

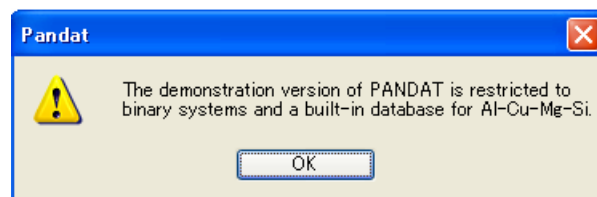
Pandat バージョン 8 デモ版の操作説明書

平成 22 年 10 月 31 日

Pandat をご利用いただきありがとうございます。バージョン 8 から PanPrecipitation など計算機能が数多く追加されました。本書では基本となる状態図計算操作について説明します。

1. デモ版起動時の表示

デモ版は 2 元系の計算に限定されます。特別に Al-Cu-Mg-Si のデータが組み込まれていてこの系に限り 4 元系まで計算できます。デモ版では Batch 機能が使用できないため、pbf (Pandat Batch File) を Import&Run できません。



2. 先ず単位を決めましょう

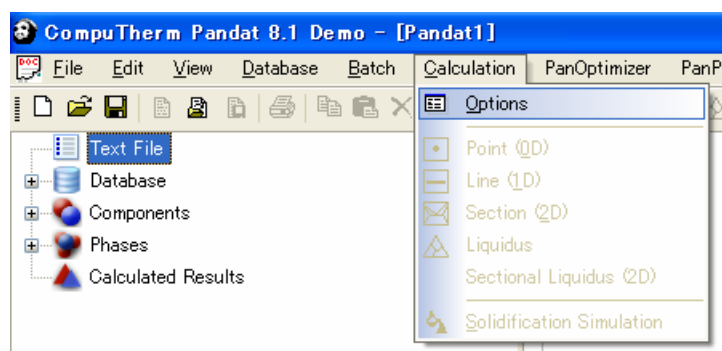
メニューから Calculation、Options を選択し、単位 Units 画面にます。

計算に用いる「圧力」「温度」「組成」「比率」単位を指示します。

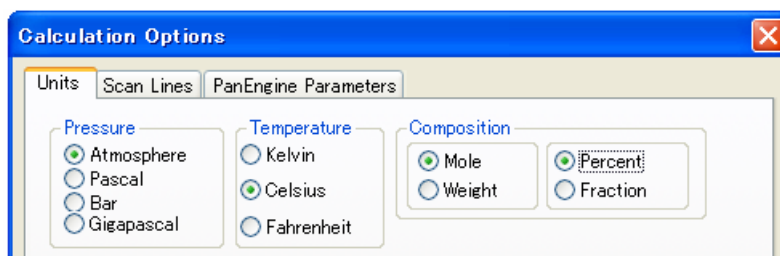
ガス相を含まない金属合金系の場合、圧力は 1 気圧とされます。

温度は K か°Cか、組成はモル組成か重量組成か、値は%値かフラクション値か指示できます。

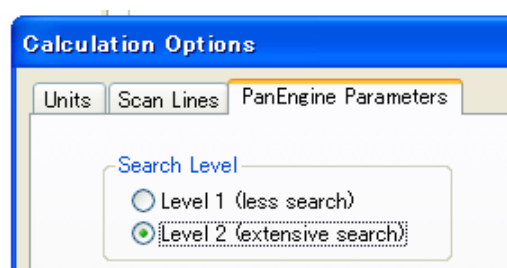
OK ボタンをクリックします。



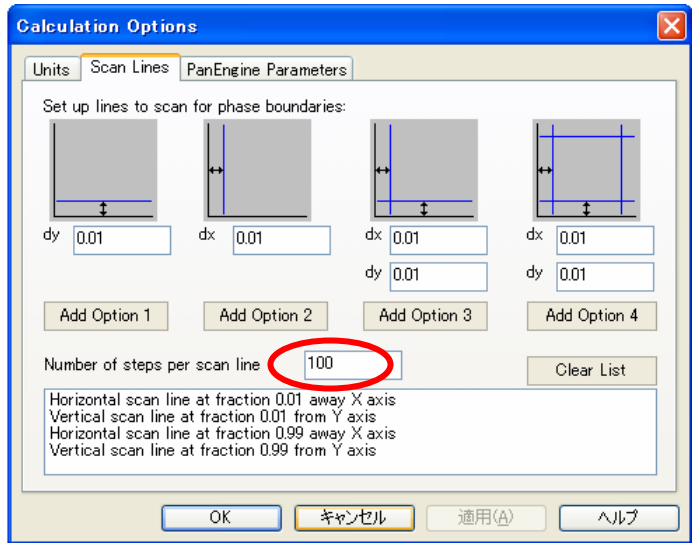
選択したオプションにより、
計算指示画面の単位が変わります。



この他に、PanEngine パラメータ・タグにて Search を Level 2 にしておくことをお勧めします。



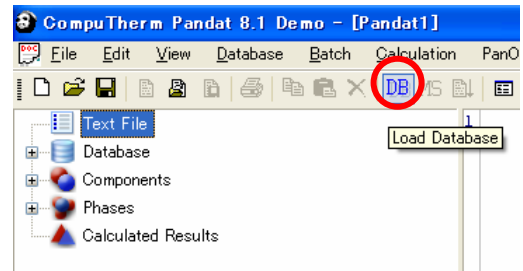
最後に、Scan Lines タグにて 1 ラインの刻み数を 100 にしておくことをお勧めします。



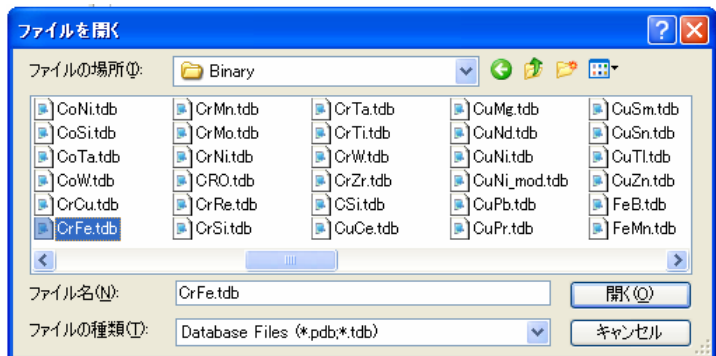
3. Cr-Fe 2 元系状態図を計算してみよう

計算に用いる熱力学データファイルを用意します。例えばホームページ <http://www.nims.go.jp/cmssc/pst/database/cr-elem/crfe/crfe.htm> から crfe_and.tdb ファイルをダウンロードします。

