

Pandat

多元系状態図計算ソフトウェア

Version 8.2

ユーザーズガイド



株式会社材料設計技術研究所

目次

1.	システム概要	2
2.	インストール	4
3.	まず使ってみよう	7
	Ag-Cu	
	Cr-Fe, C-Fe	
	Nb-Si-Ti	
4.	計算機能 1点計算	25
5.	計算機能 ライン計算	27
	組成-自由エネルギー曲線	30
6.	計算機能 状態図	32
6. 1	2元系状態図	32
6. 2	等温断面図	33
6. 3	縦断面図	34
7.	計算機能 液相面図	42
8.	計算機能 凝固計算	47
9.	単位の設定	49
10.	ファイル操作	50
11.	バッチ機能	51
12.	テーブル機能	61
13.	グラフ機能	70
13. 1	グラフオプション	70
13. 2	ラベルモード	73
13. 3	ズームモード	75
13. 4	グラフコピー	76
13. 5	グラフの保存	77
14.	お勧めの操作方法	78
14. 1	まず単位設定	78
14. 2	相境界線を青色にする方法	80
14. 3	軸の単位をモル比率から重量比率に変える方法	80
14. 4	計算状態図上に印を付ける方法	84
14. 5	テーブル値をコピーする方法	87
14. 6	正三角形の図を表示させる方法	88
14. 7	相の重量分率値の表示方法	90
14. 8	準安定相の取り扱い方法	96
15.	データベースの例	103
	Append Database	106
16.	メニュー一覧	109
17.	平衡計算モデル	110
18.	バッチファイルPBFの例	111
	問合せ先	115

1. システム概要

多元系状態図計算ソフトウェア Pandat は、熱力学データベースファイルを読み込み、平衡計算を行ない、各種状態図を作成します。本ソフトウェアは「パンダ」と呼び、米国 CompuTherm LLC 社が開発しています。本ソフトウェアは、米国 Wisconsin-Madison 大学の Y.Austin Chang 教授らのグループにより 1980 年代から開発され、現在も CompuTherm LLC 社により改良されています。

ソフトウェアは、Windows 2000/ XP/ Vista / 7 で稼動します。

HDは 100MB でインストール可能です。メモリー量の大きいパソコンがお勧めです。

本ユーザーズガイドでは、ソフトウェアの操作方法について説明します。

ソフトウェアの主な機能は以下の通りです。

- 1 点平衡計算
- ライン平衡計算
- 2 元系状態図計算
- 多元系等温断面図計算
- 多元系縦断面図計算
- 多元系液相面図計算
- 凝固計算 (Scheil モデルによる固相率計算)

ソフトウェア操作の観点からそれぞれの機能に関して各章で説明します。

製品版では取り扱える元素数に制限はありません。

ソフトウェアは、TDBファイル形式をサポートしています。TC,BMAGN など磁気パラメータもサポートしています。しかし、独自のパラメータを追加している所もあり、以下のパラメータを現在サポートしていません。

- ・ LIST_OF_REFERENCES 句

デモ版では2元系の各種2元系状態図を計算できます。さらに、Al-Cu-Mg-Si 4元素の熱力学データベースがPDBファイル形式で内蔵されています。このデータはメニュー [Database]-[Load Demo Database] を利用し読み込みます。PDBファイル形式のデータは、内容を見たり変更することが出来ません。

デモ版の計算機能は製品版と同じです。ただし、パラメータ最適化モジュールはありません。

製品版を実行するためにはキー（プロテクトキー）が必要となります。

Pandat データベースファイルは暗号化されており、パラメータ値を変更することができません。このファイルは **PDB** 形式のファイルと呼ばれます。

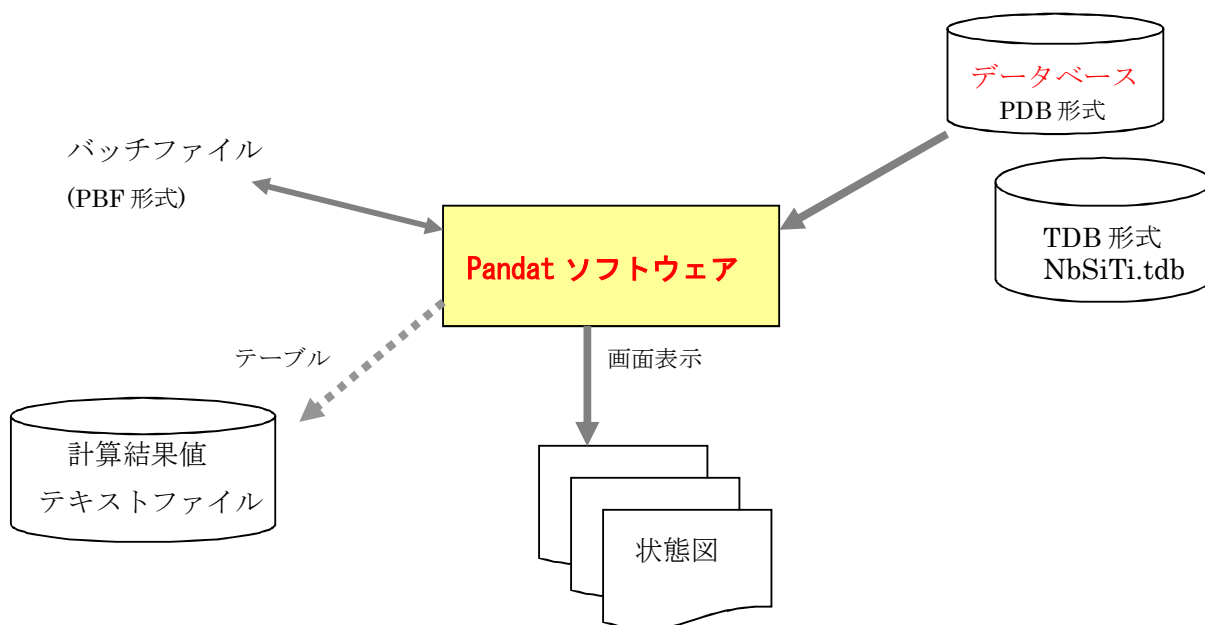
一方、文献等に公表されている **TDB** 形式のファイルを読み込むことが可能です。**TDB** 形式のファイルを別途用意すれば計算に利用できます。**TDB** 形式の場合は相互作用パラメータ値などを変更することが可能です。

バッチファイル（**PBF** ファイル）を利用すれば、画面入力した多元系合金の組成値を保存したり、計算指示入力値を保存することが出来ます。組成値を少し変えて何度も計算する場合などに便利な機能です。

計算結果図を画面表示させると同時に、テーブル機能を用いて計算結果値を常時メモリー中に保持しています。この各種数値データを見ることが出来ます。

多元系合金状態図の計算をし易いように、操作性が優先されています。このため標準の計算結果表示画面には各種熱力学データが表示されません。バージョン 8 では各種熱力学量を表示させるためにテーブル機能が強化されました。テーブル機能を利用して各種熱力学量を取り出せます。

ソフトウェアは、正則溶体モデルを用いて **CALPHAD** 法により各種状態図を計算します。



Pandat の特長は、1) 相分離を自動的に検出すること。最安定平衡点を求めているので利用者の平衡に関する推測が計算に入らないようにしている。2) 操作コマンドが不要でありコマンドを覚える必要がないこと。ボタンのクリックと値入力だけで計算ができるように配慮されている。3) 状態図計算をする際に計算初期点を与える必要がないこと。システムは計算範囲内の 200 点を計算し、これらの平衡点をもとに状態図（相境界）を計算する。4) 計算範囲の全ての相境界を網羅することである。

