニウム合金の平衡計算(Excel 形式に保存)

■ 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)

The image shows the 'Spreadsheet Setup' dialog box with several annotations and arrows pointing to specific elements:

- 3. 表示項目数を設定 (系に関する量)**: Points to the 'Property columns' spinner, which is set to 1.
- 4. クリックして 項目一覧を表示 ⇒ T(C) を選択**: Points to the 'T(C)' option in the 'System Properties' list.
- 5. 表示項目数を設定 (化学種の量)**: Points to the 'Columns per species' spinner, which is set to 1.
- 6. クリックして 項目一覧を表示 ⇒ grams を選択**: Points to the 'g - grams' option in the 'Species Properties' list.
- 7. Select ... をクリック して化学種の選択(次ページ)**: Points to the 'Select ...' button in the 'Species Properties' section.

Additional elements visible in the dialog include:

- System Properties**: A table with 'Column:' and 'Variable:' headers. The variable 'T(C)' is selected.
- Species Properties**: A table with 'Column:' and 'Variable:' headers. The variable 'g' is selected.
- Buttons**: 'Cancel', 'Default', and 'OK' buttons are at the bottom right.
- Species: 0**: A label indicating the number of species.

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

溶体相の構成元素のこと

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

File Edit Show **Select Stable**

Selected: 4/157

Select all stable phases

Select stable pure liquids

Select stable pure solids

Select stable solution phases

Pages: 1 - 55 [page]

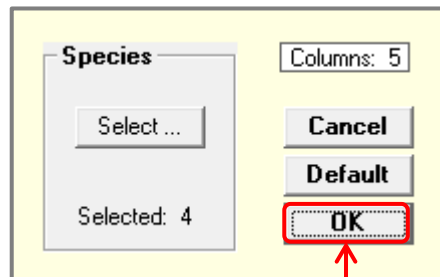
1; max = 700 at page 55, P(atm) = 1

	+	Code			Activity	Minimum	Maximum
		110	Al9M		1.1252E-27	1.4647E-38 [1]	2.0743E-18 [37]
+	197	Solution	FTlite	FTlite-Liqu#1	1.000	0.2555	1.000
	197	Solution	FTlite	FTlite-Liqu#2	1.000	0.2555	1.000
+	198	Solution	FTlite	FTlite-A1#1	0.9342	0.9342	1.000
	198	Solution	FTlite	FTlite-A1#2	0.9342	0.9342	1.000
	198	Solution	FTlite	FTlite-A1#3	0.9342	0.9342	1.000
	199	Solution	FTlite	FTlite-A2#1	0.4815	0.1377	0.4832
	199	Solution	FTlite	FTlite-A2#2	0.4815	0.1377	0.4832
	200	Solution	FTlite	FTlite-A3#1	0.5919	0.3085	0.6117
	200	Solution	FTlite	FTlite-A3#2	0.5919	0.3085	0.6117
+	201	Solution	FTlite	FTlite-A4#1	1.9793E-02	1.9793E-02	1.000
	201	Solution	FTlite	FTlite-A4#2	1.9793E-02	1.9793E-02	1.000
	202	Solution	FTlite	FTlite-A12#1	3.9323E-23	2.0959E-27	2.6770E-15
	202	Solution	FTlite	FTlite-A12#2	3.7161E-23	2.0959E-27	2.3073E-15
+	203	Solution	FTlite	FTlite-C1a#1	5.2350E-04	5.2350E-04	1.000
	203	Solution	FTlite	FTlite-C1a#2	5.2350E-04	5.2350E-04	1.000
	203	Solution	FTlite	FTlite-C1a#3	1.9978E-05	1.9978E-05	1.000
	204	Solution	FTlite	FTlite-C14#1	2.8859E-03	2.8859E-03	0.3049
	204	Solution	FTlite	FTlite-C14#2	2.8859E-03	2.8859E-03	0.3049
	205	Solution	FTlite	FTlite-C15#1	5.1893E-03	5.1893E-03	7.5795E-02
	205	Solution	FTlite	FTlite-C15#2	1.4166E-06	1.4166E-06	2.1630E-02
	206	Solution	FTlite	FTlite-L12#1	8.6401E-03	1.6574E-03	4.4512E-02
	206	Solution	FTlite	FTlite-L12#2	8.6401E-03	1.6574E-03	4.4512E-02
	207	Solution	FTlite	FTlite-tl24#1	0.4892	0.3555	0.6006
	207	Solution	FTlite	FTlite-tl24#2	0.4892	0.3555	0.6006
	208	Solution	FTlite	FTlite-Beta	2.0898E-23	1.8404E-31	3.8647E-15
	217	All Elements	FTlite	FTlite-Liqu#1			
	217	All Elements	FTlite	FTlite-Liqu#2			

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

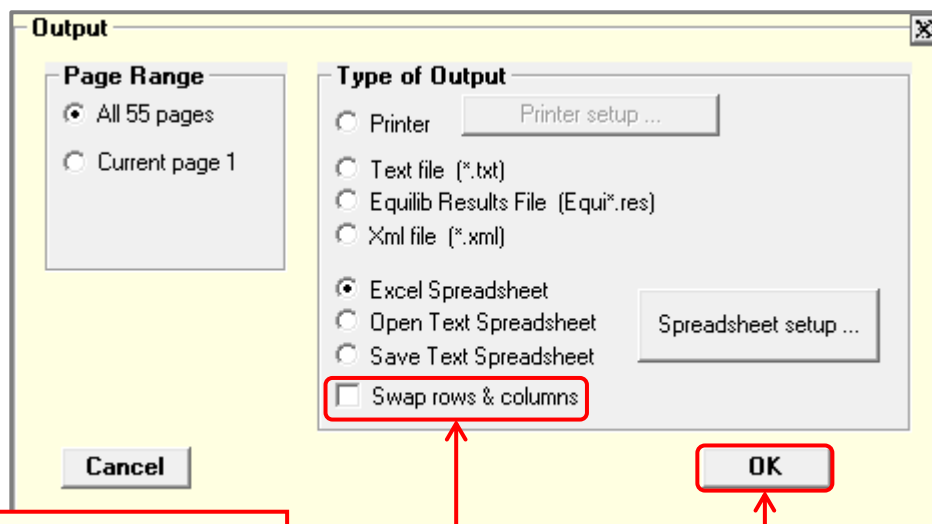
Select All Clear OK

アルミニウム合金の平衡計算(Excel 形式に保存)



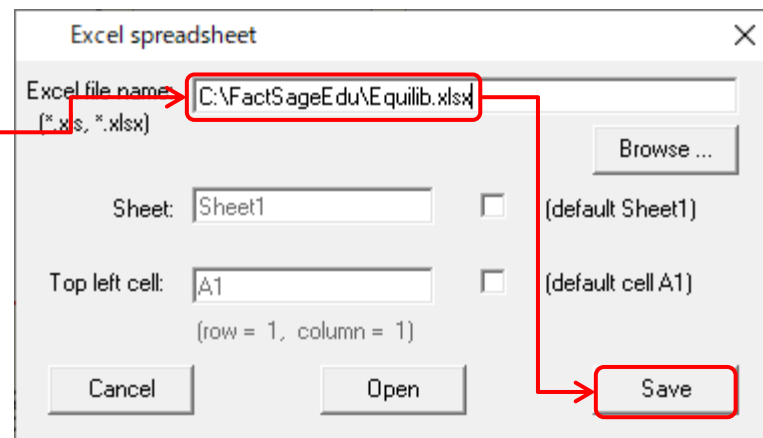
9. OK をクリック

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



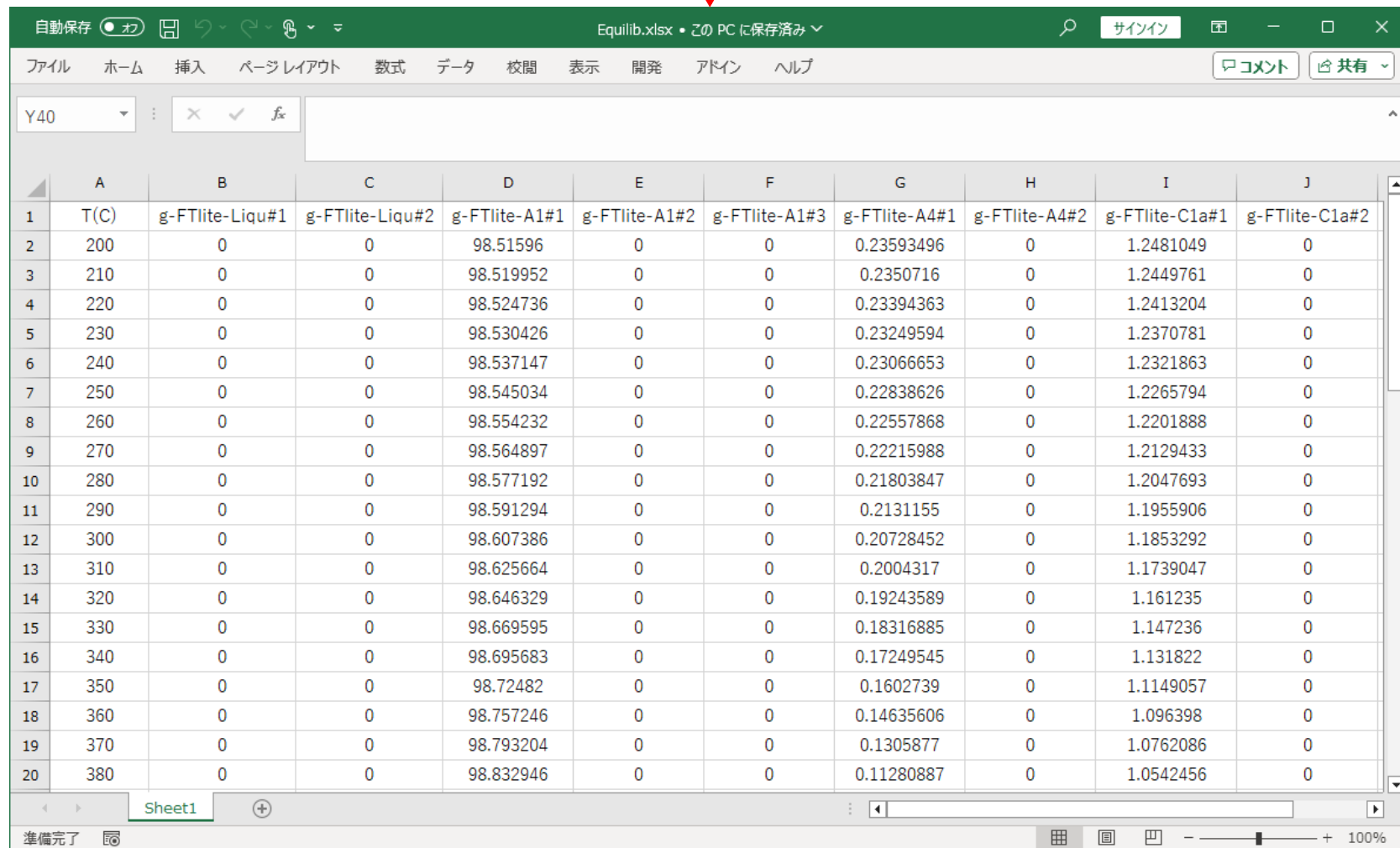
10. OK をクリック

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名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



Excel spreadsheet showing the results of aluminum alloy equilibrium calculations. The file is named "Equilib.xlsx" and is saved on the PC. The spreadsheet displays data for 20 rows, corresponding to temperatures from 200°C to 380°C. The columns represent different material properties and components.