3-1 DBアイコンをクリックします。

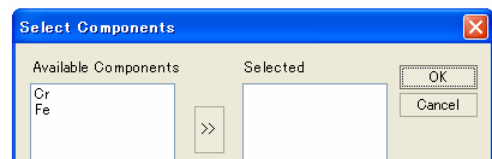


用意した CrFe.tdb ファイルを選択します。開くボタンをクリック。



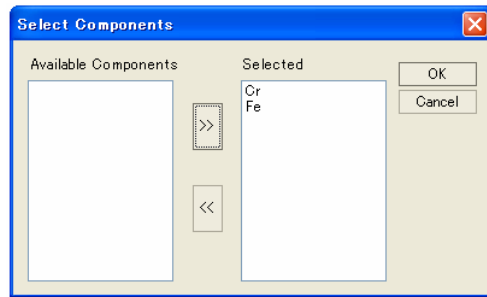
3-2 元素を選択する画面が表示されます。

ここで Cancel ボタンをクリックすると元素を選択することなく先に進めます。しかし何も計算できません。後で、




メニューから 「Database」
 → 「Select components」 を選択すること
 により、元素選択画面を再表示できます。

データファイルに含まれている元素が
 左側に表示されます。
 右側には選択した元素が表示されます。
 たとえば、Cr 元素を選択し、
 中央の \gg ボタンをクリックします。
 続いて Fe 元素を選択し、
 \gg ボタンをクリックします。

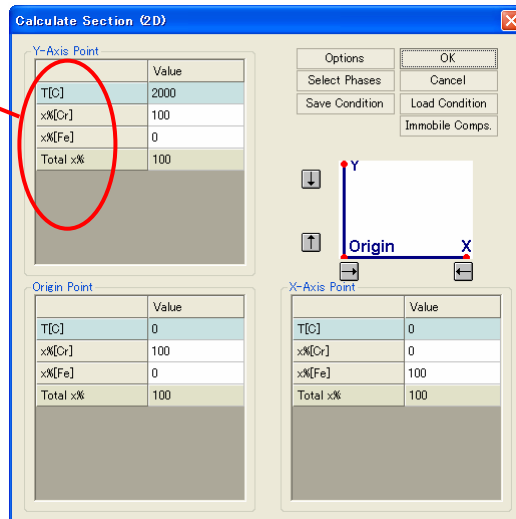


選択を解除するには \ll ボタンを利用します。

OK ボタンをクリックします。

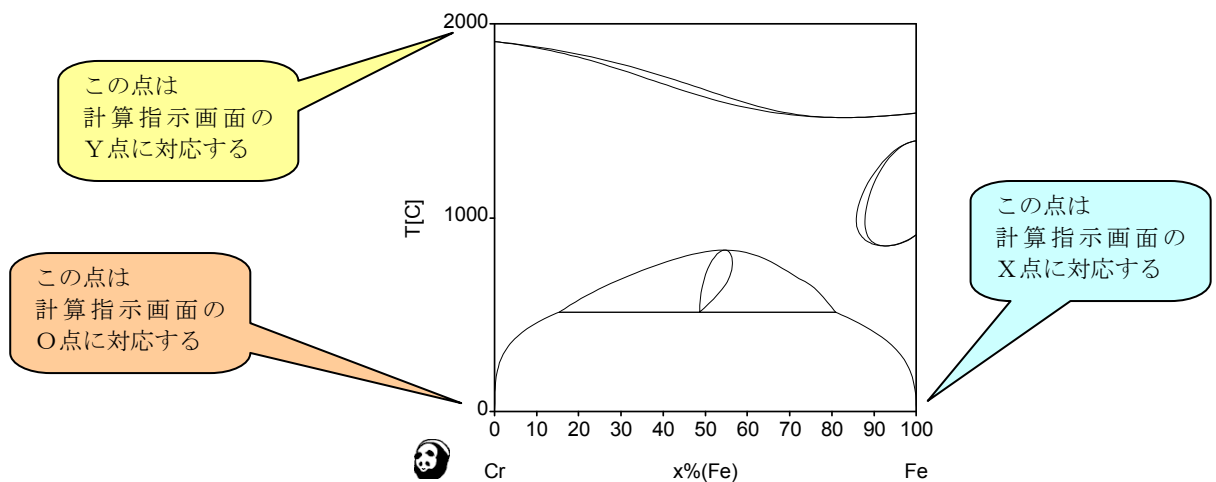
3-3 ツールバーのアイコン  をクリックします。もしくはメニュー Calculation、Section(2D)

計算指示画面が出ます。
 温度単位が°C、
 組成単位がモル%
 と指示された
 場合の表示です。



3-4 このままOKボタンをクリックします。計算が開始されます。

3-5 計算が終了すると2元系状態図が表示されます

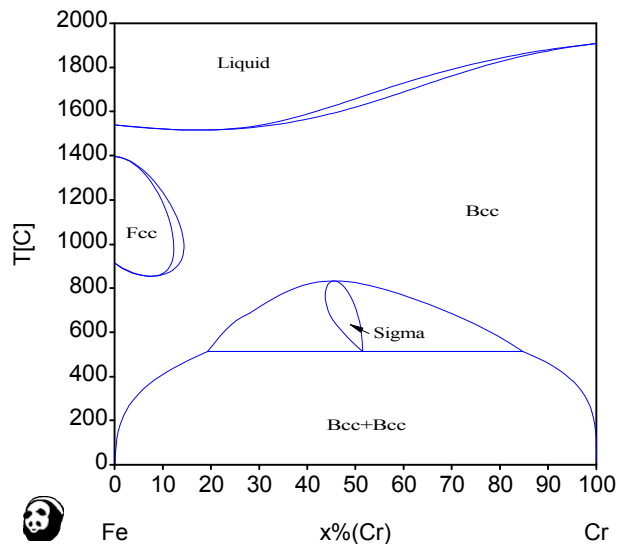


Cr-Fe 2元系の状態図の計算はこれだけの操作です。


横軸が Fe になるのは、計算指示画面にてO点を Cr 100%、X点を Fe 100% にしたためです。計算する前に軸変数を指示できますが、計算後に横軸 Cr の図に簡単に変更できます。