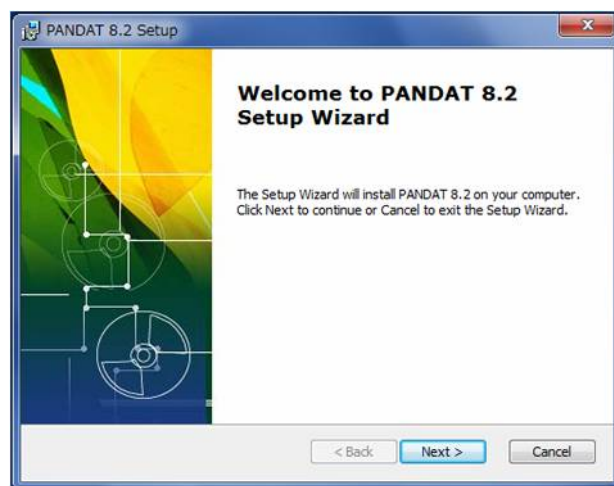
Pandat 8 インストール

古いバージョンの Pandat が既にインストールされている場合、今回インストールされる場所が前回と異なるため、古いバージョンをアンインストールする必要はありません。

Pandat はコピー防止のために USB ドングルを使用しています。Pandat ソフトウェアを複数台の PC にインストールすることはできますが、動作するのはその時点でドングルが装着されている 1 台の PC のみです。

2-1 ドングル (プロテクト・キー) は外しておきます。

インストールCDをセットします。autorun しないため、CD中の pandat_8_2_setup.exe を実行します。



2-2 PANDAT 8.2 Setup Wizard が起動し、Welcome 画面になります。

ボタン

2-3 Read me file 画面になります。

ボタン

2-4 License Agreement 画面になります。

ラジオボタンが最初 I do not accept になっています。承認される場合、I accept を選択してください。

ボタン

2-5 Installation Folder 画面になります。

標準の場所であれば Next ボタンをクリックしてください。

希望の場所にインストールしたい場合は Browse... ボタンをクリックしてください。

標準場所：

C:\Program Files\CompuThermLLC\PANDAT 8.2

ボタン

2-6 Ready to Install 画面になります。

インストール確認画面です。

ボタン

2-7 インストール処理実行

Windows7 では許可が求められます。

「ユーザーアカウント制御

コンピュータへの変更を許可しますか？」

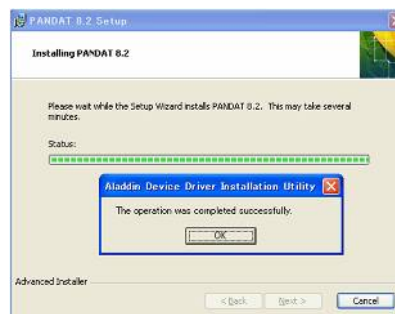
ボタン

2-8 プロテクト用ソフト HASP Device Driver

を初めてコンピュータに導入される場合

右画面が表示されます。

ボタン



2-9 Completing 画面になります。

ボタン



2-10 ドングルをUSBポートに装着します。

ドングルはプロテクト・キーに相当しドングルを装着しないとソフトウェアは起動しません。また、計算途中でこれを外すと計算を続行できません。



2-11 CD中の database フォルダ内にある Binary フォルダの全てをソフトウェアインストール先の

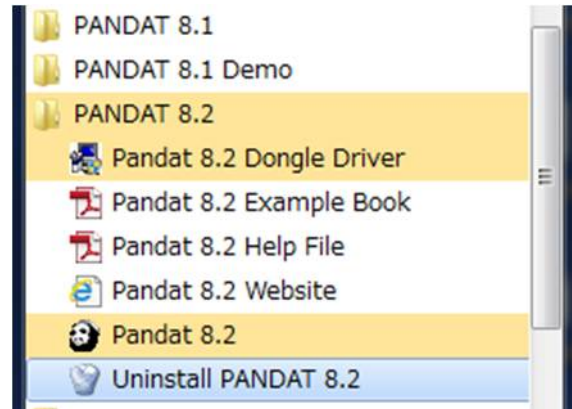
C:\Program Files\CompuThermLLC\Pandat 8.2\Database

にコピーします。もしくはPC上の適当なフォルダにコピーします。

有料DBを導入された場合、PanFe.pdbなどをPC上の適当なフォルダにコピーします。

アンインストール

Pandat 8.2 をアンインストールするには、
「スタート」 → 「すべてのプログラム」 → 「Pandat 8.2」の「Uninstall Pandat 8.2」を選択します。 計算を一度も実行していない場合にはインストール先の Pandat 8.2 フォルダー全てが削除されます。

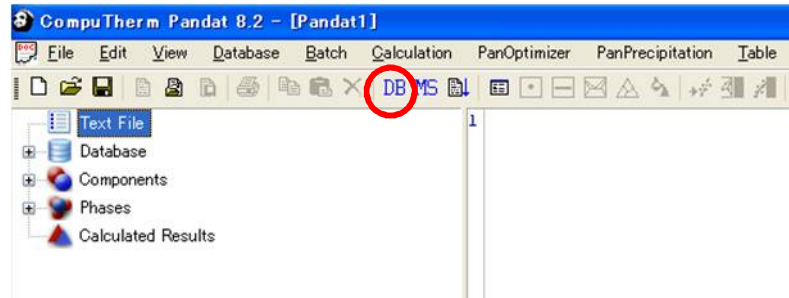


3. まず使ってみよう

3-1 ソフトウェアを起動しましょう。

「スタート」 → 「プログラム」 → 「Pandat 8.2」 → 「Pandat 8.2」 を選択します。

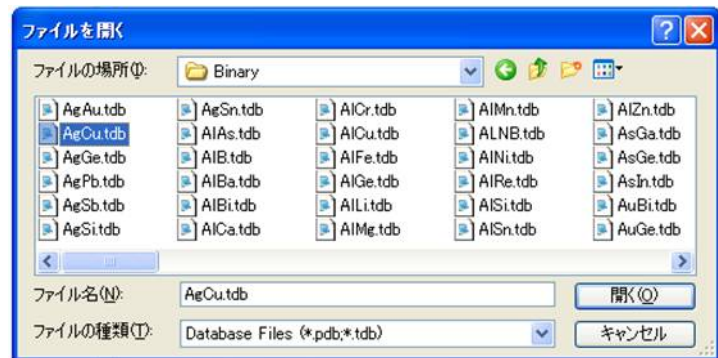
3-2 DBアイコンを選択します。



標準インストールした場所

C:\Program Files\CompuThermLLC\Pandat8.2\Database\Binary

に格納されている AgCu.tdb ファイルを選択します。

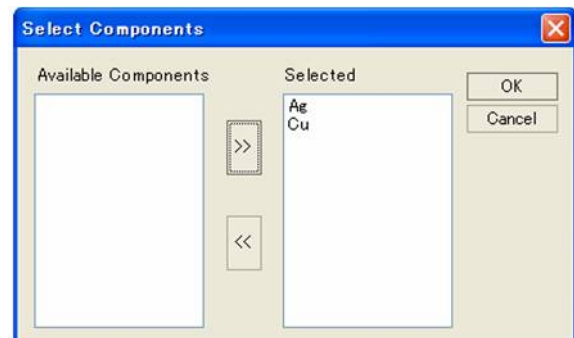
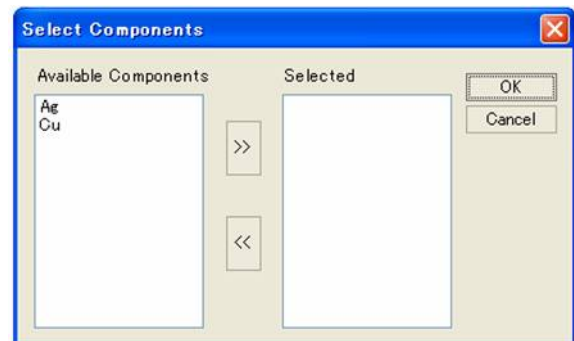