	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

2. 単位を設定

3. + をクリックして、入力場所を作成

4. 反応種を入力

5. Next をクリック

Education limited to 3 elements - Equilib - Reactants

File Edit Run Macro Table Units Data Search Data Evaluation Help

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

1 - 3

Quantity(g)	Species	Phase	T(C)	P(total)**	Stream#	Data
0.7	Si				1	
+ 0.8	Mg				1	
+ 98.5	Al				1	

Initial Conditions

Next >>

FactSageEdu Compound: 1/14 databases Solution: 1/12 databases

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

FactSageEdu limited to 3 elements - Equilib - Menu: last system

File Units Parameters Help

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

Reactants (3)

(gram) 0.7 Si + 0.8 Mg + 98.5 Al

Products

Compound species

- gas ☒ ideal ☐ real 0
- aqueous 0
- pure liquids 0
- pure solids 0

Solution phases

*	+	Base-Phase	Full Name
I		FTlite-Liqu	Liquid
J		FTlite-A1	FCC-A1
		FTlite-A2	BCC-A2
		FTlite-A3	HCP-A3
		FTlite-A4	DIAM-A4 Prototype-C
		FTlite-A12	CBCC-A12 Prototype-Mn
		te-C1a	aC1 Prototype-CaF2
		te-C14	C14 Prototype-MgZn2

Custom Solutions

- 0 fixed activities Details ...
- 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 Sp

Total Sc

Total Ph

Final Conditions

Estimate T(K): 1000

Quantity(g): 0

Legend

- I - immiscible 1
- J - 3-immiscible 1

Show ☒ all ☐ selected

species: 15 Select

solutions: 5

T(C) P(atm) Product H(J)

1650 13000

10 steps ☐ Table 2 calculations

Equilibrium

- ☒ normal ☐ normal + transitions
- ☐ transitions only ☐ open

- no time limit - Calculate >>

7. 体積データを考慮する。
物性値を推算する

8. 温度、圧力を設定

9. Calculate をクリック

物性値の推算、高圧の平衡状態

Equilib - Results 1

Output Edit Show

1 atm の場合

- 1 atm - 3000 atm

FactSageEdu limited to the elements Mg Al Si

T = 650 C
P = 1 atm
V = 4.1355E-02 dm3

STREAM CONSTITUENTS

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

PHASE: Liquid#1(;;#2)

	EQUIL AMOUNT	MASS FRACTION	ACTIVITY
	gram		
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	0.73239	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)

	gram	MASS FRACTION	ACTIVITY
Al	V 2.4983E+01	9.9641E-01	9.9618E-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

体積、密度

System density/g.cm-3 = 2.4181

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

溶融合金の粘度と表面張力

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	
3.903310E+03	7.953291E+04	2.001250E+02	-1.052125E+05	4.135521E-02	2.376675E+00	1.180263E-04	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00
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

物性値の推算、高圧の平衡状態

Equilib

Output Ed

1 atm - 3000 atm -

FactSage 8.3

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

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

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

	EQUIL AMOUNT	MASS FRACTION	ACTIVITY	
	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)

	EQUIL AMOUNT	MASS FRACTION	ACTIVITY	
	gram			
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
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

System density/g.cm-3 = 2.5200

3000 atm の場合

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。

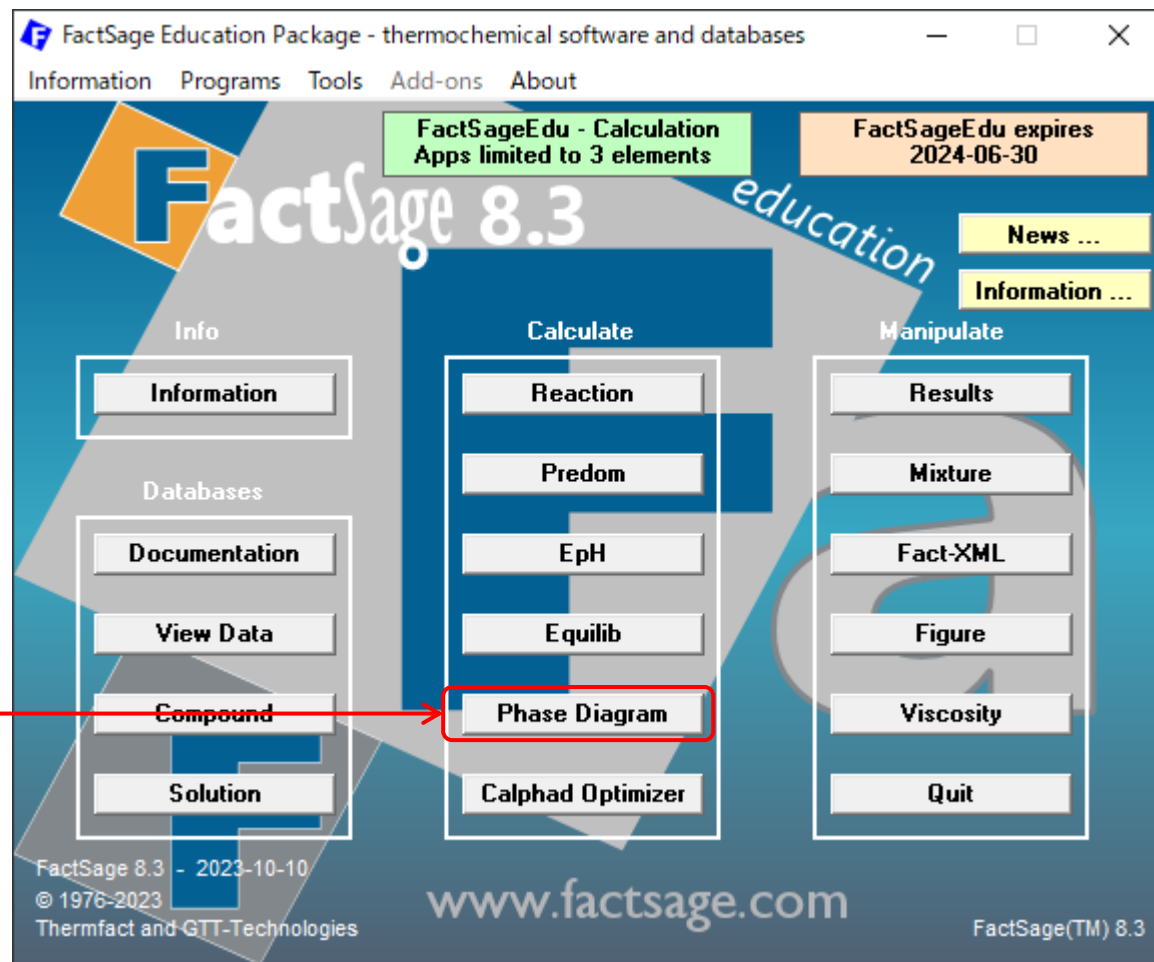
溶体相の選択にあたっては、Database Documentation が参考になる。

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。

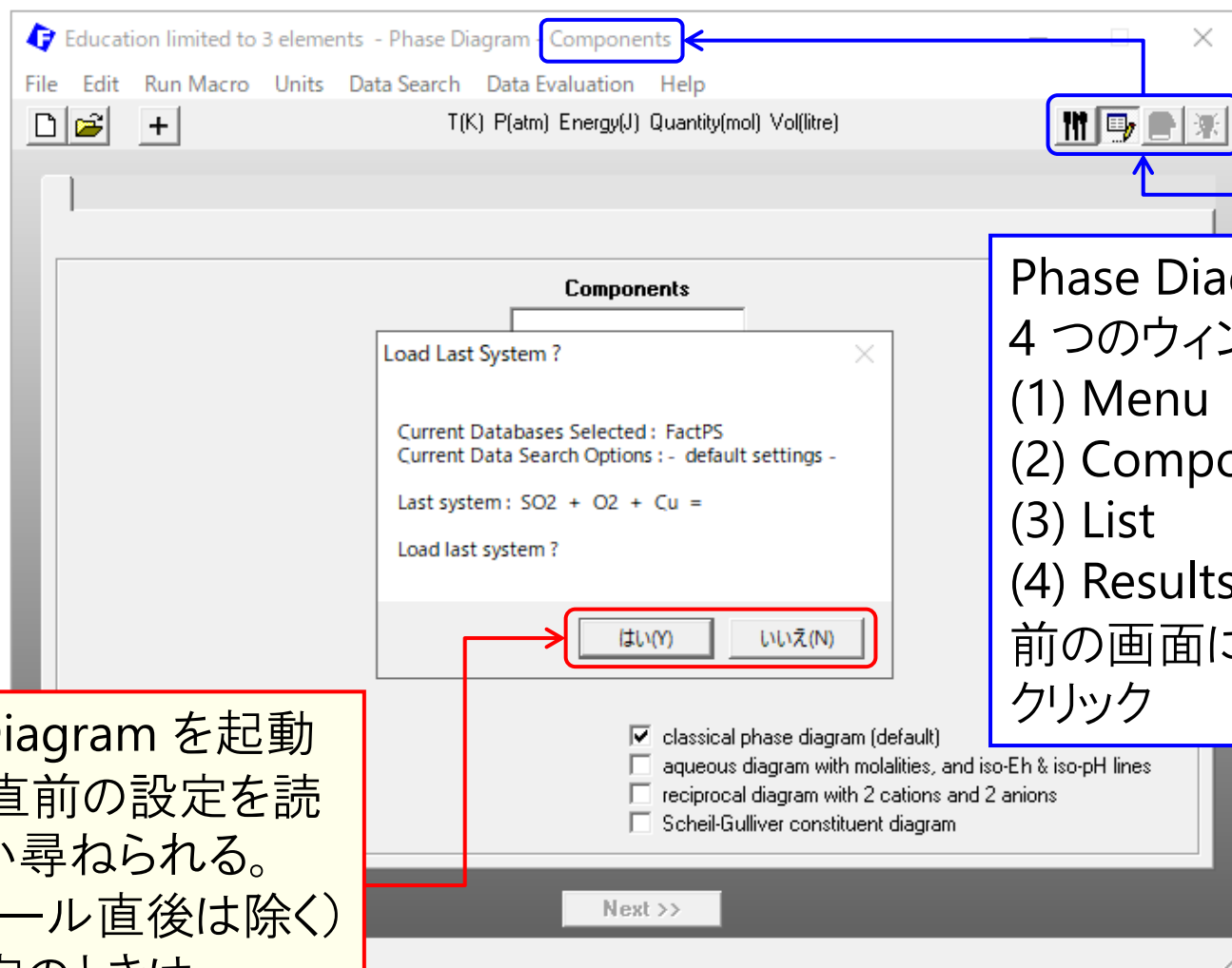
Phase Diagram

- 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）

Education limited to 3 elements - Phase Diagram - Components

File Edit Run Macro Units **Data Search** Data Evaluation Help

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

Data Search

Databases - 1/14 compound databases, 1/13 solution databases

Fact **FactSage** **SGTE**

☐ FactPS ☐ FSopp ☐ BINS ☐ compounds only **Private Databases**

☒ FTsulf ☐ FSlead ☐ SGPS ☐ solutions only ☐ EXAM

☐ FTsalt ☐ FSstel ☐ SGTE ☐ no database

☐ FTmisc ☐ FSupsi ☐ SGsold

☐ FTall ☐ EL

☐ FTDCN ☐ FT ☐ FT

☐ FTfrtz ☐ FT

☐ FTthelg ☐ FT

☐ FTpulp ☐ FT

☐ FTdemo ☐ FT

Information -

Options - search for product species

Default

Include compounds

☐ gaseous ions (plasmas)

☐ aqueous species

☐ limited data compounds (25C)

Limits

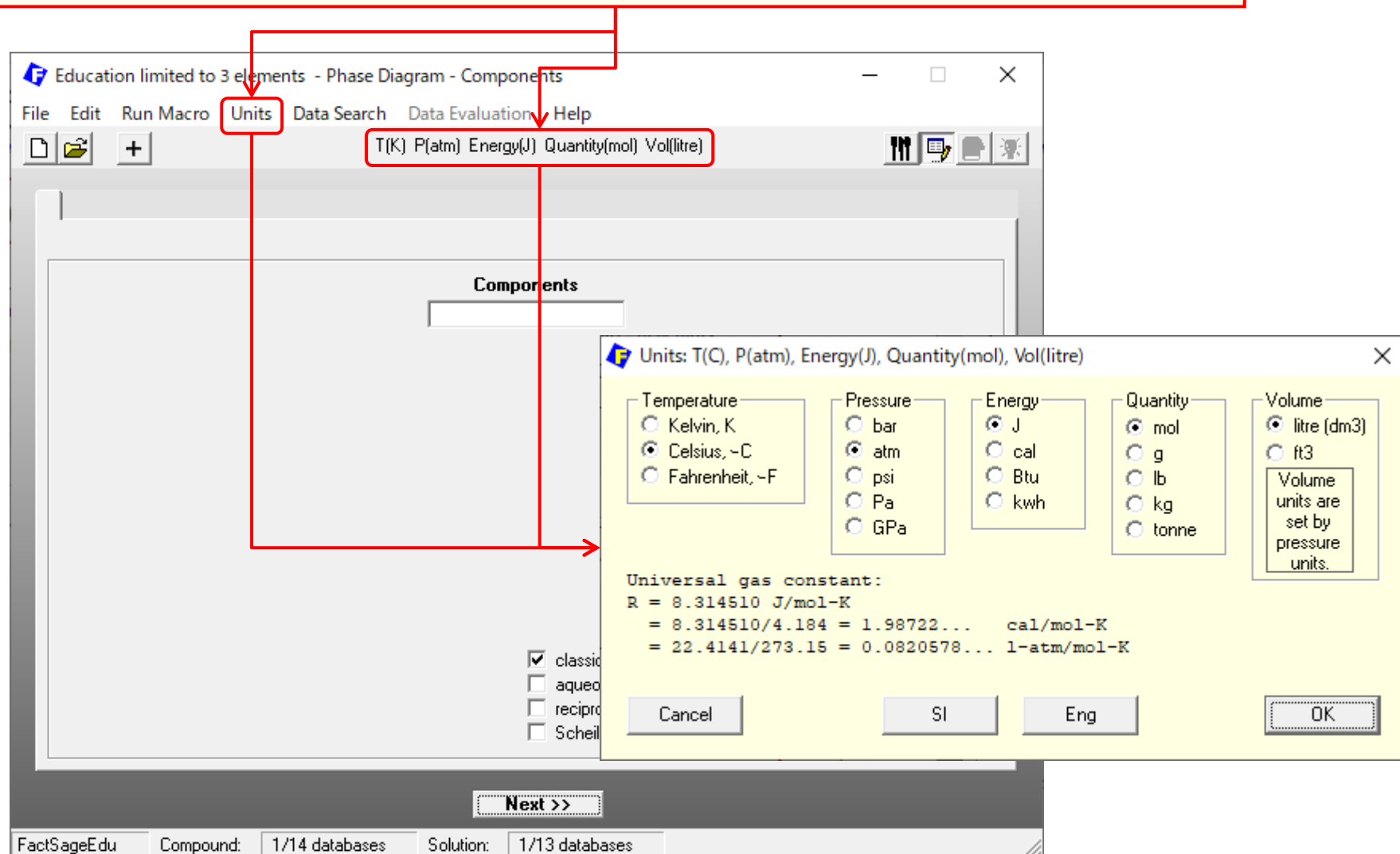
Organic species CxHy..., X(max) = 2

Minimum solution components: ☐ 1 ☒ 2 cpts

Cancel Summary ... OK

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-SiO₂ 系の状態図

酸化物系の状態図計算で、Phase Diagram に慣れよう。

CaO-SiO₂ 系の状態図

■ CaO-SiO₂ 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

FACT oxide database - documentation - FactSage Browser - [FToxid_Documentation.htm]

File View About...