Pandat ソフトウェアは、相境界がそれぞれ離れていても全て網羅します。液相線・固相線、 γ ループ、 σ 化合物相、 α (BCC) 相の相分離 (BCC+BCC) 相分離が生じている場合は自動的に検知し、相分離の処理をしてくれます。

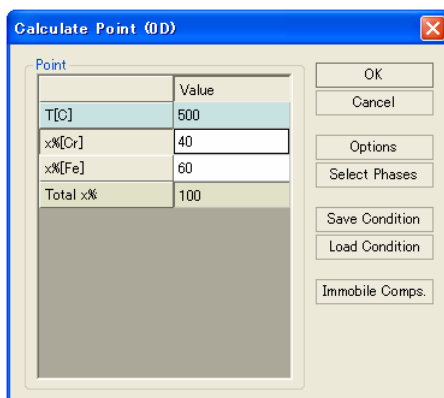
メニューから Graph、Label Mode を選択するとマウスが「+」印になります。マウスクリックすることで、その領域の平衡相の名前を表示できます。



4. Fe-40 mol%Cr の点における自由エネルギー値


4-1 500°Cの1点を平衡計算をするために、ツールバーのアイコン  をクリックします。もしくはメニューから、

Calculation、Point (0D) を選択します。数値を入力し、OK ボタンをクリックします。

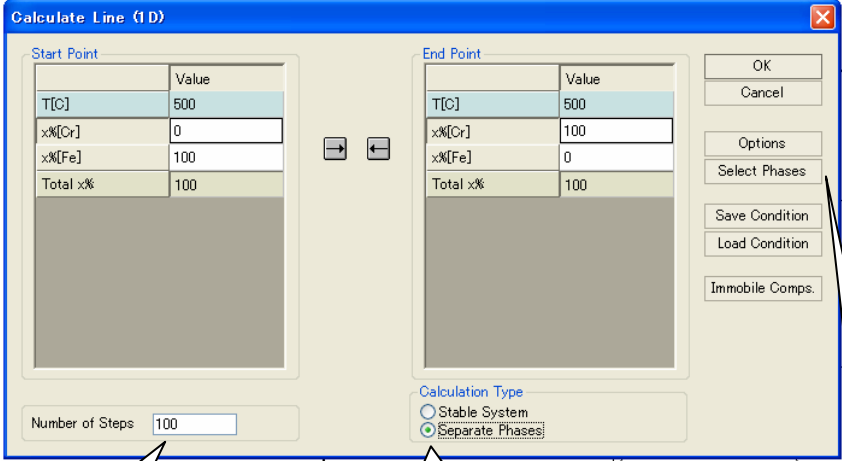


計算結果が画面に表示されます。右図

Calculated Point	A
Temperature = 773.15 K (500 C)	
Pressure = 101325 [Pa]	B
System composition and chemical potential:	
Cr : x = 0.4, wt = 0.382981, mu = -25542.2	
Fe : x = 0.6, wt = 0.617019, mu = -29272.3	
G = -27780.3	C
There are 2 stable phases:	
Phase Bcc: fraction = 0.676177	
G = -28601.7 (J/mol)	
H = 17602.1 (J/mol)	
S = 59.7605 (J/K.mol)	
Cp = 37.8068 (J/K.mol)	
T = 773.15 K	D
x[Cr] = 0.179764 (wt[Cr] = 0.169469)	
x[Fe] = 0.820236 (wt[Fe] = 0.830531)	
Phase Bcc: fraction = 0.323823	
G = -26064.9 (J/mol)	
H = 16376.3 (J/mol)	
S = 54.8939 (J/K.mol)	
Cp = 29.0152 (J/K.mol)	
T = 773.15 K	E
x[Cr] = 0.859874 (wt[Cr] = 0.851042)	
x[Fe] = 0.140126 (wt[Fe] = 0.148958)	

4-2 500°Cにおけるライン計算を実行するために、ツールバーから  をクリックします。
 もしくはメニューから、
 Calculation、Point (1D) を選択します。