3-3 元素を選択する画面が表示されます。

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、右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、**Ag** 元素を選択し、中央の **>>** ボタンをクリックします。続いて **Cu** 元素を選択し、**>>** ボタンをクリックします。

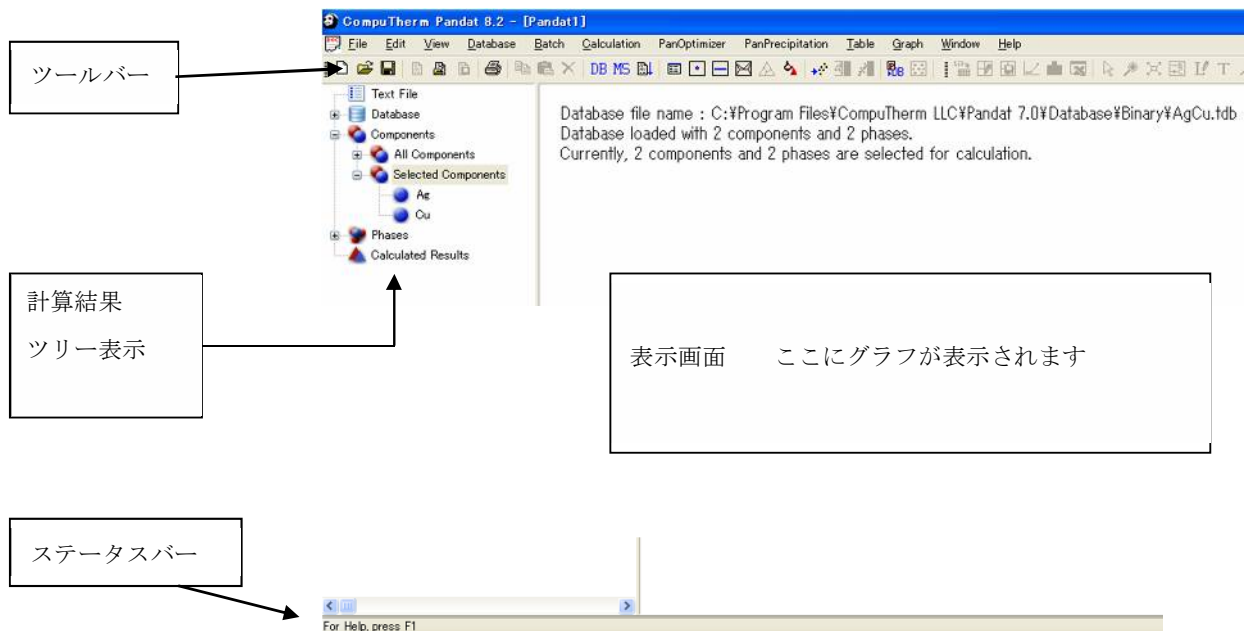
選択を解除するには **<<** ボタンを利用します。



OK ボタンをクリックします。

ここでは Ag と Cu の 2 元素を選択することにします。

3-4 起動初画面



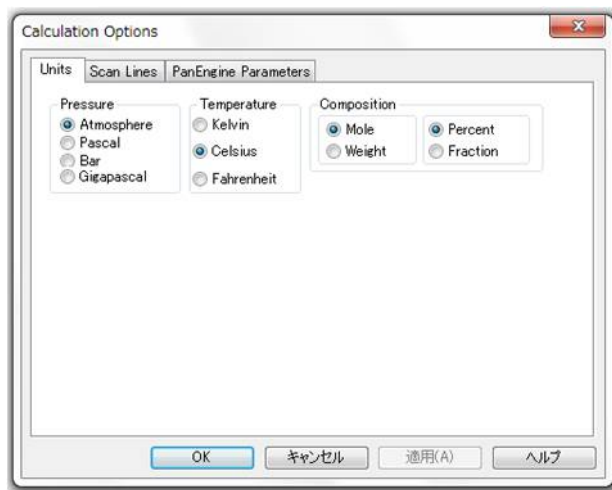
注：ツールバー欄 全てのアイコンが常にクリックできる状態にはありません。
操作手順に従い、利用できるアイコンのみアクティブにしています。

注：ソフトウェアの重要な決め事

モル組成は X と記号 1 文字にて示されます。X はモル組成を意味します。
重量組成は W と記号 1 文字にて示されます。W は重量組成を意味します。
状態図の横軸タイトルにこの X や W の文字が表示されます。
状態図を見て単位を把握できます。

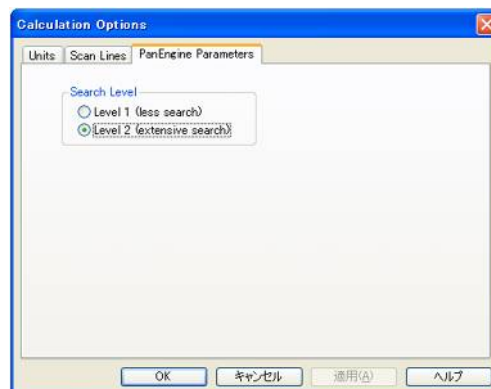
3-5 単位の設定

メニューから
「Calculation」 → 「Options」
を選択します。

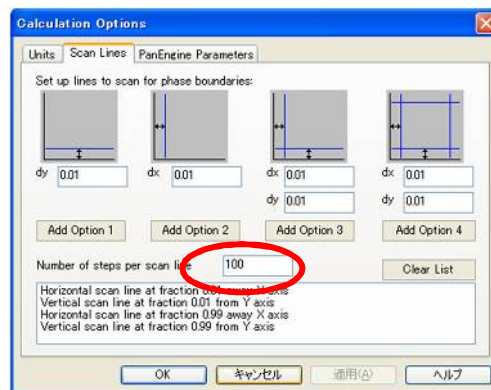


ここでは計算に用いる「圧力」「温度」「組成」「比率」単位を指示します。
ガス相を含まない金属合金系の場合、圧力は1気圧とされます。
温度はKか°Cか、組成はモル組成か重量組成か、値は%値かフラクション値か
指示できます。