Search phase diagrams: <chemical formula> + must contain: <ex: CaO>

Summary of databases
List of all stored phase diagrams
How to use the databases

[ELEM] - FactSage elements data
[FTdemo] - demonstration databases
[FactPS] - FACT pure substances
[SGPS] - SGTE pure substances

[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, misc
[FTOxCN] - FACT high-T oxycarbides

have been evaluated and optimized are described in the following. The most accurate calculations will be obtained in or near these sub-systems and composition ranges.

(1) Major oxide components: Al₂O₃, CaO, FeO, Fe₂O₃, MgO, SiO₂

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, Mn₂O₃, CoO, NiO, PbO, ZnO with the major oxide components Al₂O₃, CaO, FeO, Fe₂O₃, MgO, SiO₂.

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,

完了

CaO, SiO₂ 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-SiO₂ 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

FToxid の計算状態図の一覧から確認できる

CaO, SiO₂ を含む系で検索

Search Results - FactSage Browser - [search_results.htm]

ms: CaO SiO2 + must contain : Found: 306

Search results for: CaO SiO2

List of Phase Diagrams:

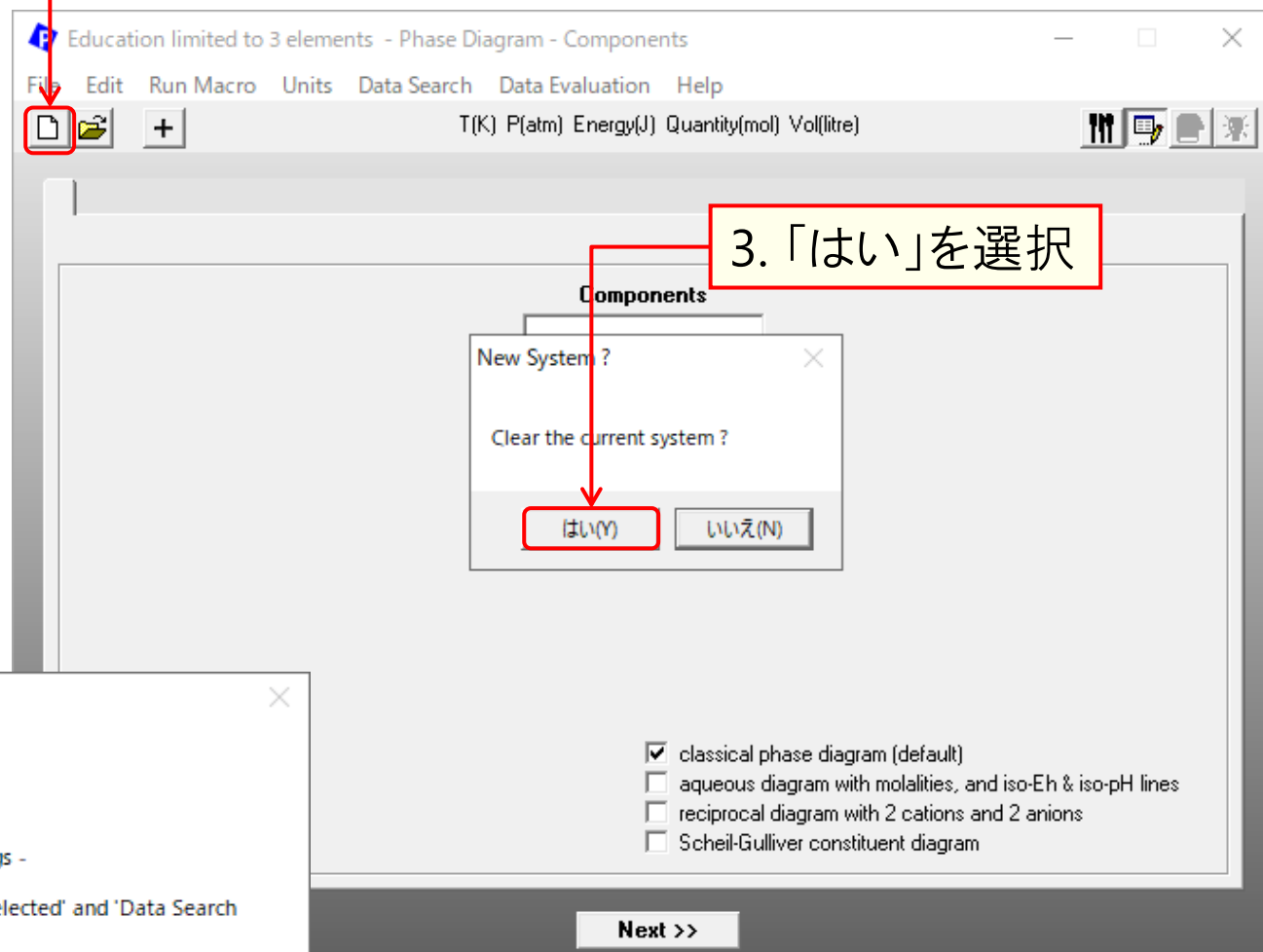
ZrO2 - SiO2 - CaO : FToxid
ZrO2 - SiO2 - CaO : FToxid
CaO - TiO2 - SiO2 - O2 : FToxid
SiO2 - TiO2 - CaO - O2 : FToxid
SiO2 - TiO2 - CaO - O2 : FToxid
CaO - SiO2 - TiO2 - O2 : FToxid
CaO - SiO2 : FToxid
CaO - SiO2 - CaF2 : FToxid

Revised: 2023/10/10

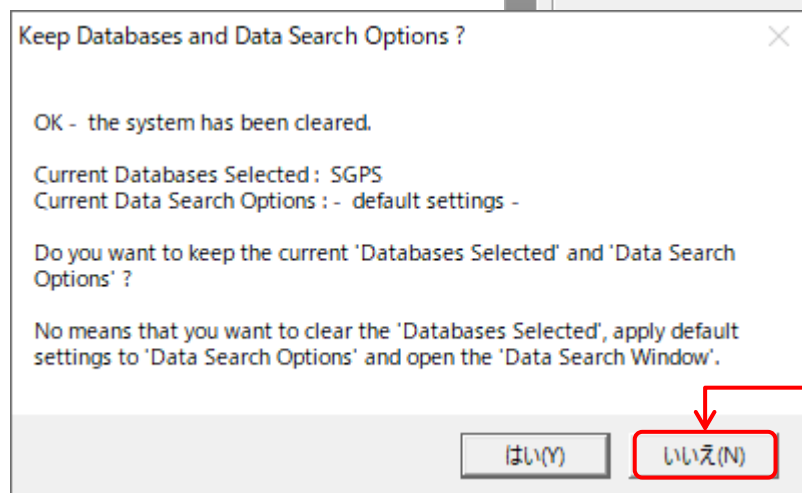
FToxid が適切なことがわかる。これらの状態図は FToxid で計算されていることが確認できる。多成分系を計算するときは、各 2, 3, 4 成分の部分系のデータの有無を確認する。多成分からなる相のギブズエネルギーは各 2, 3, 4 成分部分系のデータから計算される

CaO-SiO₂ 系の状態図

2. 新規設定



3. 「はい」を選択



4. 熱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-SiO₂ 系の状態図

5. FToxid を選択する

Data Search - Phase Diagram 8.3

Databases - 1/26 compound databases, 1/24 solution databases

Fact	FactSage [®]	SGTE	Private Databases
<input type="checkbox"/> FctPS	<input type="checkbox"/> FScomp	<input type="checkbox"/> BINS	<input type="checkbox"/> Coke
<input checked="" type="checkbox"/> FToxid	<input type="checkbox"/> FSlead	<input type="checkbox"/> SGPS	<input type="checkbox"/> GTOX
<input type="checkbox"/> FTsulf	<input type="checkbox"/> FSstel	<input type="checkbox"/> SGTE	<input type="checkbox"/> SGTEa
<input type="checkbox"/> FTsalt	<input type="checkbox"/> FSupsi	<input type="checkbox"/> SGsold	<input type="checkbox"/> SGTEb
<input type="checkbox"/> FTmisc			
<input type="checkbox"/> FThall			
<input type="checkbox"/> FTOxCN			
<input type="checkbox"/> FTfrtz	<input type="checkbox"/> ELEM	<input type="checkbox"/> SGnobl	
<input type="checkbox"/> FThelg	<input type="checkbox"/> FTlite	<input type="checkbox"/> SpMCBN	
<input type="checkbox"/> FTpulp	<input type="checkbox"/> FTnucl	<input type="checkbox"/> TDmeph	
<input type="checkbox"/> FTdemo		<input type="checkbox"/> TDnucl	

compounds only
solutions only
no database

Clear All

Other

Add/Remove Data

RefreshDatabases

Information -

Options - search for product species

Default

Include compounds

- ☐ gaseous ions (plasmas)
- ☐ aqueous species
- ☐ limited data compounds (25C)

Limits

Organic species CxHy..., X(max) = 2

Minimum solution components: ☐ 1 ☒ 2 cpts

Cancel Summary ... OK

6. OK をクリック

CaO-SiO₂ 系の状態図

Components Window

8. + をクリックして入力場所を追加

7. 単位を設定

9. 物質を入力

10. Next をクリック

Next >>

FactSageEdu Compound: 1/14 databases Solution: 1/12 databases

CaO-SiO₂ 系の状態図

Menu Window

11. 平衡状態で存在する可能性のある溶体相を選択

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)

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

溶体相の表示

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)

CaO + SiO₂

Products

Compound species

gas ☒ ideal ☐ real 0

aqueous 0

pure liquids 0

pure solids 16

species: 16

Target

- none -

Estimate T(K): 1000

Solution phases

* + Base-Phase Full Name

I FToxid-SLAGA

Legend

I - immiscible 1

☒ Show ☐ all ☐ selected

species: 4

solutions: 2

Select

paraequilibrium & Gmin edit

Total Species (max 936) 20

Total Solutions (max 200) 2

Total

Phase Diagram

Y

X

- no time limit - Calculate >>

Variables

T(C) SiO₂/(CaO+SiO₂)

600 2600 0.1

T(C) vs SiO₂/(CaO-SiO₂)

CaO-SiO₂ 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. SiO₂ 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

The screenshot shows a software dialog box titled "Variables: CaO-SiO₂ T(C) vs composition #1." with several tabs and input fields. Red boxes and arrows highlight specific settings:

- Variables tab:** The "Y" radio button is selected. The "X-Y steps" is set to 11. A red box labeled "13-2. Next をクリック" points to the "Next >>" button.
- T and P tab:** The "Temperature" section has "T(C)" selected as the "Y-axis". The range is set to "Max: 2600" and "Min: 600". A red box labeled "13-3. 温度を Y 軸に設定 (範囲: 600 ~ 2600 °C)" points to this section.
- Pressure or Volume section:** "P(atm)" is selected and set to "constant". The value "1" is entered in the field. A red box labeled "13-4. 圧力を 1 atm に設定" points to this field.
- Compositions Quantity(mol) section:** The formula is shown as $0 \text{ CaO} + 1 \text{ SiO}_2 = 1 \text{ (max)}$ and $1 \text{ CaO} + 1 \text{ SiO}_2 = 0 \text{ (min)}$. The "X-axis" is selected. A red box labeled "13-5. SiO₂ 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" points to the "1" in the SiO₂ coefficient of the first formula.
- Bottom section:** A second "Compositions Quantity(mol)" section shows the formula with the SiO₂ coefficient changed to 100: $0 \text{ CaO} + 100 \text{ SiO}_2 = 100 \text{ (max)}$ and $1 \text{ CaO} + 1 \text{ SiO}_2 = 0 \text{ (min)}$. A red box labeled "13-6. OK をクリック" points to the "OK" button.

CaO-SiO₂ 系の状態図

14. Parameters をクリック

Parameters

The screenshot shows the 'Phase Diagram - Parameters' dialog box in FactSage. The 'Parameters' menu item in the top bar is highlighted. The 'Show' section has several checkboxes checked. The 'Labels & Lines' section has 'label size 5 - 20', 'line width 1 - 20 (0.1 - 2.0 mm)', and 'show (s)' checked. The 'Time Limit' section has 'elapsed time limit 0 secs'. The 'Iso-T Section' section has 'color' and 'color T bar' checked. The 'Polythermal Projection' section has several checkboxes checked. The 'Target Limits' section has 'T(K): 100' and '6000'. The 'Default settings for new systems' section has 'Temperature', 'Pressure', 'Energy', and 'Mass' all set to 'not set'. The 'OK' button is highlighted.