計算条件入力画面 始点と終点の間のラインを計算します。
 始点を 500°C、100%Fe とし、終点を 500°C、100%Cr とします。



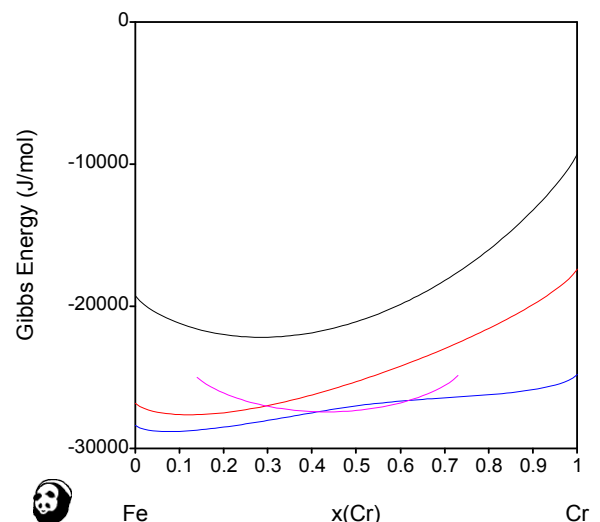
ライン間の分割数を指定できます。これは1%きざみの例


組成・自由エネルギー線図の場合のみ **Separate** を指示する。
 平衡計算の場合は **Stable** を指示する。


このまま、全ての相を計算対象とします。

OK ボタンをクリックします。 計算結果が画面に表示されます。

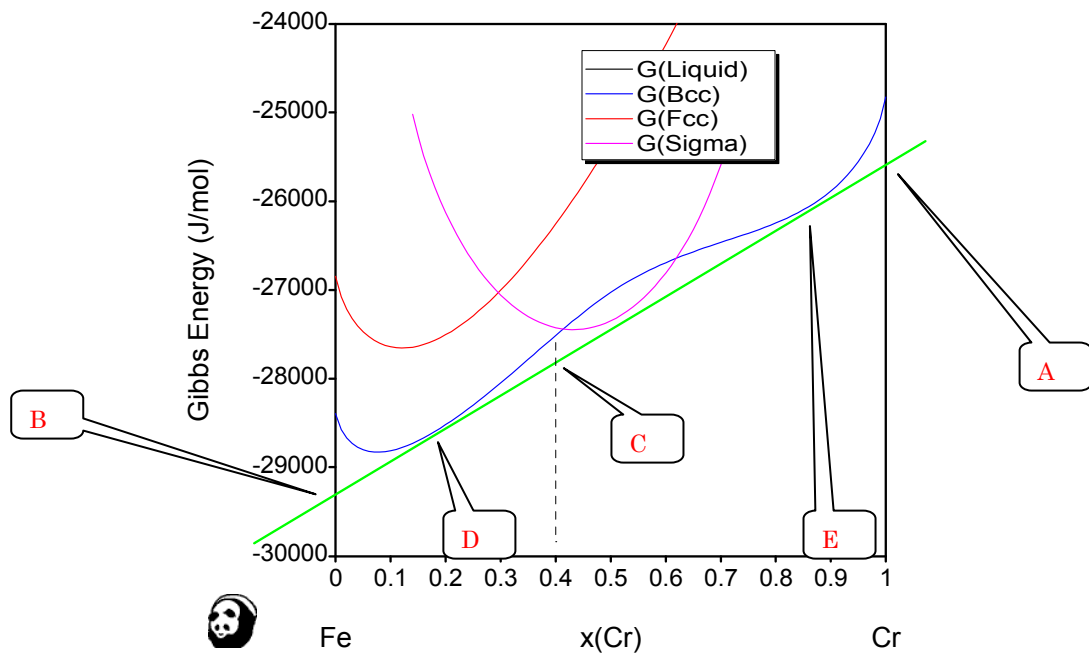
横軸は必ず fraction 単位になります。



4-3 自由エネルギー値を確認しよう
 凡例 (legend) を表示させるために
 アイコン  をクリックします。
 青色線が Bcc 相の線であることを
 確認できます。
 縦軸の表示範囲を -24000 から -30000
 に変更します。

アイコン  (Line tool) を用いて直線 (補助線) を図に追加できる。緑色とした。

さらに 40mol%Cr を示す垂直線 (点線) を追加できる。



Fe-Cr 2元系 500°Cにおける
組成・自由エネルギー曲線図

4-1 節において 1 点計算した結果値と比較できる。

- A点 Cr の化学ポテンシャル値
- B点 Fe の化学ポテンシャル値
- C点 40 mol%Cr における Bcc 相の自由エネルギー値


平衡計算結果値は Bcc 相の線上でないことを確認できる

- D点 相分離した Bcc 相の Fe 側の Cr 濃度値
- E点 相分離した Bcc 相の Cr 側の Cr 濃度値

4-4 横軸を Fe 量に変更する方法

は2通りあります。

4-2 節からの操作を説明します。

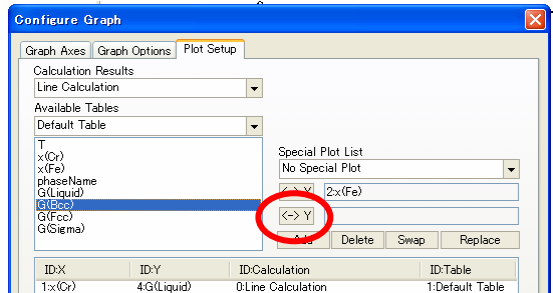
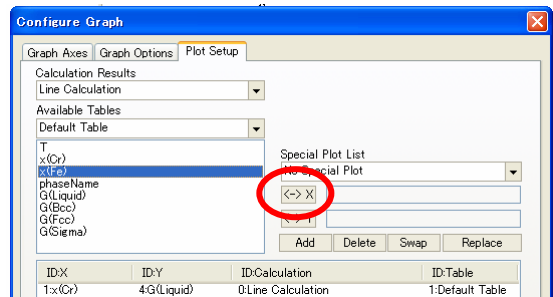
4-4-1 ツールバーから  をクリックします。