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



最後に、スキャンライン・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。

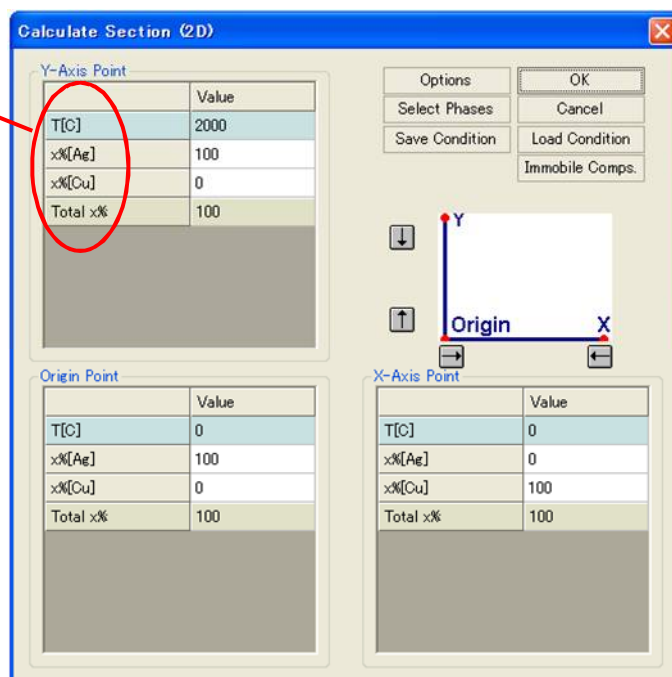


3-6 Ag-Cu 2元系状態図を計算してみましょう。

- ① ツールバーのアイコン  をクリックします。

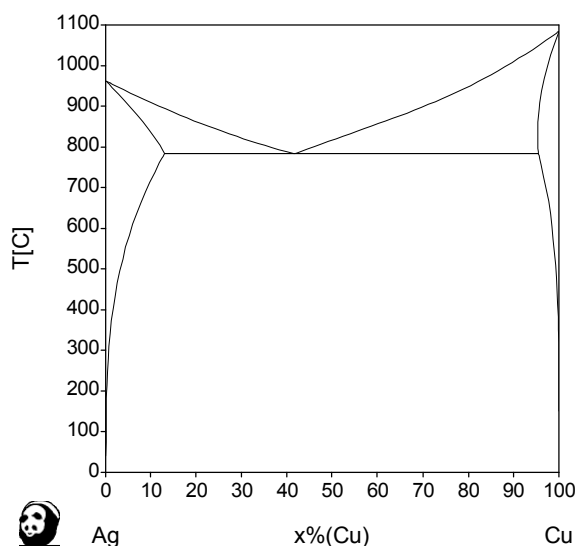
右図は
温度単位が°C、
組成単位がモル%
と指示された
場合の表示です。

単位を変更すれば
この画面の単位表示も
自動的に変わります。




- ② 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 計算が終了すると2元系状態図が表示されます。

Y軸タイトル: T[C]
X軸タイトル: X%(Cu)
X軸値範囲
0 ~ 100 mole %



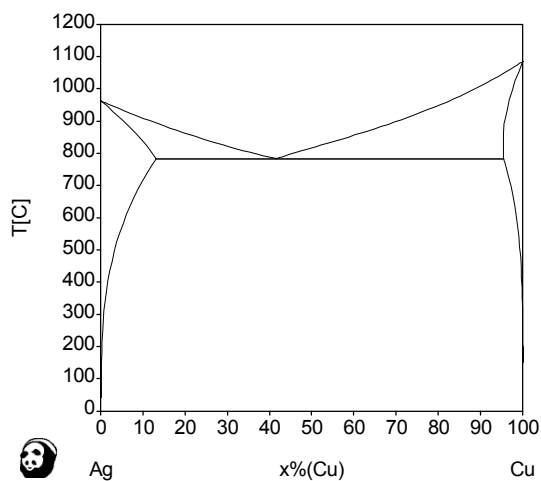
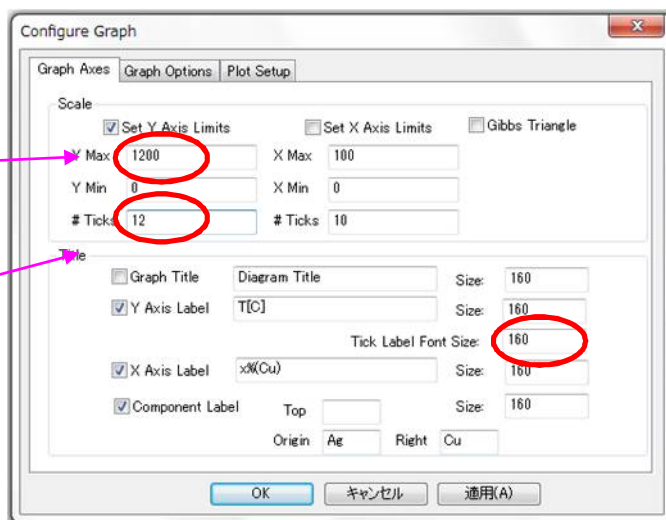
Ag-Cu 2元系の状態図の計算はこれだけの操作です。


Ag 元素を主とする Fcc 固溶体相と、Cu 元素を主とする Fcc 固溶体相
が相分離の形で平衡する共晶型でも、最安定相を簡単に計算できます。

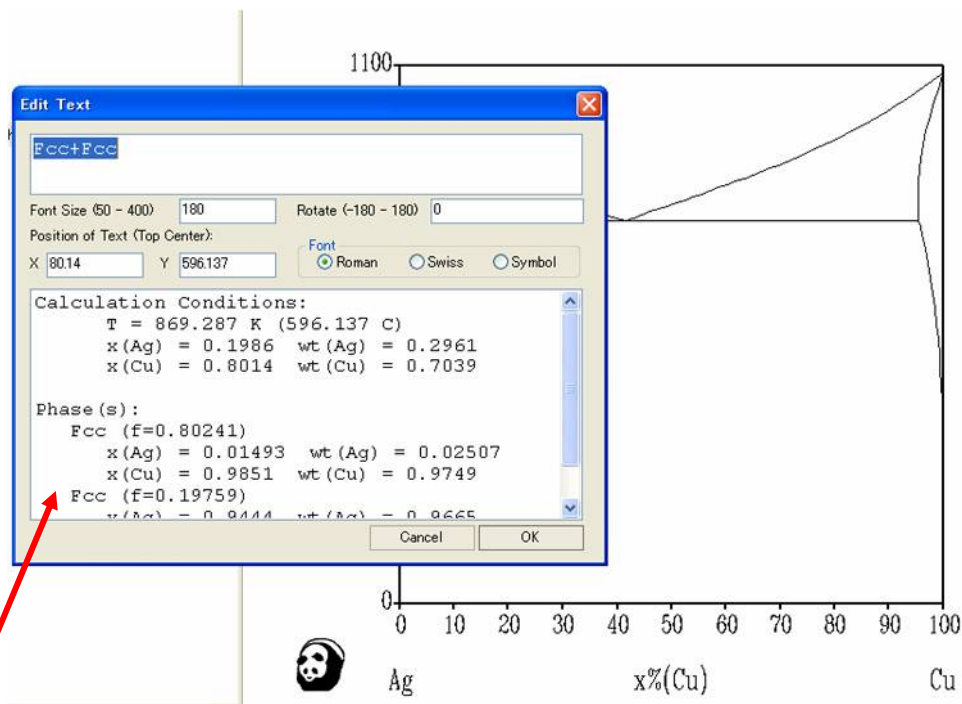
- ④ 表示範囲を変更するには、図上を1度クリック後、アイコン  をクリックします。
Configure Graph 画面が表示されます。この画面には3つのサブ画面があります。

タグ名	機能
[Graph Axis]	表示範囲の指定。 軸値のきざみ幅の指定。 図のタイトル、X軸とY軸のタイトルの指定。 タイトルのサイズ指定。 三角図表示(Gibbs Triangle)の指定。
[Graph Options]	線色の指定。 線幅太さの指定。
[Plot Setup]	表示する変数の選択。 タイライン(共役線)表示の指定。