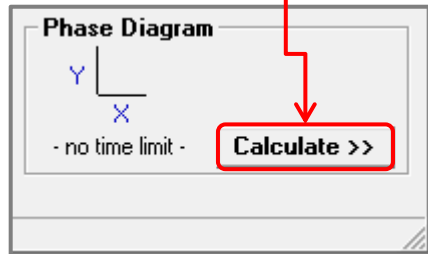
15. 表示する内容の設定

16. ラベルや線種の設定。show '(s)' の (s) は純物質固相の意味。表示させたほうがわかりやすいだろう

17. OK をクリック

CaO-SiO₂ 系の状態図

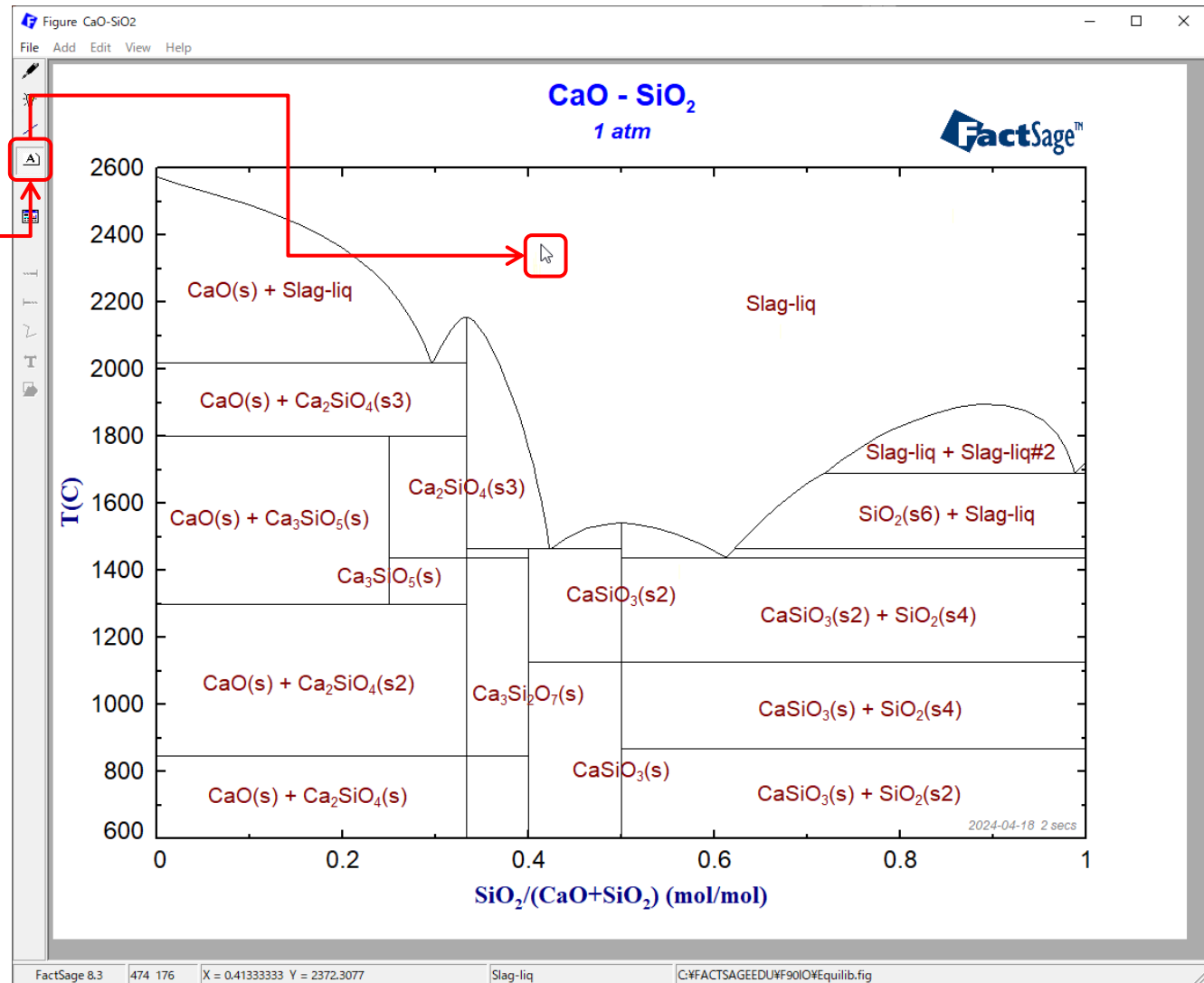
18. Calculate をクリック



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

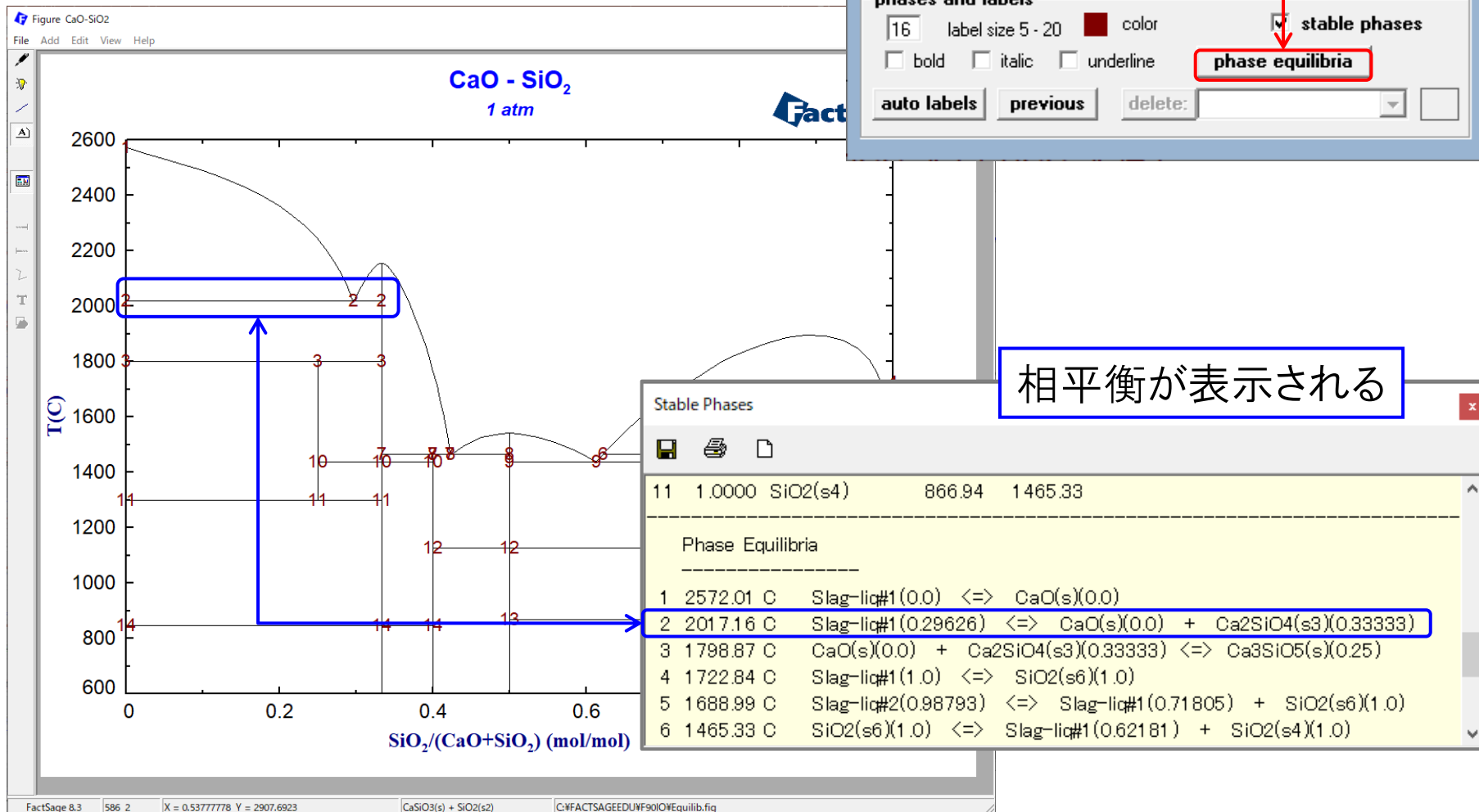
ラベルを削除する場合は、normal edition モード(ペンのボタン)にして、ラベルを選択して Delete キーを押す



CaO-SiO₂ 系の状態図 (Manipulate and Refresh)

■ 共晶点(相平衡)を表示させる

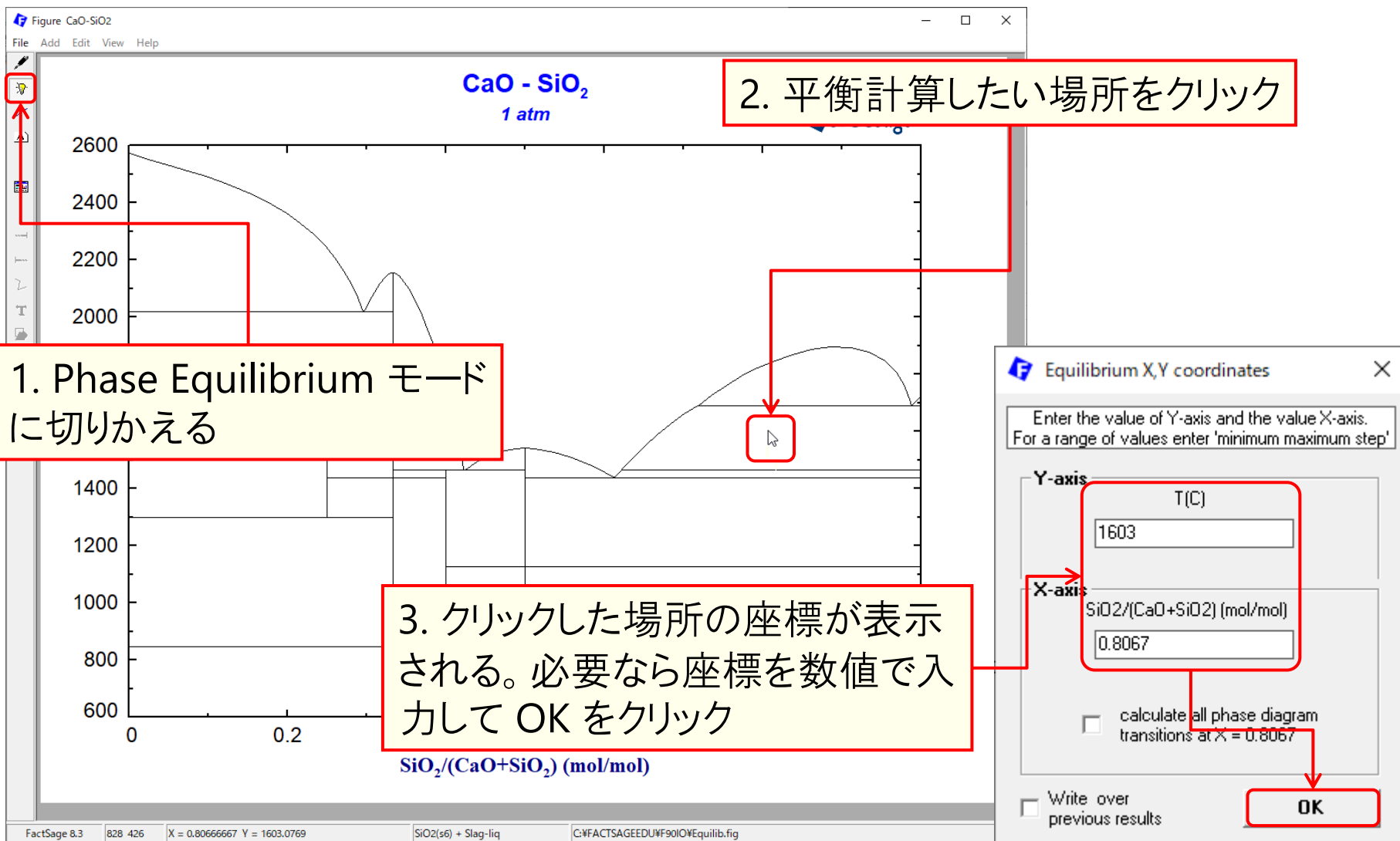
phase equilibria ボタンをクリック



相平衡が表示される

CaO-SiO₂ 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-SiO₂ 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

The screenshot shows the 'Phase Diagram Equilibrium' window. The 'Format' menu is open, and 'ChemSage Format' is selected with a blue arrow. The main window displays the results of a phase equilibrium calculation for the CaO-SiO₂ system. The output includes the chemical formula 'CaO + SiO2 =', the amount of each phase in moles and grams, the site fraction of sublattice constituents, and a table of system components with their amounts and fractions.