もしくはメニューから、

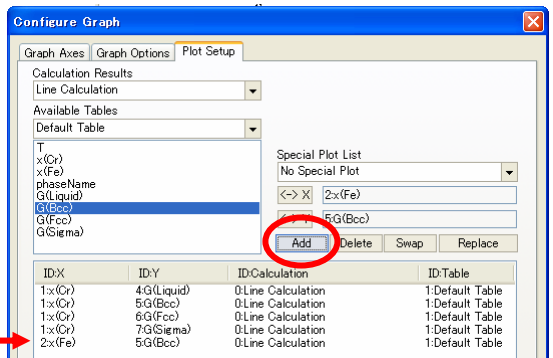
Graph、Configure graph を選択します。

さらに「Plot Setup」タグを選択します。

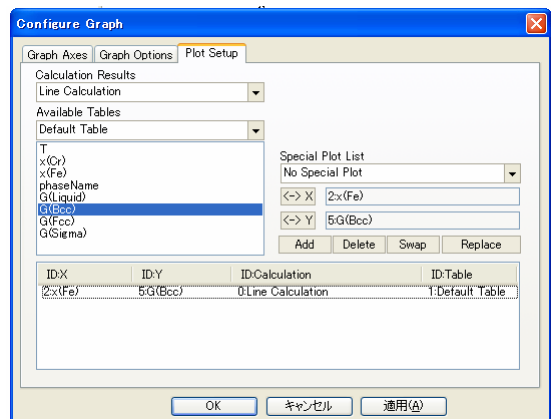
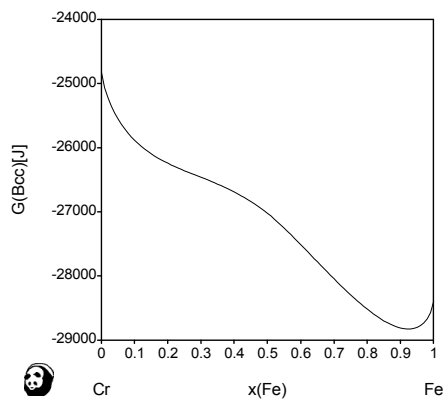
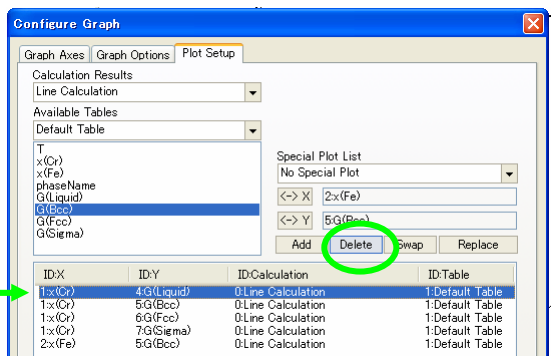
Table から $x(\text{Fe})$ を選択し、
 中央の $\rightarrow X$ ボタンをクリックします。
 次に、Table から $G(\text{Bcc})$ を選択し、
 中央の $\rightarrow Y$ ボタンをクリックします。
 図表示したい X 値と Y 値を選んだので
 「Add」 ボタンをクリックします。



以上の操作により、図表示される線が
 追加されました。しかし、このままでは
 横軸の変数が混在しているので、 $x(\text{Cr})$ の
 4本の線を削除します。



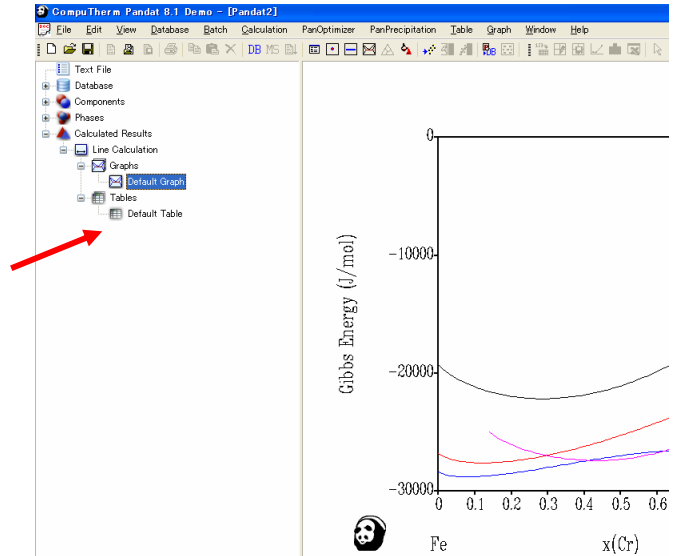
図表示される線を選択し、
 「Delete」 ボタンをクリックします。
 選択した線が削除されます。この
 操作を繰り返し、横軸が $x(\text{Cr})$ の線を
 全て削除します。
 最後に OK ボタンをクリックすることで、
 横軸が Fe のモルフラクション、縦軸
 が Bcc 相の自由エネルギー線を得られます。



4-4-2 横軸を Fe 量に変更する方法 2

画面左側の Tables
Default Table
をクリックすると数値表
が表示されます。

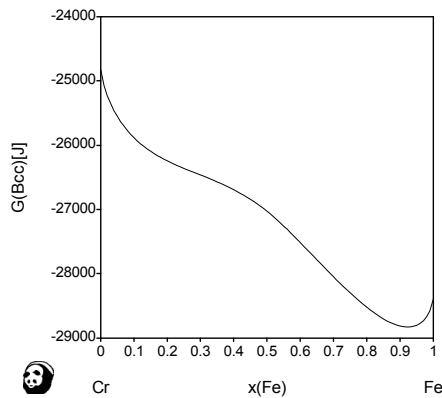
x(Fe) をクリックすると、列が選択
され、列の背景色が青色になります。
Ctrl を押しながら G(Bcc)を
をクリックします。
2列を選択できます。



T	x(Cr)	x(Fe)	phaseName	G(Liquid)	G(Bcc)	G(Fcc)
500.00	1.0000e-020	1.000000	Liquid	-19292.81		
500.00	0.010000	0.990000	Liquid	-19646.18		
500.00	0.020000	0.980000	Liquid	-19907.92		
500.00	0.030000	0.970000	Liquid	-20133.48		
500.00	0.040000	0.960000	Liquid	-20334.65		
500.00	0.050000	0.950000	Liquid	-20517.02		
500.00	0.060000	0.940000	Liquid	-20683.90		
500.00	0.070000	0.930000	Liquid	-20837.44		
500.00	0.080000	0.920000	Liquid	-20979.20		
500.00	0.090000	0.910000	Liquid	-21110.32		
500.00	0.100000	0.900000	Liquid	-21231.69		
500.00	0.110000	0.890000	Liquid	-21344.03		
500.00	0.120000	0.880000	Liquid	-21447.91		