例えばY軸を
1200
12 分割
等に変更できます。



- ⑤ 相名（ラベル）を表示させるためにはアイコン  をクリックします。マウス形状が+印になります。たとえば、600°C、80x%(Cu) の位置付近で左クリックすると、平衡相名 **Fcc+Fcc** が **Edit Text** 画面上に表示されます。OKボタンをクリックすると画面図上に相の名前が表示されます。



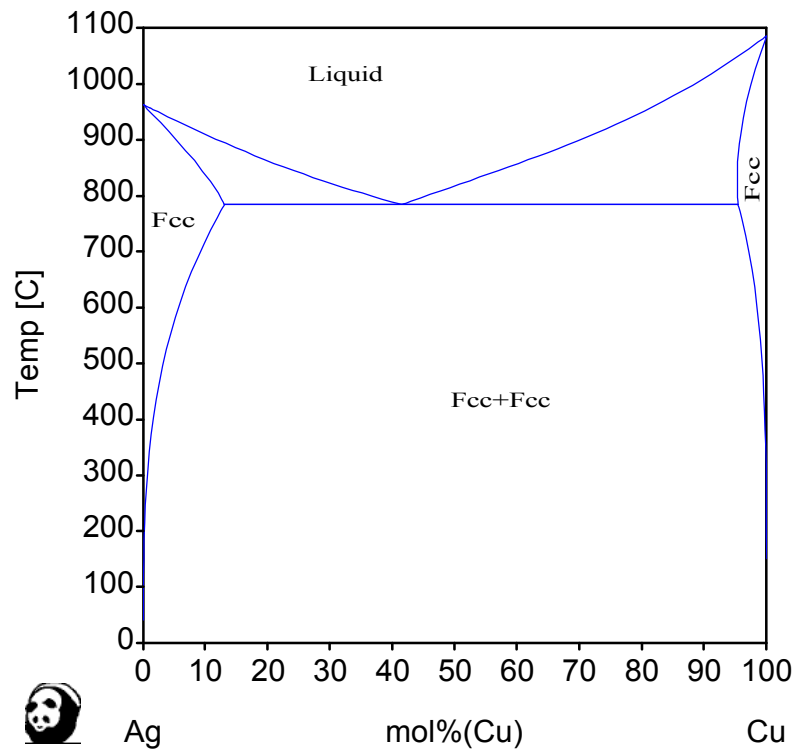
平衡相の名前だけでなく、その相の存在率、その相中の構成元素比率をすぐに確認できます。

表示位置を変更するには、アイコン  を選択後に、そのラベルを選択してドラッグ移動させます。

Edit Text 画面にてテキストを変更できます。名前を（たとえば 液相の場合、テキストを **Liq** や **L** などに省略できます）変更する場合、ラベルを選択してダブルクリックします。

- ⑥ 図を PowerPoint 等に貼り付ける方法
「Graph」メニューから「Copy High Resolution WMF Format」を選択します。
その後、PowerPoint 等にてペーストできます。