FactSageEdu limited to the elements O Si Ca

FactSage 8.3

CaO + SiO2 =

0.59086 mol Slag-liq#1
(34.727 gram, 0.59086 mol)
(1603 C, 1 atm, a=1.0000)
(0.67285 SiO2
+ 0.32715 CaO)

Site fraction of sublattice constituents:

Si	0.67285
Ca	0.32715

O	1.0000

System component	Amount/mol	Amount/gram	Mole fraction	Mass fraction
CaO_Lime(s)	0.19330	10.840	0.32715	0.31214
SiO2_Quartz(l)(s)	0.39756	23.887	0.67285	0.68786

+ 0 mol Slag-liq#2
(1603 C, 1 atm, a=0.96978)
(0.99309 SiO2
+ 6.9053E-03 CaO)

+ 0.40914 mol SiO2_Cristobalite(h)
(24.583 gram, 0.40914 mol)
(1603 C, 1 atm, S6, a=1.0000)

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

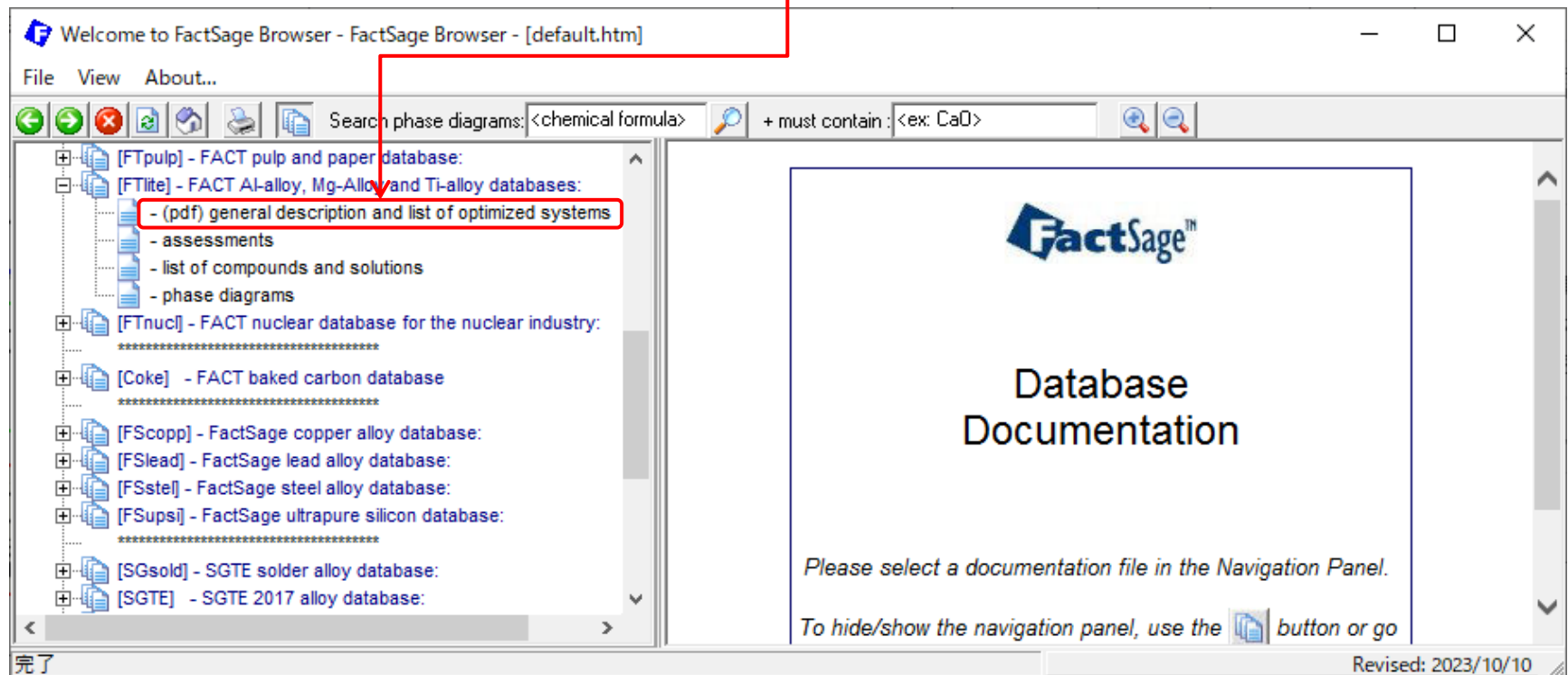
Al-Mg-Si 系の状態図

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

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

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.

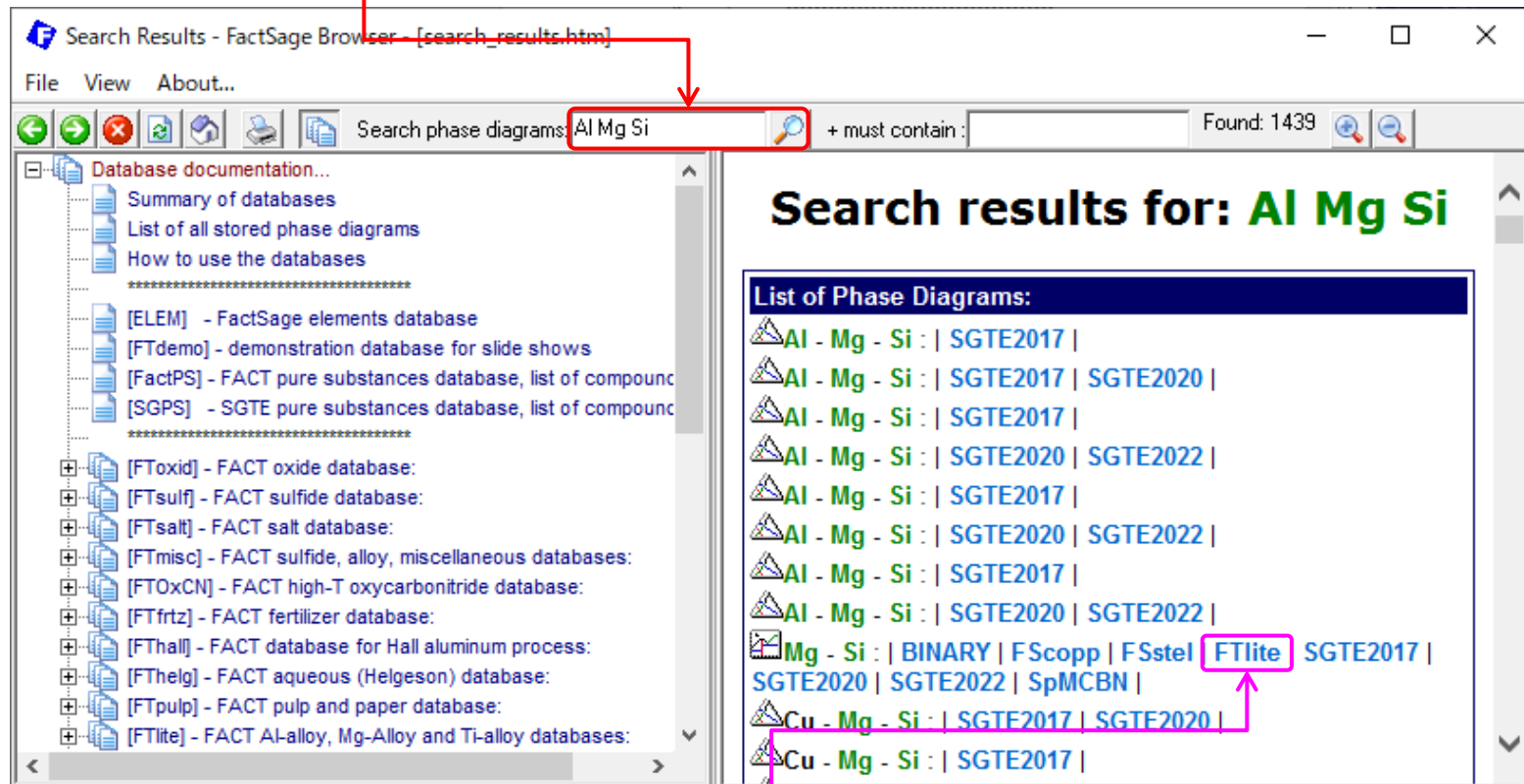
Phase selection in the EQUILIB or PHASE DIAGRAM modules using FTLite is simple: simply follow these instructions:

- 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

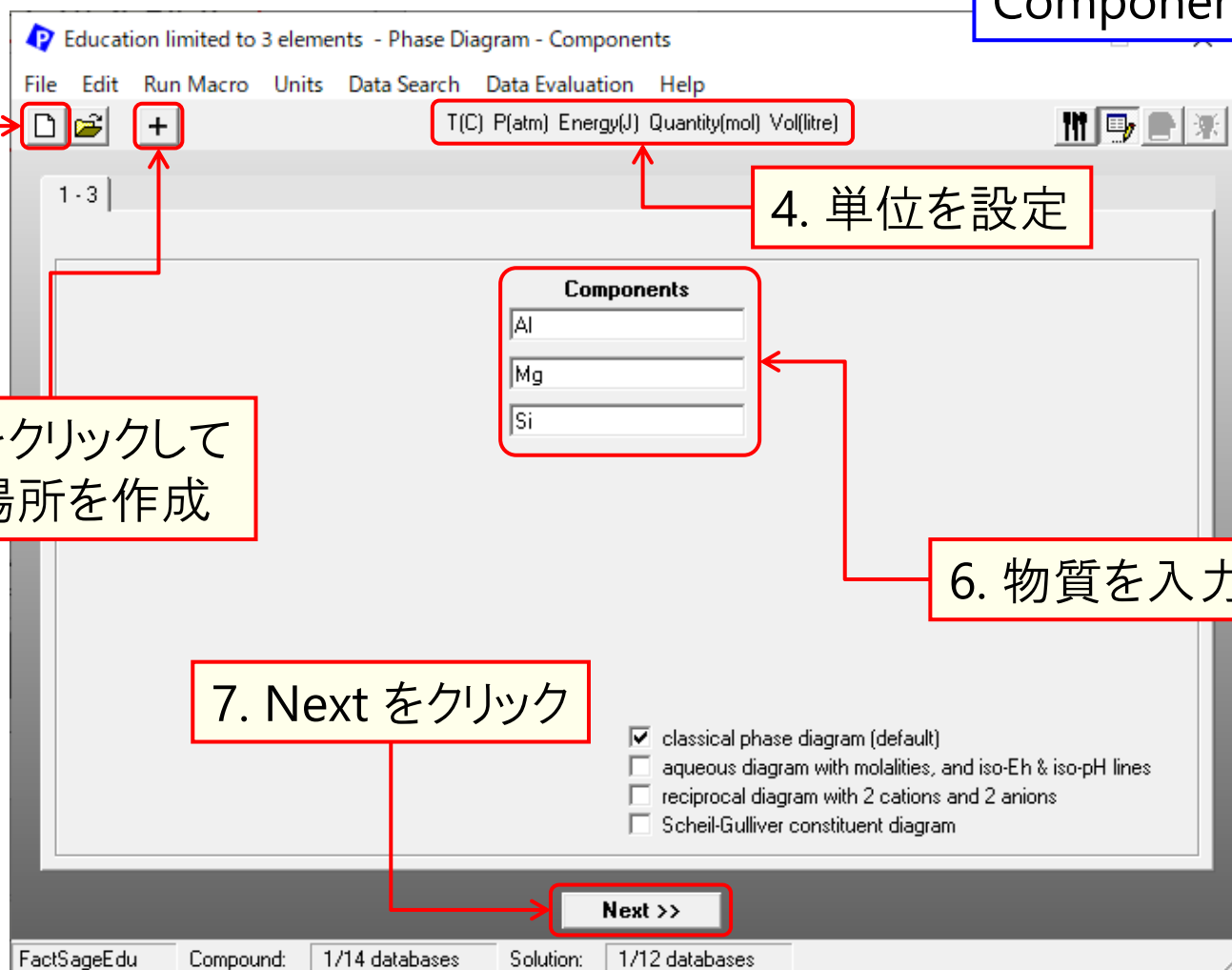


Al-Mg-Si 系は SGTE で計算可能であることがわかる。FTlite については三元系状態図が計算状態図データベースに収録されていないので、この画面では確認できない。Mg-Si, Al-Si, Al-Mg の二元系部分系が計算できることは確認できる。すべての組み合わせの部分系が計算できなければ三元系の予測精度は低いだろう

Al-Mg-Si 系の状態図

3. 新規設定 ⇒ はい ⇒ いいえ ⇒ FTlite を選択

Components Window



4. 単位を設定

5. + をクリックして
入力場所を作成

6. 物質を入力

7. Next をクリック

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

10. Variables をクリック (次ページ参照)

9. 平衡状態で存在する可能性のある純物質を選択

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 (3)

Al + Mg + Si

Solution phases

*	Base-Phase	Full Name
I	FTlite-Liqu	Liquid
J	FTlite-A1	FCC-A1
I	FTlite-A2	BCC-A2
I	FTlite-A3	HCP-A3
I	FTlite-A4	DIAM-A4 Prototype-C
I	FTlite-A12	CBCC-A12 Prototype-Mn
J	FTlite-C1a	aC1 Prototype-CaF2
I	FTlite-C14	C14 Prototype-MgZn2

Legend

- I - immiscible 9
- J - 3-immiscible 2
- + - selected 1

species: 115
solutions: 25

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) 167
Total Solutions (max 200) 25
Total Phases (max 1500) 77

Phase Diagram

Y

X

- no time limit - Calculate >>

Variables

T(C)	Mg/(Al+Mg)
0.788	0.1

FactSage 8.3

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

10-5. OK をクリック

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

Variables Al-Mg-Si composition #1 composition #1.