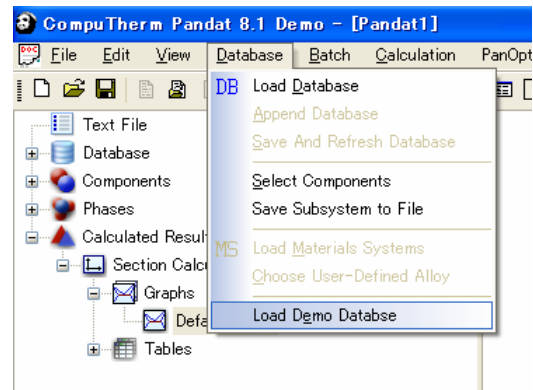
メニューから
Table

Create Graph
を選択すると
横軸 Fe 量の図に
なります。





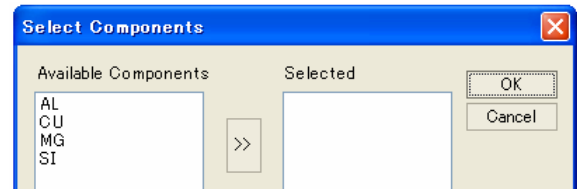
5. Al-Cu-Mg 3 元系等温断面図


5-1 メニューから Database 、
Load Demo Database を選択します。




5-2 元素を選択する画面が表示されます。

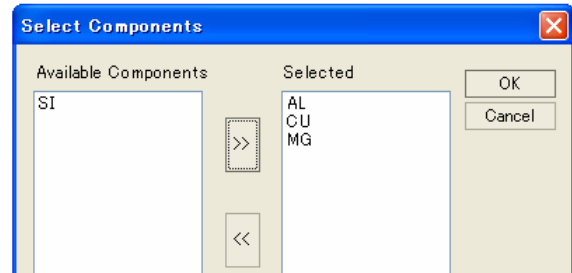
データファイルに含まれている元素が
左側に表示されます。
右側には選択した元素が表示されます。
たとえば、Al 元素を選択し、
中央の  ボタンをクリックします。
続いて Cu, Mg 元素を選択し、
 ボタンをクリックします。