形式を選択して貼り付け、Windows メタファイル

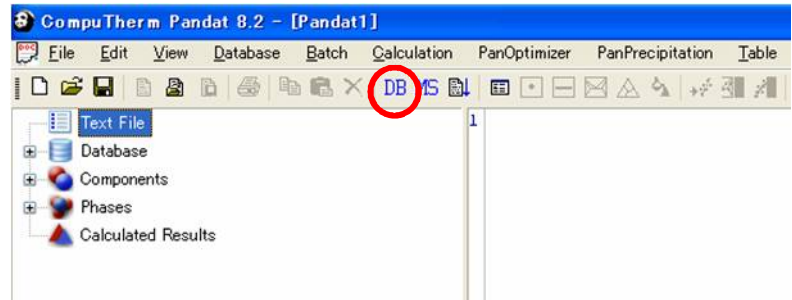


以上が 2 元系状態図計算の操作とそれに付帯した操作の簡単な例です。

次に Cr-Fe 2 元系状態図を計算してみましょう。

3-7 Cr-Fe 2元系状態図

- ① DBアイコンを選択します。

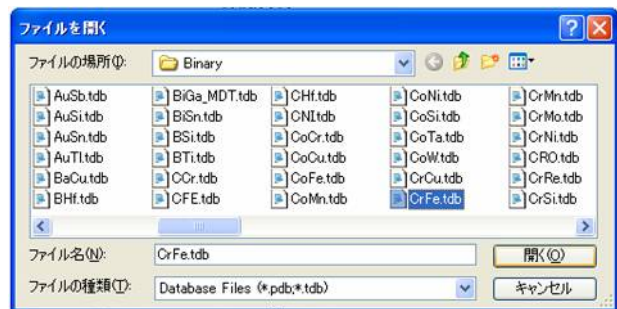


標準インストールした場所

C:\Program Files\CompuThermLLC\Pandat8.2\Database\Binary

に格納されている

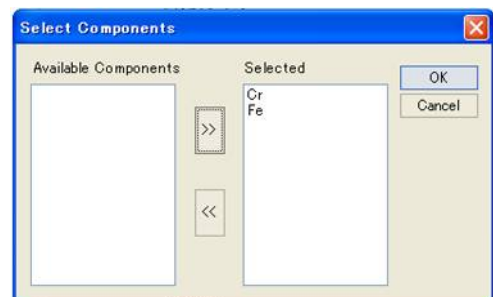
CrFe.tdb ファイルを選択します。




- ② 元素を選択する画面が表示されます。

ここでは Cr と Fe の2元素を選択します。

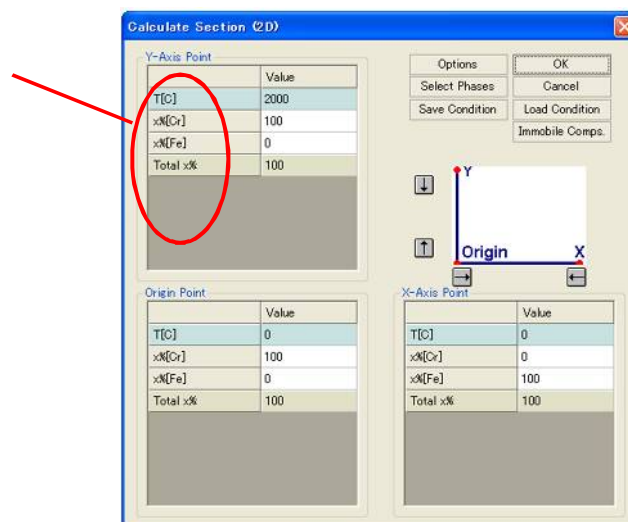
OK ボタンをクリックします。



- ③ ツールバーのアイコン  をクリックします。

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。

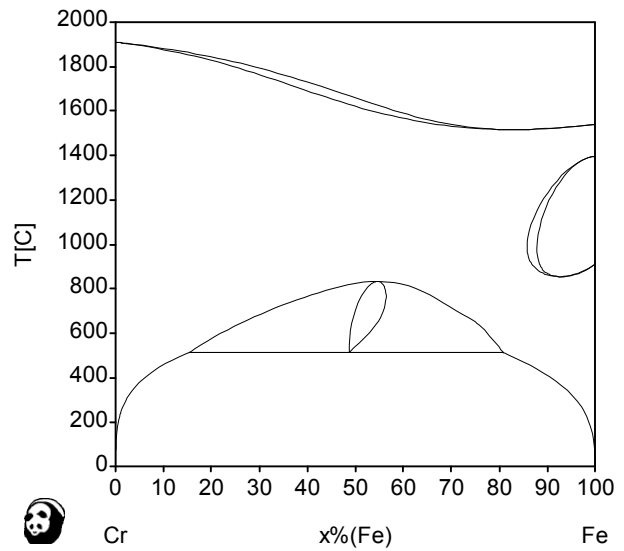
単位を変更すれば
この画面の単位表示も
自動的に変わります。



- 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。

⑤ 計算が終了すると2元系状態図が表示されます

Y軸タイトル: T[C]
 X軸タイトル: X%(Fe)
 X軸値範囲
 0 ~ 100 mole %



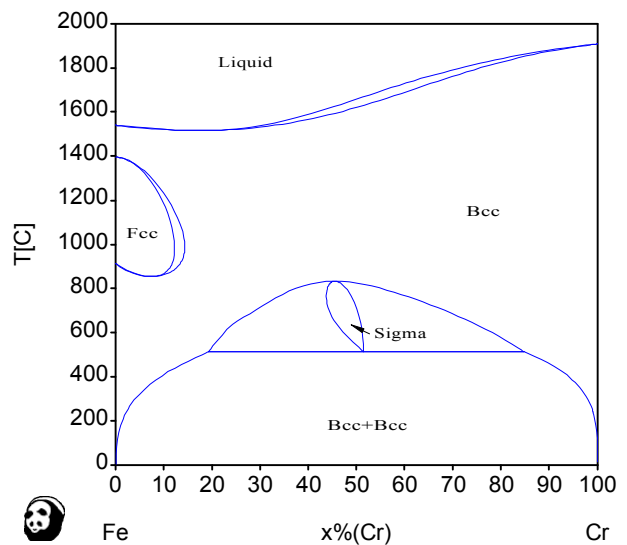
Cr-Fe 2元系の状態図の計算はこれだけの操作です。

横軸が Fe になるのは、計算指示画面③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、計算後でも横軸濃度 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。



3-8 Fe-C 2元系状態図

CFe.tdb ファイルを選択します。

C と Fe の 2 元素を選択します。

単位を重量%とします。

メニューCalculation より

Section(2D)を選択し

状態図を計算します。

全ての相を計算対象にしたので

Graphite 相が出ます。

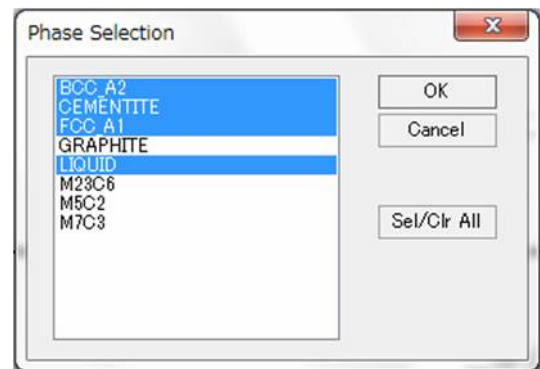
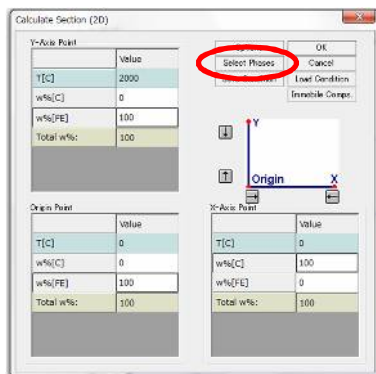
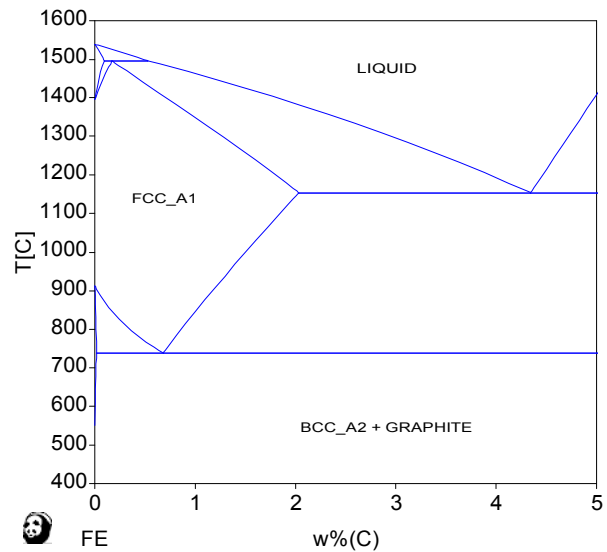
Graphite 相を計算から除外

してみましょう。

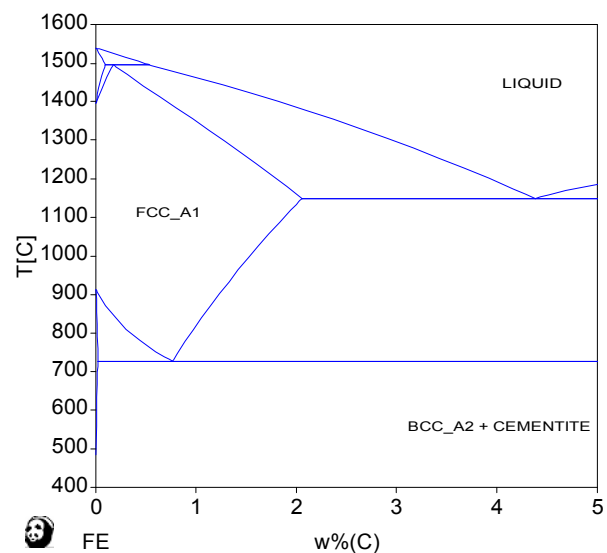
計算指示画面にて

Select Phases ボタンをクリックします。

相名をクリックすることで「選択」「除外」の指示をします。「選択」した相の背景色は青色です。ここでは Bcc,Cementite,Fcc,Liquid の 4 つの相を選択してみます。