Variables

compositions 2

log10(a) 0

T and P

Temperature

T(C) constant 600

Pressure or Volume

P(atm) constant 1

log P

V(litre) 1

log V

total pressure isobars 1e-4 1e-3 0.0 0.1

Compositions Quantity(mol)

#1. 0 Al + 0 Mg + 1 Si = 1 (max) 0 (min)

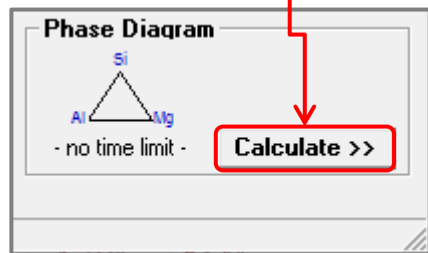
#2. 0 Al + 1 Mg + 0 Si = 1 (max) 0 (min)

#3. 1 Al + 0 Mg + 0 Si = 1 (max) 0 (min)

Cancel OK

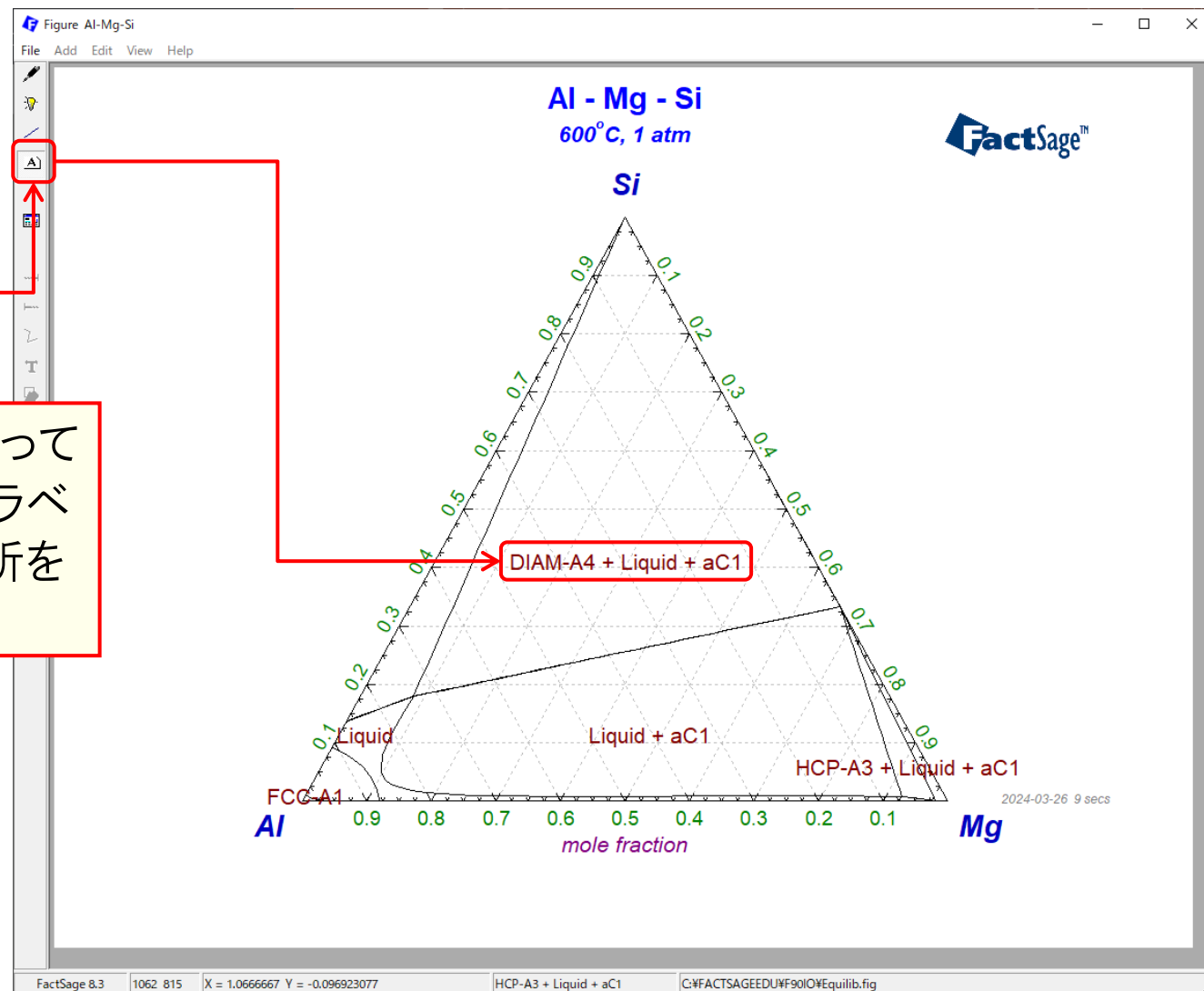
Al-Mg-Si 系の状態図

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

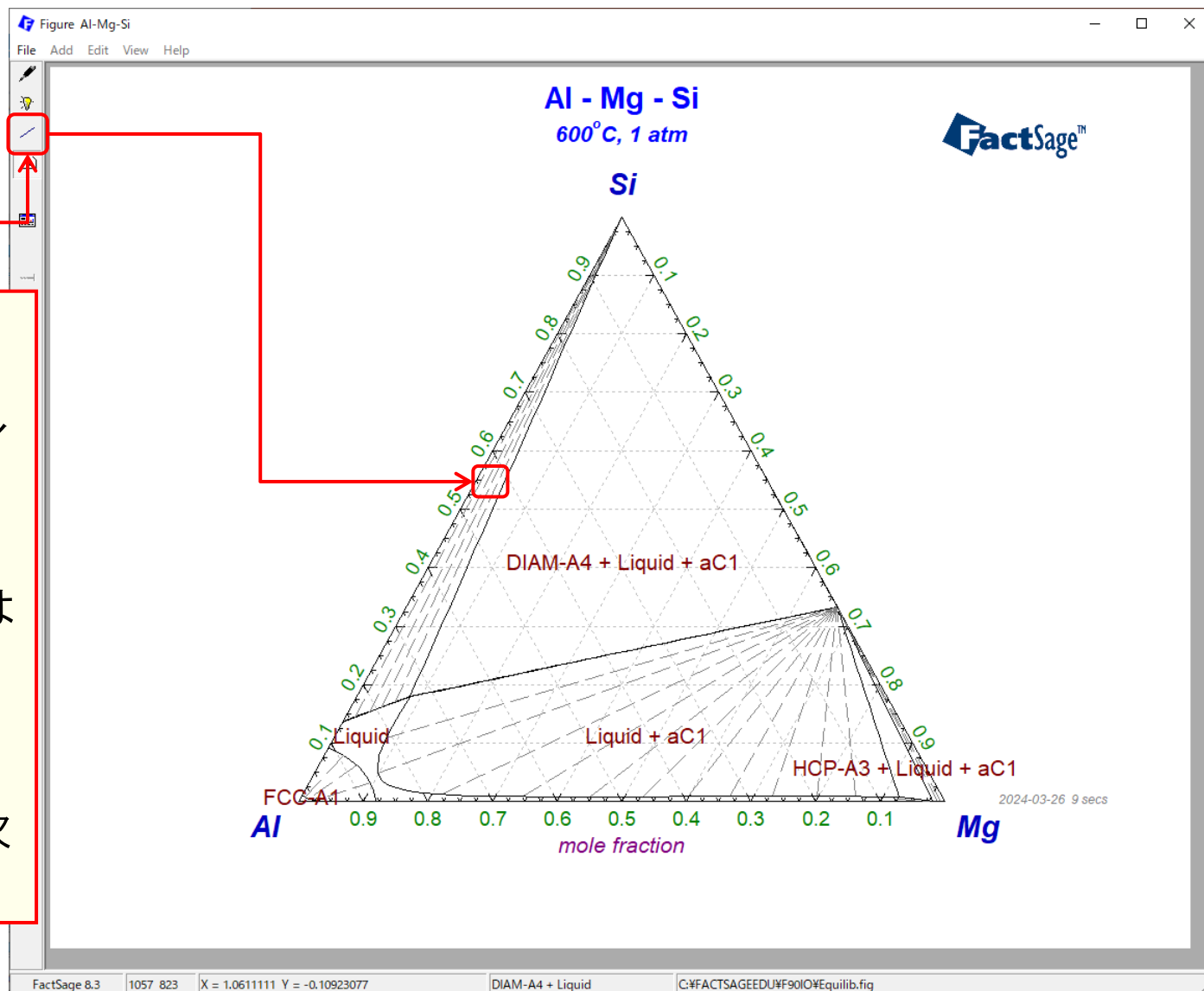


Al-Mg-Si 系の状態図

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。

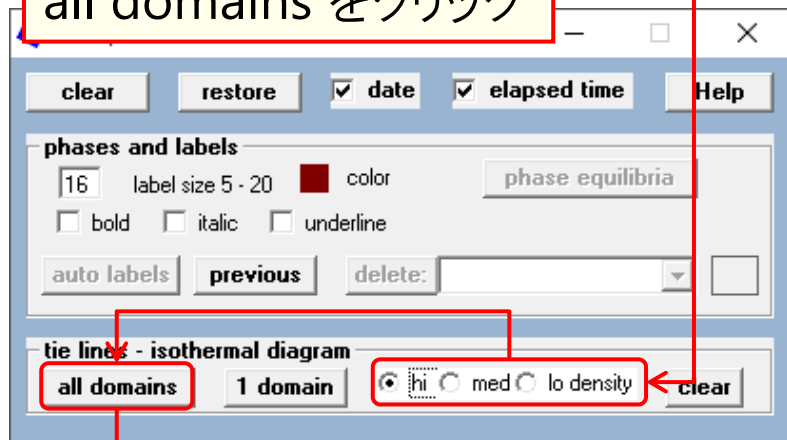
タイラインの表示は
Manipulate and
Refresh Window
の機能を使う方が
ずっと楽である。次
ページに示す



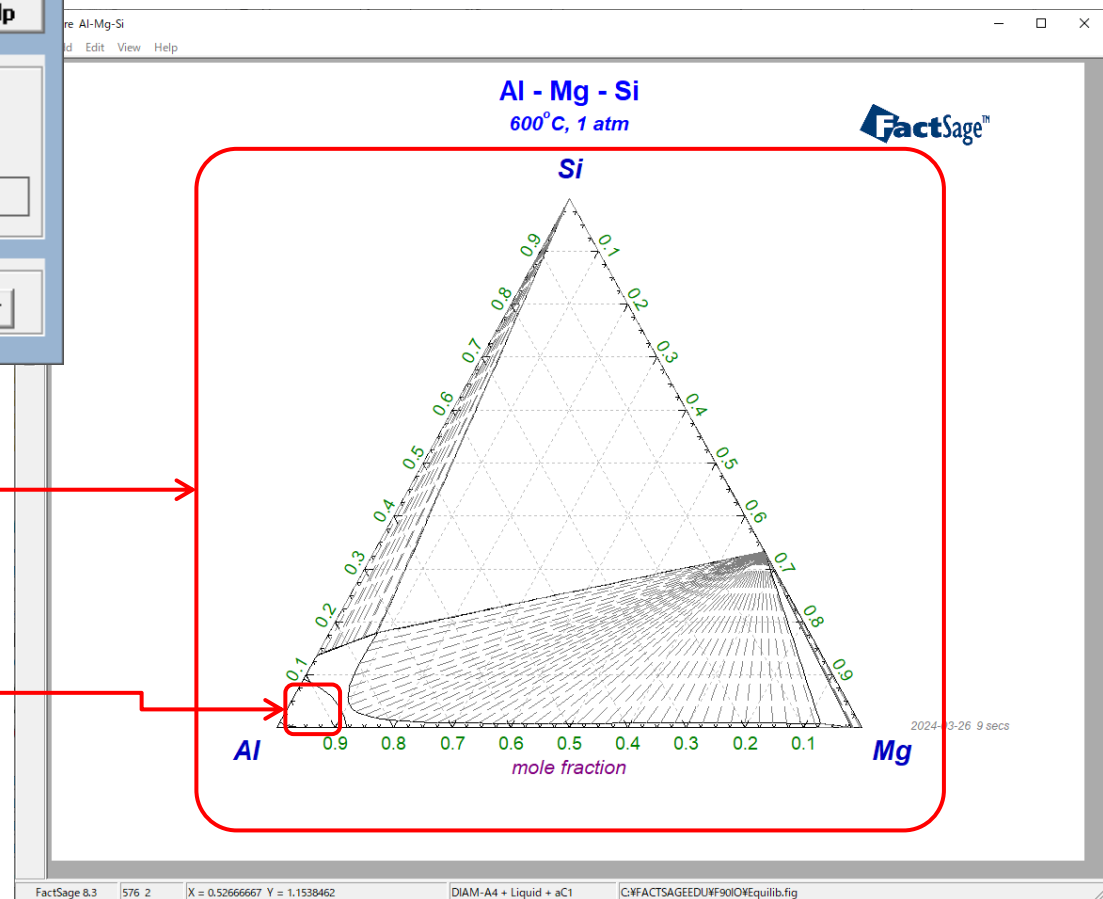
Al-Mg-Si 系の状態図 (Manipulate and Refresh)