選択を解除するには  ボタンを
利用します。

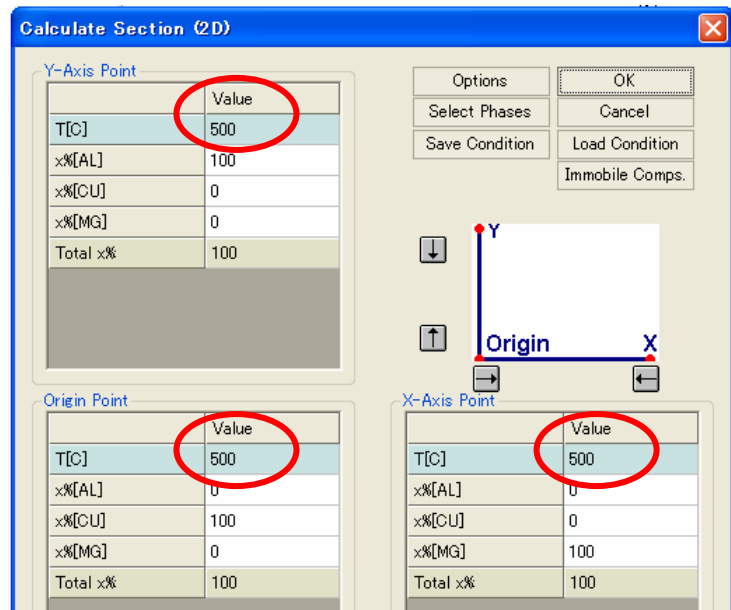
 ボタンをクリックします。

ここでは3つの元素を選択すること
にします。

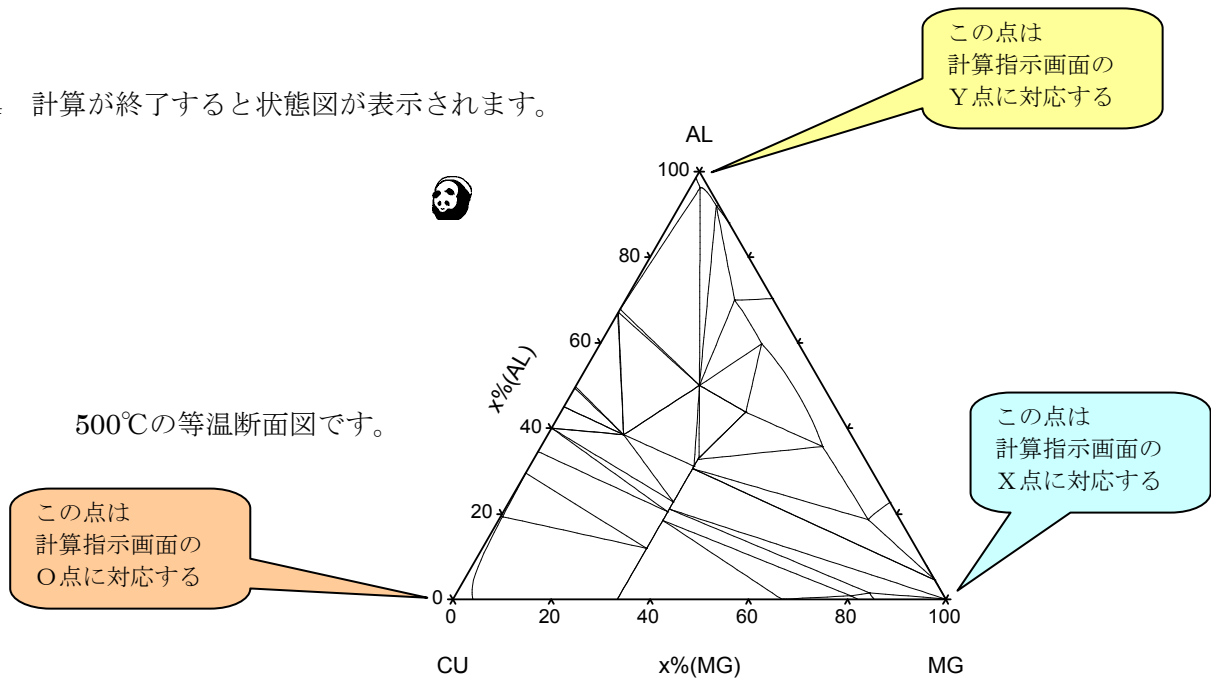


5-3 ツールバーのアイコン  を
クリックします。
もしくはメニューから
Calculation、Section(2D)
を選択します。

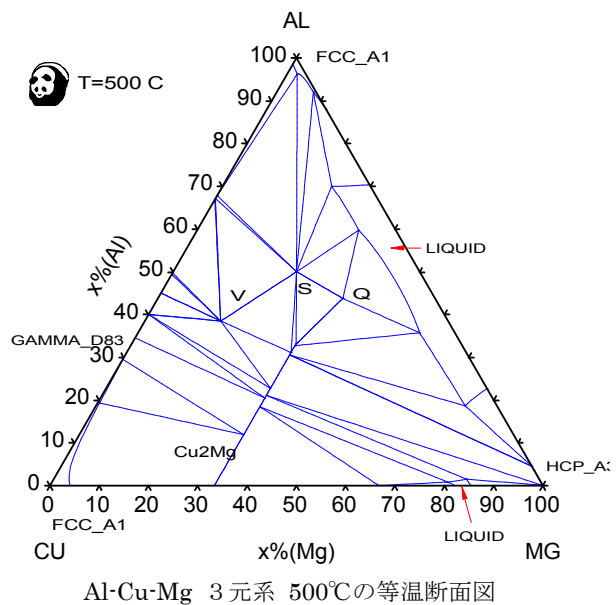
500°Cの等温断面図
の場合、このまま
OKボタンをクリック
します。
計算が開始されます。



5-4 計算が終了すると状態図が表示されます。

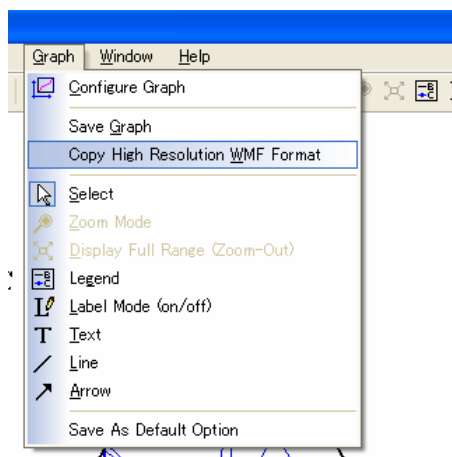


相名を付ける



タイラインは、①メニューから Graph、Configure Graph を選択する。② Plot Setup タグ画面の右側 Special Plot List から Tie-Lines を選択する。③ Add ボタンをクリックする。④ 適用ボタンをクリックする。 の操作で表示できます。

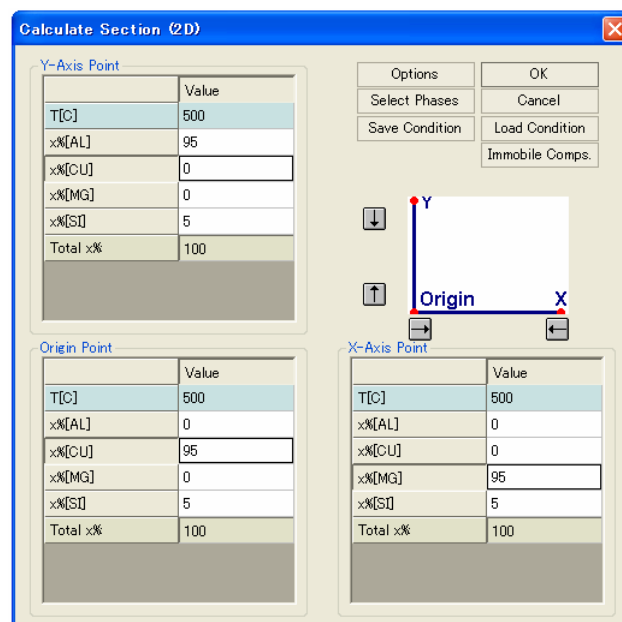
図を Word に貼り付けるには、メニュー Graph から Copy WMF Format を選択するとよい。



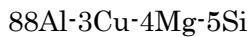
6. 5mol%Si 固定

Al-Cu-Mg-5%Si 4元系等温断面図

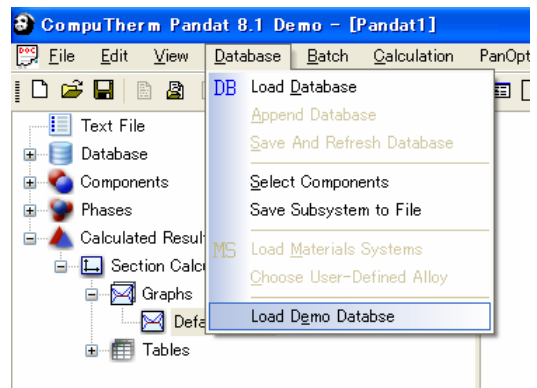
の計算指示画面は右図のように
セットします。



7. 組成値を固定し温度を変える



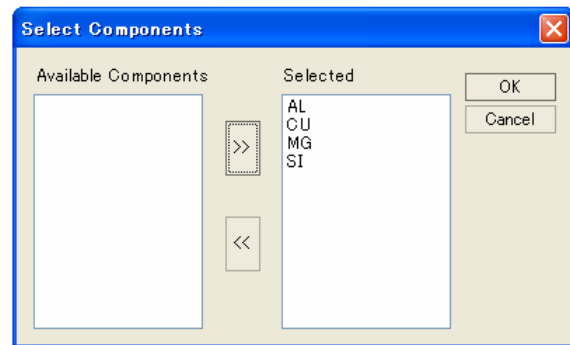
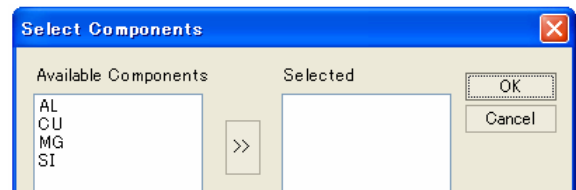
7-1 メニューから Database 、
Load Demo Database を選択します。