4 つの相を用いて再度計算すると
Cementite 相の状態図が得られます。



3-9 Fe-C 2元系におけるオーステナイト中の炭素活量

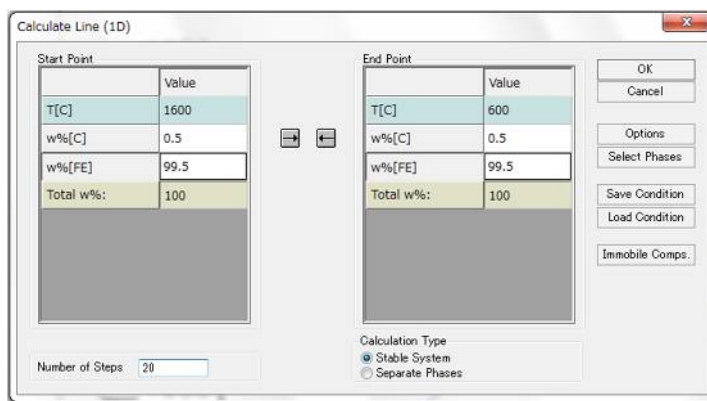
CFe.tdb ファイルを選択します。

C と Fe の2元素を選択します。

単位を重量%とします。

メニューCalculation より

Line (1D) を選択します。



0.5wt%C 濃度固定

温度を 1600°C から 600°C まで

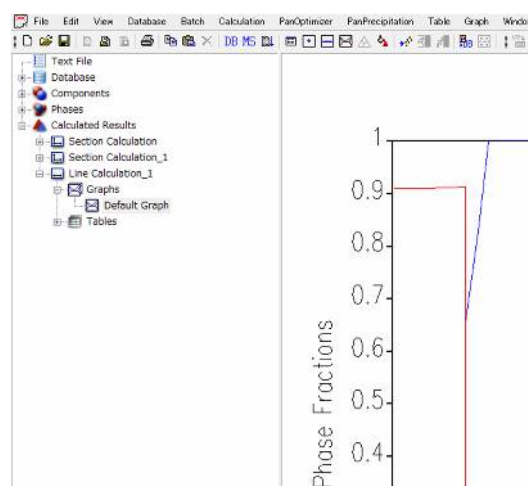
20 点 (50°C きざみ) を平衡計算するように指示・値入力します。

OK ボタンをクリックすると計算開始、

右図のように図が表示されます。

この図は平衡相の比率を示したもので
活量を示していません。

活量値を得るためにはテーブル機能を利用します。



まず、左窓より Default table

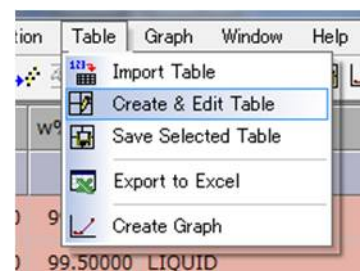
をクリックし数値表を表示させます。

	T	w%[C]	w%[FE]	phaseName
C				
1	1600.00	0.500000	99.500000	LIQUID
2	1550.00	0.500000	99.500000	LIQUID
3	1500.00	0.500000	99.500000	LIQUID
4	1435.34	0.500000	99.500000	LIQUID+FCC_A1
5	1400.00	0.500000	99.500000	FCC_A1
6	1350.00	0.500000	99.500000	FCC_A1
7	1300.00	0.500000	99.500000	FCC_A1
8	1250.00	0.500000	99.500000	FCC_A1
9	1200.00	0.500000	99.500000	FCC_A1
10	1150.00	0.500000	99.500000	FCC_A1
11	1100.00	0.500000	99.500000	FCC_A1
12	1050.00	0.500000	99.500000	FCC_A1
13	1000.00	0.500000	99.500000	FCC_A1
14	950.00	0.500000	99.500000	FCC_A1
15	900.00	0.500000	99.500000	FCC_A1
16	850.00	0.500000	99.500000	FCC_A1
17	800.00	0.500000	99.500000	FCC_A1
18	767.49	0.500000	99.500000	FCC_A1+BCC_A2
19	750.00	0.500000	99.500000	FCC_A1+BCC_A2
20	726.61	0.500000	99.500000	FCC_A1+BCC_A2+CEM
21	726.61	0.500000	99.500000	BCC_A2+CEMENTITTE+
22	700.00	0.500000	99.500000	BCC_A2+CEMENTITTE

するとメニュー **Table** が有効になります。

メニュー **Table** から

Create&Edit を選択します。



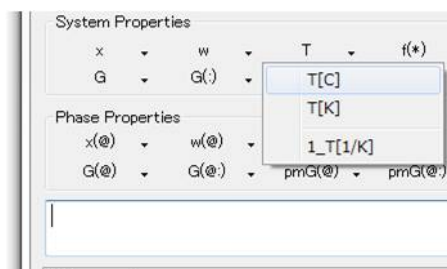
新たにテーブルを作成します。

まず、その内容を定義します。

T の部分を選択し、

プルダウンから **T[C]**

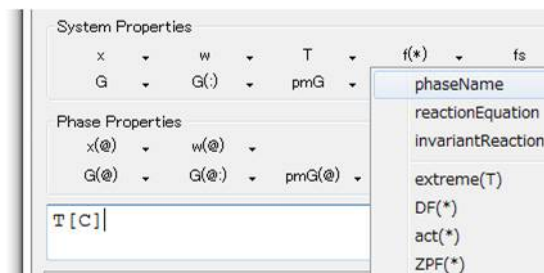
を選択します。



f(*)の部分を選択し、

プルダウンから **phaseName**

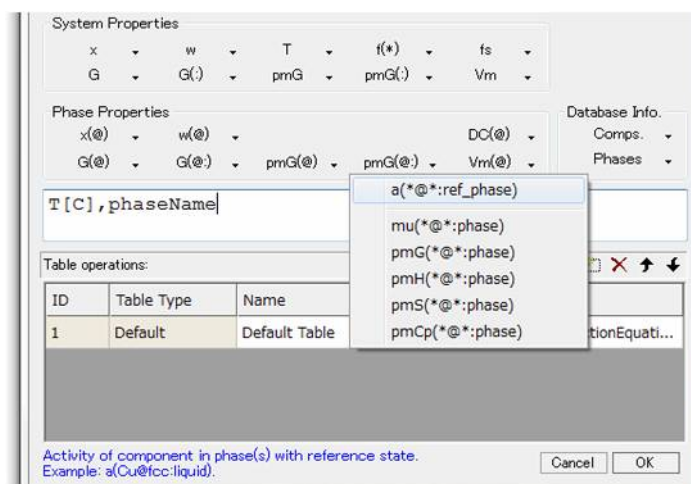
を選択します。



pmG(@:) の部分を選択し、

プルダウンから **a(*@*:ref_phas)**

を選択します。



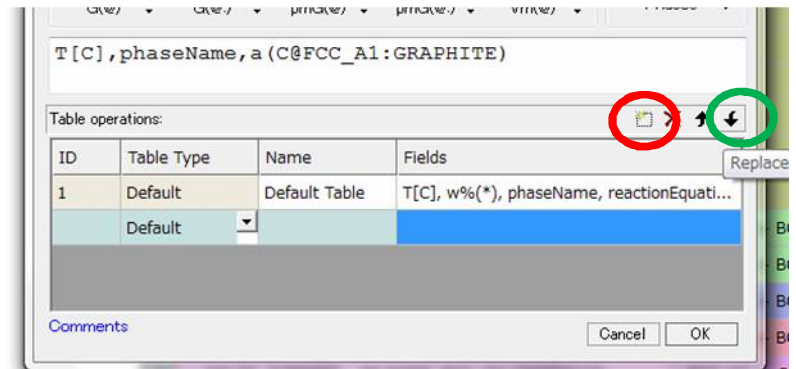
以上の操作により、中央の edit box に

T[C],phaseName, a(*@*:ref_phas)

が入ります。**Graphite 基準**のオーステナイト中の炭素の活量を得るために、3つ目を

T[C],phaseName, a(C@FCC_A1:GRAPHITE)