■ 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

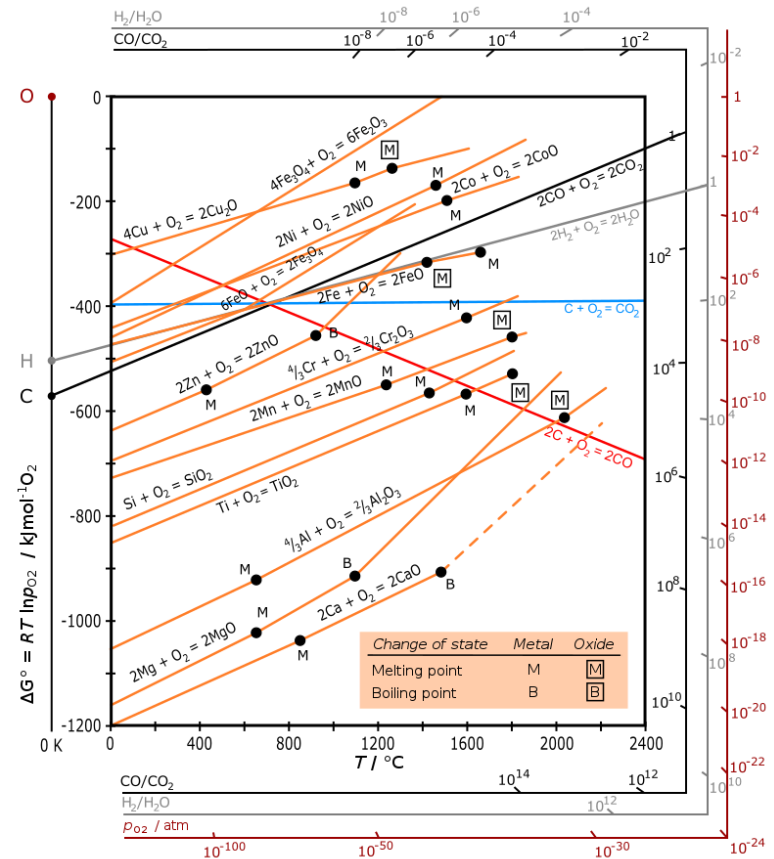


Fe-O₂ 系の状態図 / エリンガム図

Fe-O₂ 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。

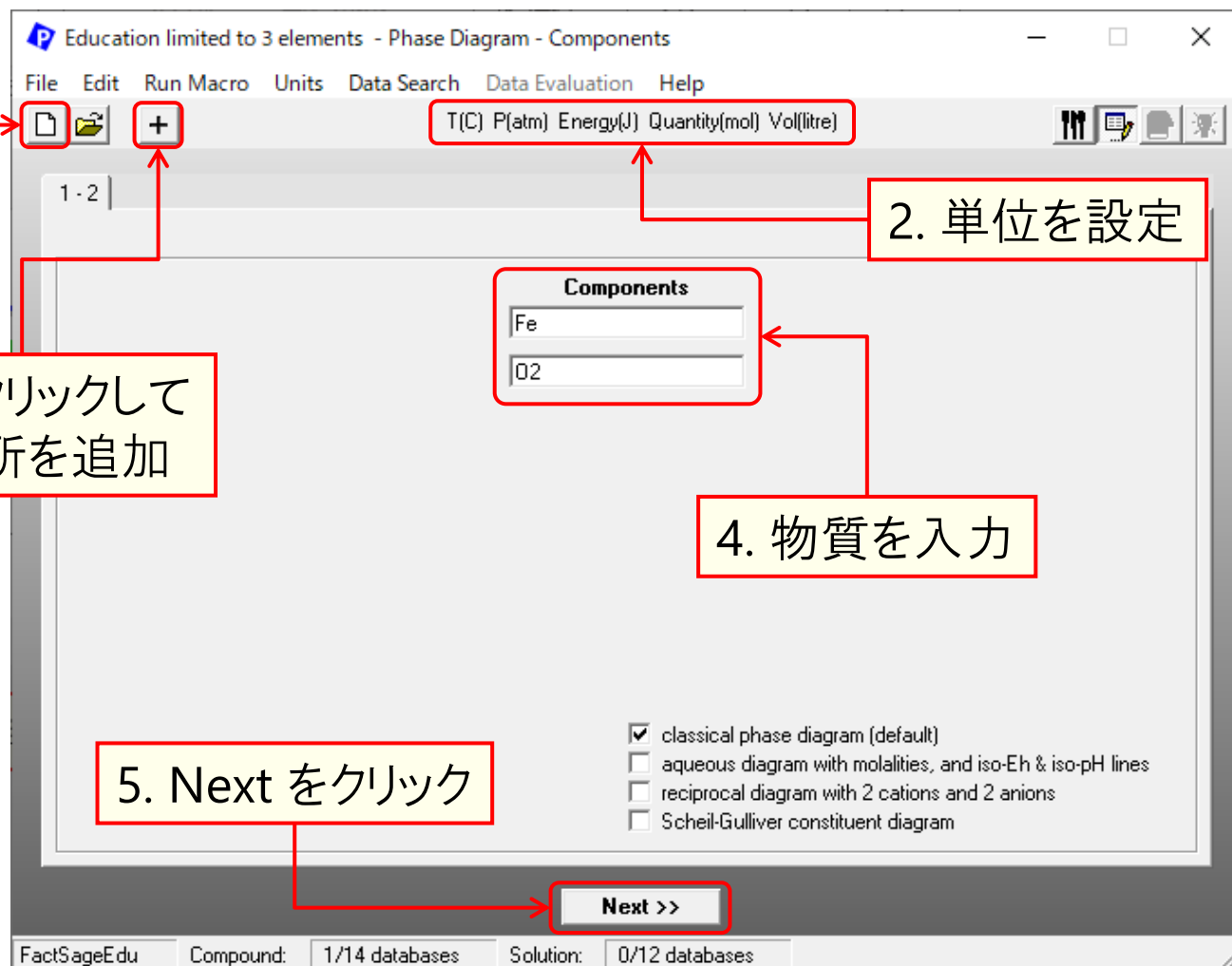


「エリンガムダイアグラム」ウィキペディア日本語版 2024 年 4 月 30 日 16:20(日本時間) 現在での最新版を取得。
<https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%82%A8%E3%83AA%E3%83B3%E3%82AC%E3%83A0%E3%8380%E3%82A4%E3%82A2%E3%82B0%E3%83A9%E3%83A0>

Fe-O₂ 系の状態図 / エリンガム図

■ Fe-O₂ 系の状態図を計算する。縦軸を $RT\ln(p(\text{O}_2))$ とする

1. 新規設定 ⇒ はい ⇒ いいえ ⇒ FactPS を選択



3. + をクリックして
入力場所を追加

2. 単位を設定

4. 物質を入力

5. Next をクリック

Fe-O₂ 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

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]

Fe + O₂

Products

Compound species

- ☒ gas ☒ ideal ☐ real
- ☐ aqueous
- ☒ pure liquids
- ☒ pure solids

species: 18

Target
- none -
Estimate T(K): 1000

Variables

T(C)	RTln(p(O ₂))		
0 2400	-1200000 0		

RTln p(O₂) vs T(C)

7. 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)

Phase Diagram

Y
X
- no time limit - **Calculate >>**

FactSage 8.3

Fe-O₂ 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 $RT\ln(a)$ 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

Variables Fe-O2 R(T/K)ln p(O2)/atm (J) vs T(C)

Variables

Y ☒ X

a ☐ b ☐ c ☐ d ☐

A ☐ B ☐ C ☐

X,Y steps 11

compositions 0

RTln(a) 1

Next >>

T and P

Temperature

☒ T(C) ☐ 1/TK

Max: 2400

Min: 0

Pressure or Volume

☒ P(atm) ☐ log P ☐ V(litre) ☐ log V

constant

1

total pressure isobars

1e-4 1e-3 0.0 0.1

Chemical Potentials (J)

#1 R(T/K)ln(p/atm) Y-axis

O2 0

gas -1200000

Cancel OK

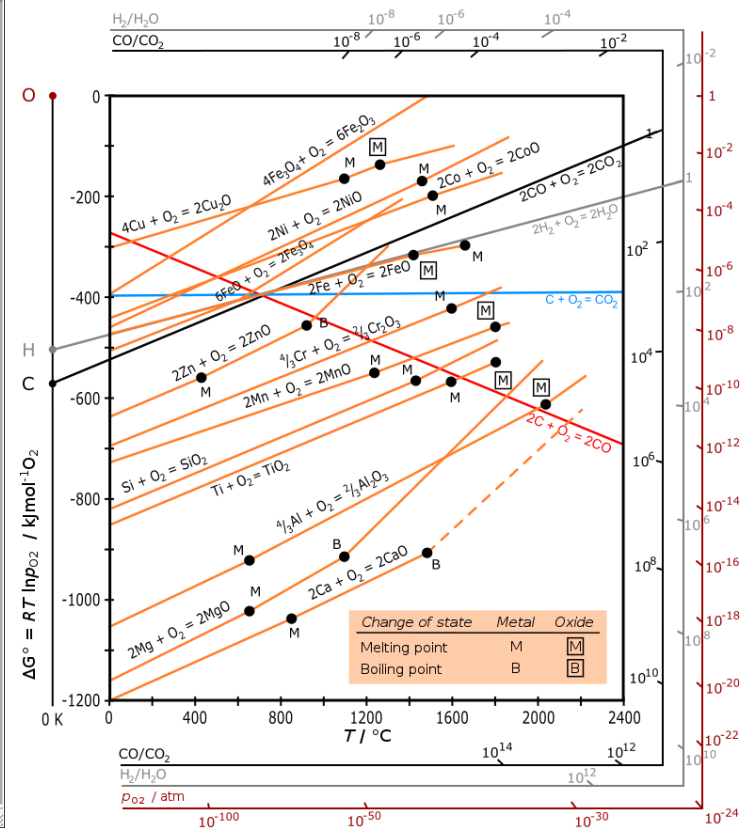
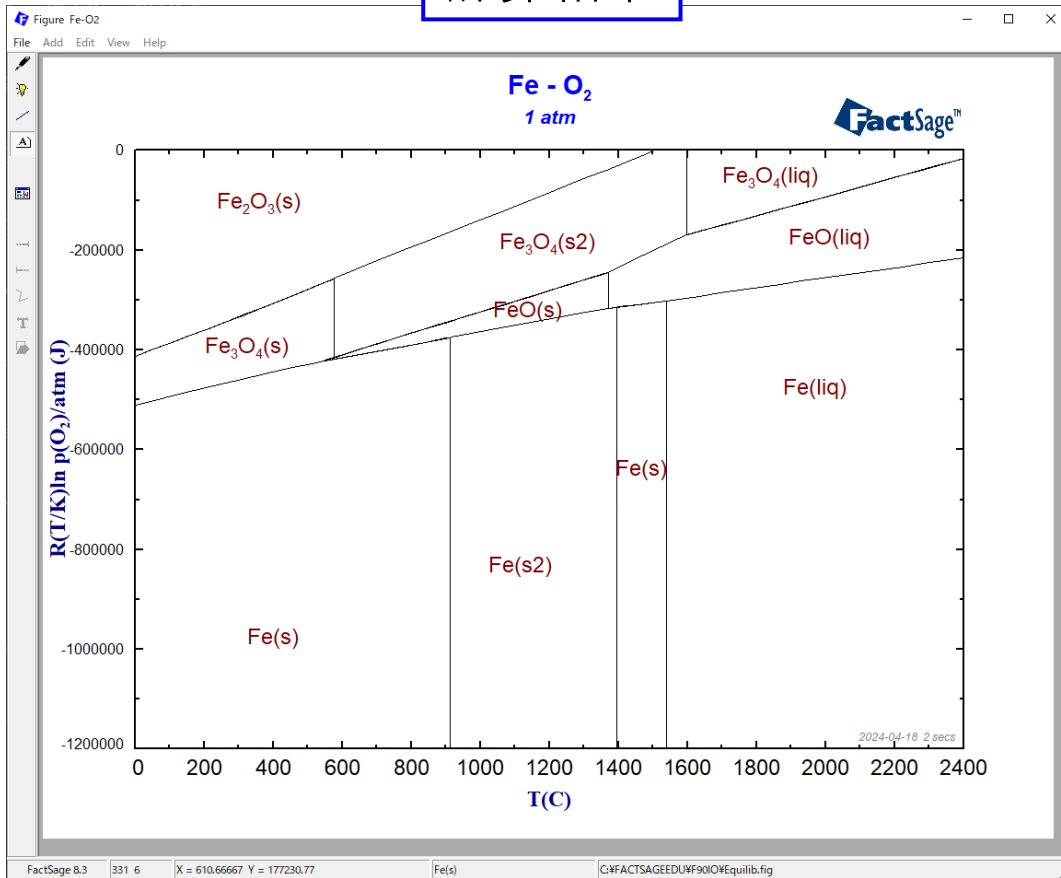
7-5. $RT\ln(p)$ を設定する。気体なので分圧 p と表示される

