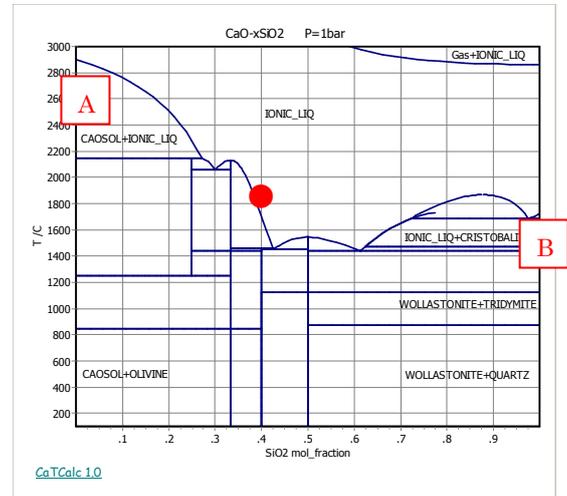


A : はい、指定できます。  
 活量値を log10 の形式で入力します。

解説 :

- まず CaO-SiO<sub>2</sub> 擬 2 元系状態図を計算します。  
 1800°C - 40mol%SiO<sub>2</sub> の点を平衡計算し  
 活量値を確認してみよう。

MgO-DB を使用し、液相から Va を除外した  
 場合の結果を右図に示す。この図より、  
 1800°C、40mol%SiO<sub>2</sub> における安定相は  
 液相のみであることを確認できます。



融点直下における安定相の化合物の相名は

CaO は CAOSOL 相 = Lime 相 A  
 SiO<sub>2</sub> は CRISTOBALITE 相 B

であることを確認できます。

温度 1800°C、濃度 40mol%SiO<sub>2</sub> の点  
 における 1 点平衡計算を行います。  
 この点における活量値を確認します。

活量(CaO) = 0.05409071 C  
 活量(SiO<sub>2</sub>) = 0.03106925 D

Atom Amount (Liq) = 2.4 の根拠は E  
 CaO が 0.6、SiO<sub>2</sub> が 0.4 と考え、  
 Ca = 0.6、O = 0.6、Si = 0.4、O = 2\*0.4、  
 を合計した値が 2.4 となります。

これより液相中の構成元素比率

$$\left. \begin{aligned} X(\text{Liq,Ca}) &= 0.6 / 2.4 = 0.25 \\ X(\text{Liq,Si}) &= 0.4 / 2.4 = 0.16666 \\ X(\text{Liq,O}) &= 1.4 / 2.4 = 0.58333 \end{aligned} \right\} \text{ F }$$

が求まります。

IONIC_LIQ	MgO	Atom Amount	2.4	<span style="border: 1px solid red; padding: 2px;">E</span>
		Activity	1	
	Element	Ca	0.25	
	Element	Si	0.1666667	<span style="border: 1px solid red; padding: 2px;">F</span>
	Element	O	0.5833333	
	SubLattice:0	Size	2.978846	
		Ca(+2)	1	
	SubLattice:1	Size	2	
		O(-2)	0.007051466	
		O4Si(-4)	0.7411857	
		O2Si	0.2517629	
CAOSOL	MgO	Mole Amount	0	
	CaO	Activity	0.05409071	<span style="border: 1px solid red; padding: 2px;">C</span>
HALITE	MgO	Mole Amount	0	
	CaO	Activity	0.05409071	
ALPHA_CA2SIO4	MgO	Mole Amount	0	
CRISTOBALITE	MgO	Mole Amount	0	
	O2Si	Activity	0.03106925	<span style="border: 1px solid red; padding: 2px;">D</span>
QUARTZ	MgO	Mole Amount	0	
	O2Si	Activity	0.02870037	
TRIDYMIT	MgO	Mole Amount	0	
	O2Si	Activity	0.03088017	
Ca		kJ/mol	-508.4335	
Si		kJ/mol	-462.6774	
O		kJ/mol	-368.0296	

$$G = -1005373 \text{ J/mol}$$

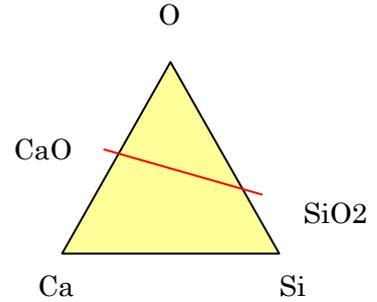
2) 活量の基礎式から

温度 1800°C、濃度 40mol%SiO<sub>2</sub> の点における活量値を求めてみよう。

2-1) 平衡計算で元素の化学ポテンシャルを求める。 前ページ背景色がピンク色の部分参照。

2-2) 活量を計算する化学種の自由エネルギー値 G を求める (Property Window)。

CAOSOL 相(CaO)の 1800°Cにおける  $G = -826180.5$   
 Cristobalite 相(SiO<sub>2</sub>)の 1800°Cにおける  $G = -1138897$