7-2 元素を選択する画面が表示されます。

Al, Cu, Mg, Si を右側に移動させます。

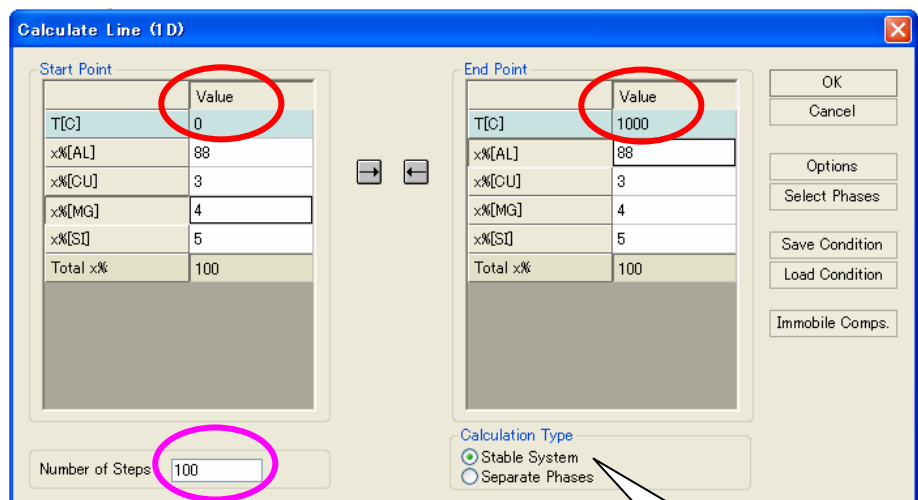
ボタンをクリックします。



7-3 ツールバーのアイコン  をクリックします。もしくはメニュー Calculation、Line (1D)

左側と右側の合金組成値を同じにし値を入力します。 88Al-3Cu-4Mg-5mol%Si

左側の温度を 0 °C、右側の温度を 1000 °C と入力します。 (逆に 1000 と 0 でも良い)



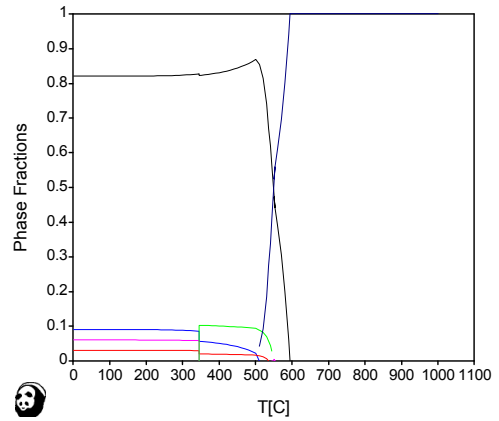
10°C刻みで計算させるために、ステップ数を 100 と入力します。

平衡計算をする場合は
Stable を指示します

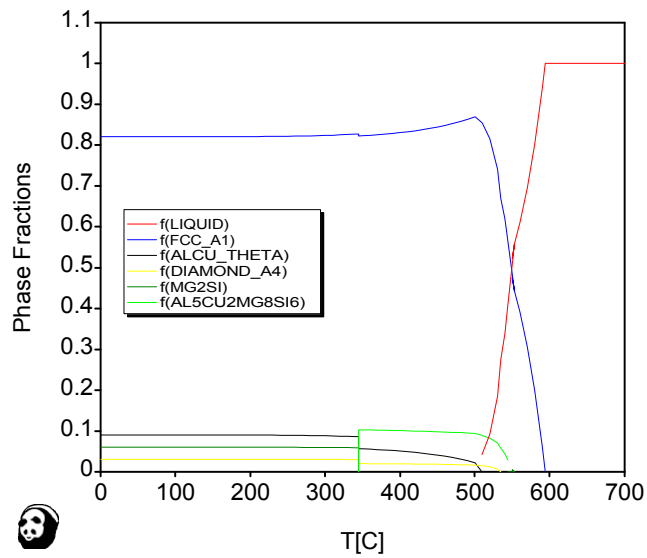
OK ボタンをクリックすると計算開始。

7-4 計算結果

この図から、合金の融点は 600°C 付近、初晶の量が徐々に増える、固相線温度は 500°C 付近、600°C 以下で多くの相が晶出もしくは析出する。ことがわかる。



Legend (凡例) を表示し、線の色を調整し、温度範囲を 700°C 以下にすると下図を得る。



88Al-3Cu-4Mg-5mol%Si 合金の平衡相量の温度変化

数値表は左側の窓から、Tables を選択することで得られます。

T	x[AL]	x[CU]	x[MG]	x[SI]	phaseName
490.00	88.00000	3.00000	4.00000	5.00000	FCC_A1+ALCU_THETA+DIAMOND_A4
500.00	88.00000	3.00000	4.00000	5.00000	FCC_A1+ALCU_THETA+DIAMOND_A4
509.25	88.00000	3.00000	4.00000	5.00000	FCC_A1+DIAMOND_A4+AL5CU2MG8SI6
510.00	88.00000	3.00000	4.00000	5.00000	FCC_A1+DIAMOND_A4+AL5CU2MG8SI6
520.00	88.00000	3.00000	4.00000	5.00000	FCC_A1+DIAMOND_A4+AL5CU2MG8SI6
530.00	88.00000	3.00000	4.00000	5.00000	FCC_A1+DIAMOND_A4+AL5CU2MG8SI6
534.74	88.00000	3.00000	4.00000	5.00000	FCC_A1+DIAMOND_A4+AL5CU2MG8SI6
540.00	88.00000	3.00000	4.00000	5.00000	FCC_A1+AL5CU2MG8SI6+LIQUID
543.99	88.00000	3.00000	4.00000	5.00000	FCC_A1+AL5CU2MG8SI6+LIQUID
552.73	88.00000	3.00000	4.00000	5.00000	FCC_A1+LIQUID+MG2SI
560.00	88.00000	3.00000	4.00000	5.00000	FCC_A1+LIQUID+MG2SI
562.73	88.00000	3.00000	4.00000	5.00000	FCC_A1+LIQUID+MG2SI
660.00	88.00000	3.00000	4.00000	5.00000	FCC_A1+LIQUID

f(LIQUID)
液相のモル比率量

以上