7-6. OK をクリック

Fe-O₂ 系の状態図 / エリンガム図

8. Calculate をクリック

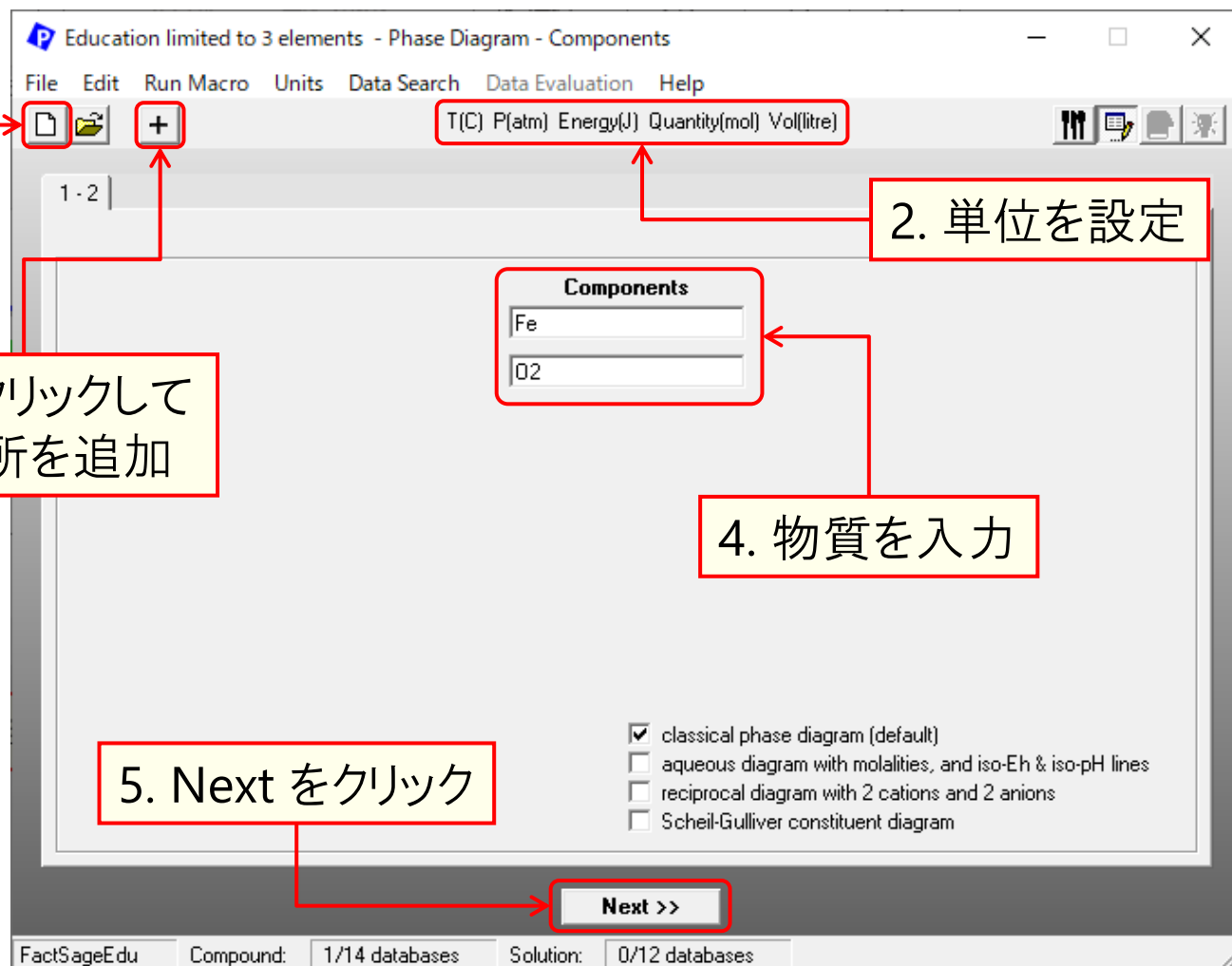
計算結果



Fe-O₂ 系の状態図 / エリンガム図

■ Fe-O₂ 系の状態図を計算する。縦軸を p(O₂) とする

1. 新規設定 ⇒ はい ⇒ いいえ ⇒ FactPS を選択



Fe-O₂ 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

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]

Fe + O₂

Products

Compound species

- ☒ gas ☒ ideal ☐ real
- ☐ aqueous
- ☐ pure liquids
- ☐ pure solids

species: 18

Target

- none -

Estimate T(K): 1000

Variables

T(C)	log10(p(O ₂))		
0 2400	-70 0		

log10 p(O₂) vs T(C)

Phase Diagram

Y

X

- no time limit - **Calculate >>**

7. 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)

Fe-O₂ 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

Variables: Fe-O2 log10 p(O2)/atm vs T(C)

Variables

Y ☒ X

a ☐ b ☐ c ☐ d

A ☐ B ☐ C

X,Y steps 11

compositions 0

log10(a) 1

Next >>

T and P

Temperature

☒ T(C) ☐ 1/TK

X-axis

Max: 2400

Min: 0

Pressure or Volume

☒ P(atm) ☐ log P ☐ V(litre) ☐ log V

constant

1

☐ total pressure isobars

1e-4 1e-3 0.0 0.1

Chemical Potentials

#1 log10(p/atm) Y-axis

O2 0

gas -70

Cancel OK

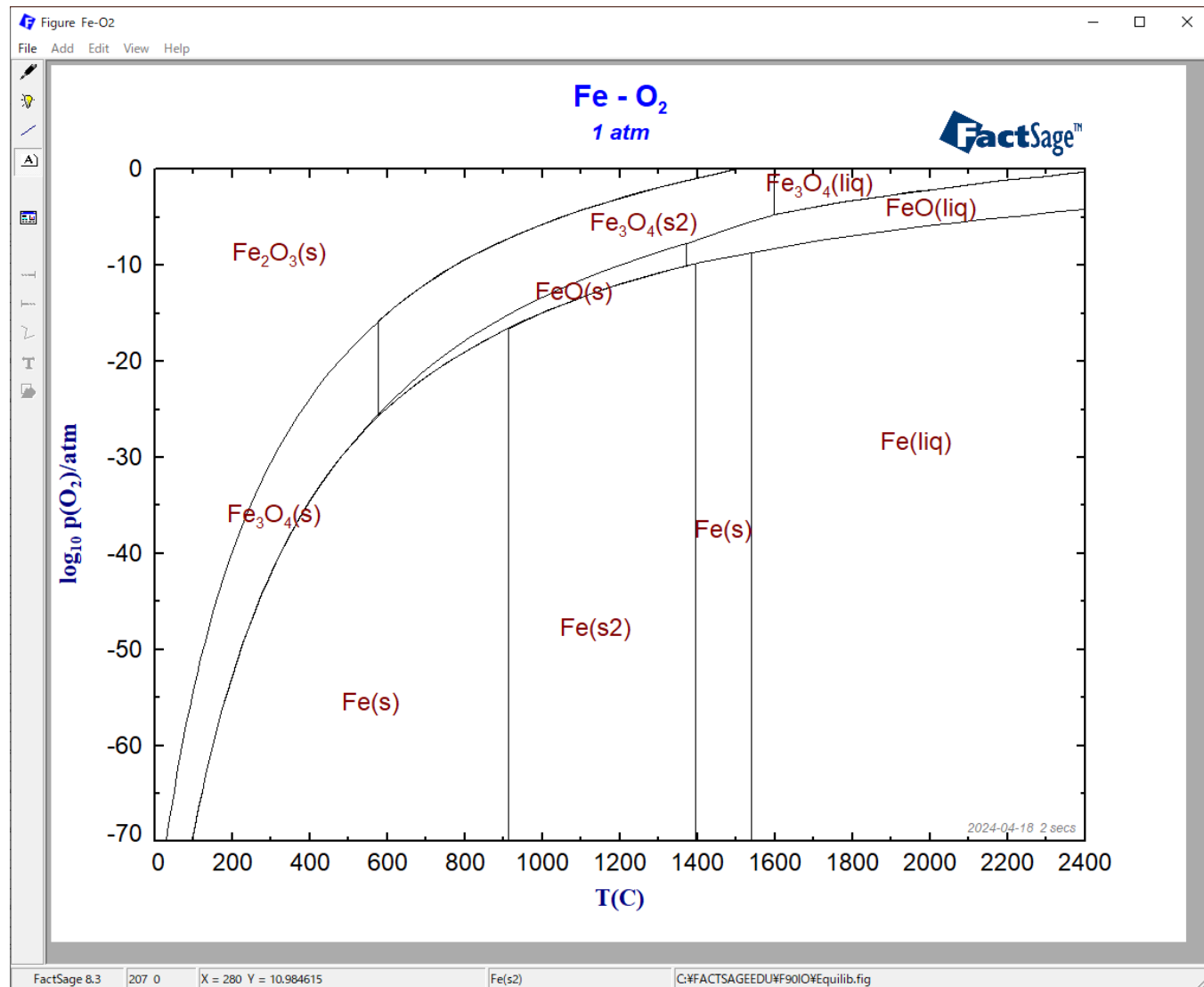
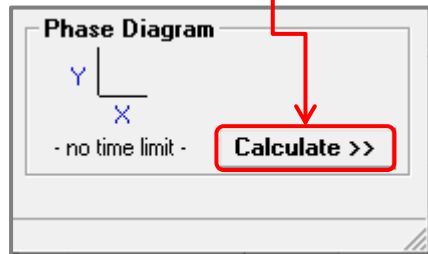
7-5. log10(p) を設定する。気体なので分圧 p と表示される

7-6. OK をクリック

Fe-O₂ 系の状態図 / エリンガム図

8. Calculate をクリック

計算結果

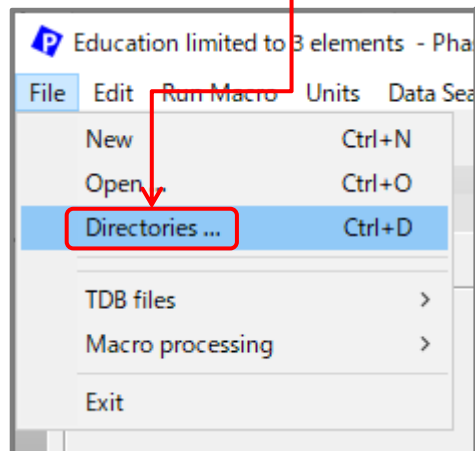


サンプルの表示

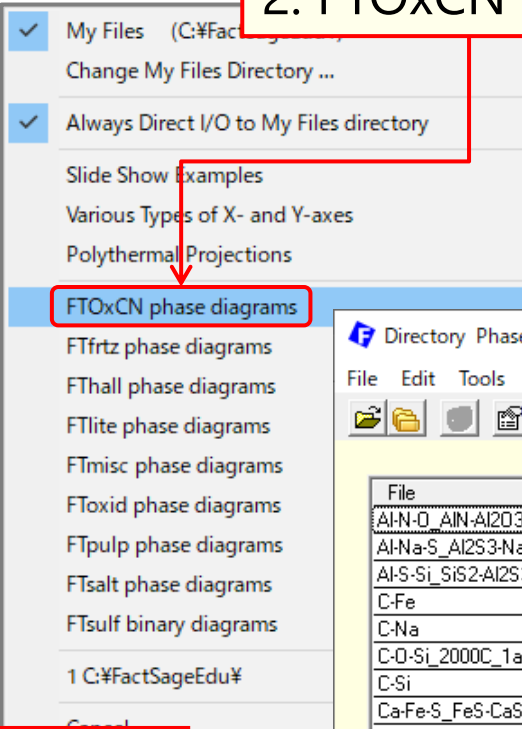
Phase Diagram アプリの計算設定方法はサンプルで確認しよう。

サンプルの表示

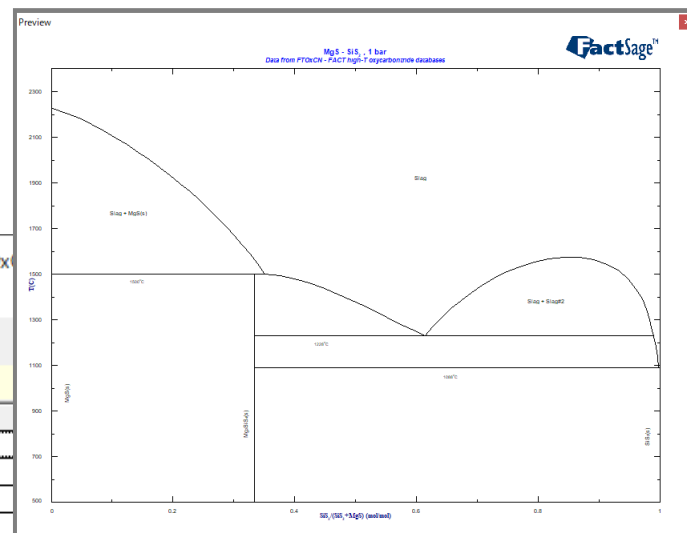
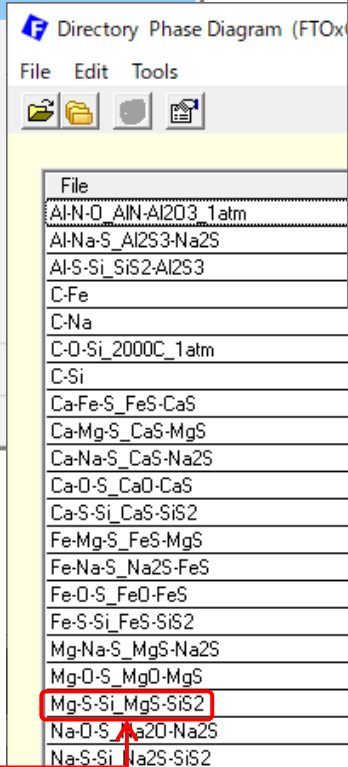
1. File ⇒ Directories ...



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



C-Na	Data from FTOxCN / Na + C
C-O-Si_2000C_1atm	Data from FTOxCN / C + O + Si
C-Si	Data from FTOxCN / C + Si
Ca-Fe-S_FeS-CaS	Data from FTOxCN / FeS + CaS
Ca-Mg-S_CaS-MgS	Data from FTOxCN / CaS + MgS
Ca-Na-S_CaS-Na2S	Data from FTOxCN / Na2S + CaS
Ca-O-S_CaO-CaS	Data from FTOxCN / CaO + CaS
Ca-S-Si_CaS-SiS2	Data from FTOxCN / CaS + SiS2
Fe-Mg-S_FeS-MgS	Data from FTOxCN / FeS + MgS
Fe-Na-S_Na2S-FeS	Data from FTOxCN / Na2S + FeS
Fe-O-S_FeO-FeS	Data from FTOxCN / FeO + FeS
Fe-S-Si_FeS-SiS2	Data from FTOxCN / FeS + SiS2
Mg-Na-S_MgS-Na2S	Data from FTOxCN / Na2S + MgS
Mg-O-S_MgO-MgS	Data from FTOxCN / MgO + MgS
Mg-S-Si_MgS-SiS2	Data from FTOxCN / MgS + SiS2
Na-O-S_Na2O-Na2S	Data from FTOxCN / Na2O + Na2S
Na-S-Si_Na2S-SiS2	Data from FTOxCN / Na2S + SiS2

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/>