2-3) 基礎式  $\mu_i - \mu_i^0 = RT \ln(a_i)$

$$\mu_{CaO} = -508433.5 + (-368029.6) = -876463.1$$

$$\mu^0_{CaO} = -826180.5$$

$$a(CaO) = \exp((-876463.1 - (-826180.5)) / (8.31451 / 2073.15))$$

$$= \exp(-2.9170934) = 0.05409068$$

$$\mu_{SiO2} = -462677.4 + 2 * (-368029.6) = -1198736.6$$

$$\mu^0_{SiO2} = -1138897$$

$$a(SiO2) = \exp((-1198736.6 - (-1138897)) / (8.31451 / 2073.15))$$

$$= \exp(-3.4715329) = 0.03106937$$

このように活量値が求まる。 (前ページの **C** **D** に対応)

3) 計算条件に活量値を指定し、同じ結果が得られることを確認してみよう。

3-1) SiO<sub>2</sub> = 0.4 mol

CaO 活量 = 0.05409071、  $\log_{10}(0.05409071) = -1.2668773$  と  $\log_{10}$  の形式で入力します。

Feed/Activity Conditions		Set SER Elements		Unit /mol	
Phase	Species	Select	Value		
CAOSOL	CaO	Log(A)	-1.2668773		
CRISTOBALITE	O2Si	Feed	0.4		

CaO の濃度値を指定せずに計算します。  
 1800°Cの計算で同じ結果が得られます。  
 CaO の濃度値に関しては、  
 CaO の **ExtraFeed** 値は **0.6** と  
 計算結果値画面に表示されます。

Volume	0	L	0
ExtraFeed	CaO	mol	0.6
ErrorCode			0
Loop			41
<input type="checkbox"/> Only active phases <input type="checkbox"/> Mass <input checked="" type="checkbox"/> SubLattice			

3-2) SiO<sub>2</sub> = 0.4 ではなく、残量 b の変数を使用した場合

CaO 活量 = 0.05409071 の場合、 $\log_{10}(0.05409071) = -1.2668773$

Feed/Activity Conditions		Set SER Elements		Unit /mol	
Phase	Species	Select	Value		
CAOSOL	CaO	Log(A)	-1.2668773		
CRISTOBALITE	O2Si	Feed	b		

CaO の ExtraFeed 値は 1.5 と画面下部に表示されます。これに系の初期モル量 1 を足し合わせ、CaO のモル比率換算は  $1.5 / (1+1.5) = 0.6$  となります。活量指定で計算される分 ExtraFeed 分が全 mol 数に含まれない。

		P /bar	1
Phase	DataBase	T /C	1800
IONIC_LIQ	MgO	Atom Amount	6
		Activity	1
	Element	Ca	0.25
	Element	Si	0.1666667
	Element	O	0.5833333
Volume	0	L	0
ExtraFeed	CaO	mol	1.5
ErrorCode			0
Loop			36

Only active phases  
 Mass  SubLattice

Atom Amount (Liq) = 6 の根拠は G

CaO = ExtraFeed = 1.5,

SiO<sub>2</sub> = 1 と考え、

Ca = 1.5、O = 1.5、Si = 1、O = 2、

を合計した値が 6 となります。

$$X(\text{Liq,Ca}) = 1.5 / 6 = 0.25$$

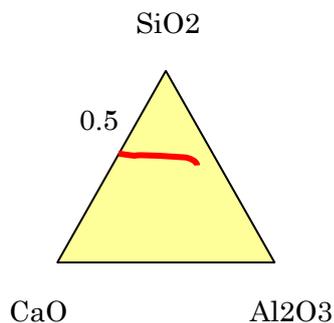
$$X(\text{Liq,Si}) = 1 / 6 = 0.16666$$

$$X(\text{Liq,O}) = 3.5 / 6 = 0.58333$$

H

Activity A	log <sub>10</sub> (A)
0.8	-0.096910
0.5	-0.301030
0.3	-0.522879
0.1	-1
0.05	-1.301030
0.01	-2

4) 擬 3 元系以上で等活量線 0.5 を計算する場合には残量 b の変数を利用します。



模式図

1600°C Iso-SiO<sub>2</sub> activity line

SiO<sub>2</sub> 活量 :  $\log_{10}(0.5) = -0.30103$

Feed/Activity Conditions		Set SER Elements		Unit /mol	
Phase	Species	Select	Value		
CAOSOL	CaO	Feed	b		
CRISTOBALITE	O2Si	Log(A)	-0.30103		
ALPHA_AL2O3	O3Al2	Feed	x		

Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> を 0 から 100%まで連続変化させます。(変数 x )

SiO<sub>2</sub> の ExtraFeed 値が z と求めると、図の Y 軸、X 軸

(SiO<sub>2</sub>) の組成は  $z / (z + 1)$

(Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) の組成は  $x / (z + 1)$

となります。