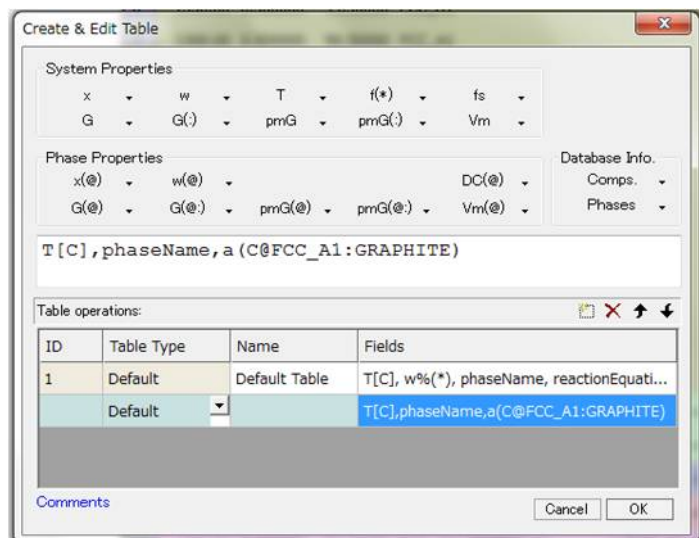
と変更します。



テーブルの内容を定義できたので、新規にテーブルを作成します。

New ボタンをクリックすると、1行が追加されます。

緑色丸印の Replace ボタンをクリックすると、Edit box の情報がテーブルの Fields 欄にコピーされます。



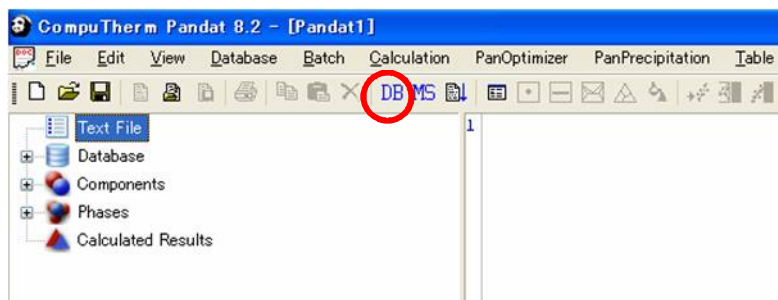
OK ボタンにより
定義したテーブル情報
が数値表にて
表示されます。

計算結果をテーブルの形に
して抽出することで
活量値が得られます。

T	phaseName	a(C@FCC_A1:GRAPHITE)
C		
1	1600.00 LIQUID	
2	1550.00 LIQUID	
3	1500.00 LIQUID	
4	1435.34 LIQUID+FCC_A1	0.079343
5	1400.00 FCC_A1	0.084726
6	1350.00 FCC_A1	0.093429
7	1300.00 FCC_A1	0.103668
8	1250.00 FCC_A1	0.115817
9	1200.00 FCC_A1	0.130367
10	1150.00 FCC_A1	0.147970
11	1100.00 FCC_A1	0.169506
12	1050.00 FCC_A1	0.196182
13	1000.00 FCC_A1	0.229676
14	950.00 FCC_A1	0.272377
15	900.00 FCC_A1	0.327745
16	850.00 FCC_A1	0.400921
17	800.00 FCC_A1	0.499731
18	767.49 FCC_A1+BCC_A2	0.583273
19	750.00 FCC_A1+BCC_A2	0.803269
20	726.61 FCC_A1+BCC_A2+CEMENTITE	1.23078
21	726.61 BCC_A2+CEMENTITE+FCC_A1	1.23078
22	700.00 BCC_A2+CEMENTITE	

3-10 Nb-Si-Ti 3 元系等温断面図の計算

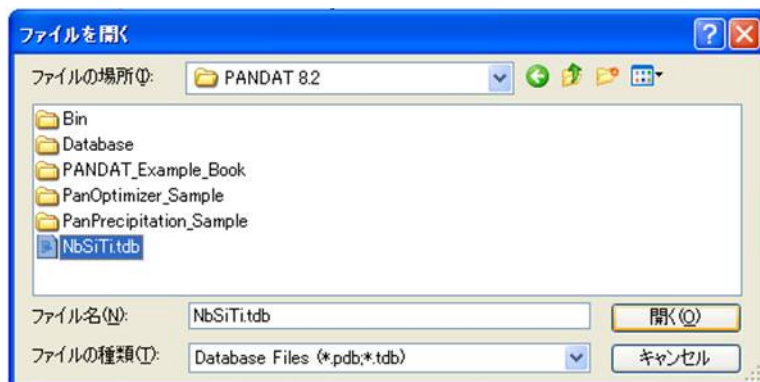
DB アイコンを
選択します。



標準インストールした場所

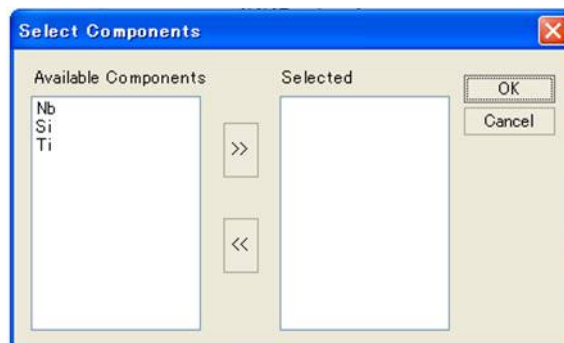
C:\Program Files\CompuThermLLC\Pandat8.2

に格納されている NbSiTi.tdb ファイルを選択します。



3-11 元素を選択する画面が表示されます。

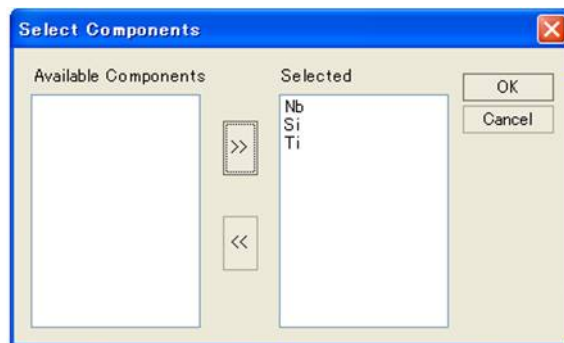
データファイルに含まれている元素が
左側に表示されます。
右側には選択した元素が表示されます。
たとえば、Nb 元素を選択し、
中央の ボタンをクリックします。
続いて Si, Ti 元素を選択し、
 ボタンをクリックします。




選択を解除するには ボタンを
利用します。

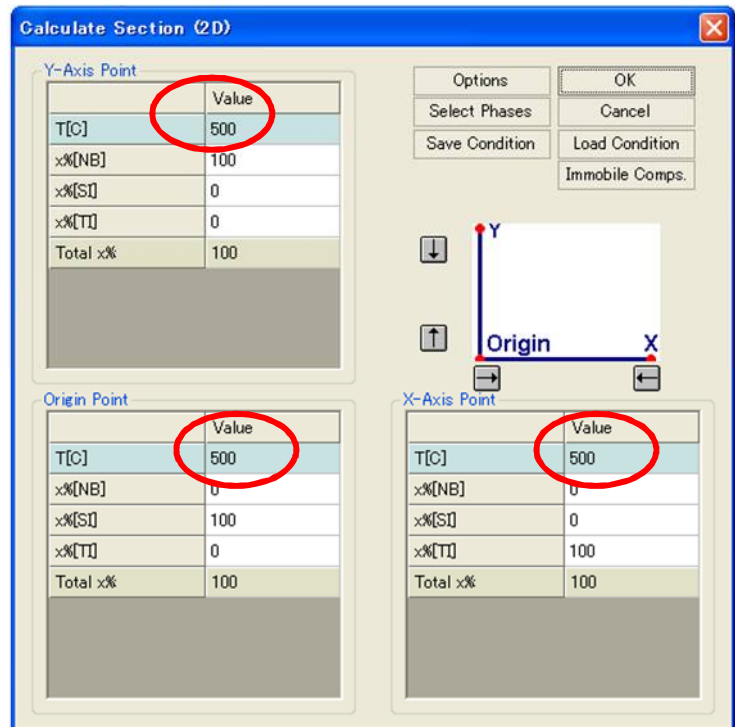
ボタンをクリックします。

ここでは3つの元素を選択すること
にします。



3-12 ツールバーのアイコン  をクリックします。

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。



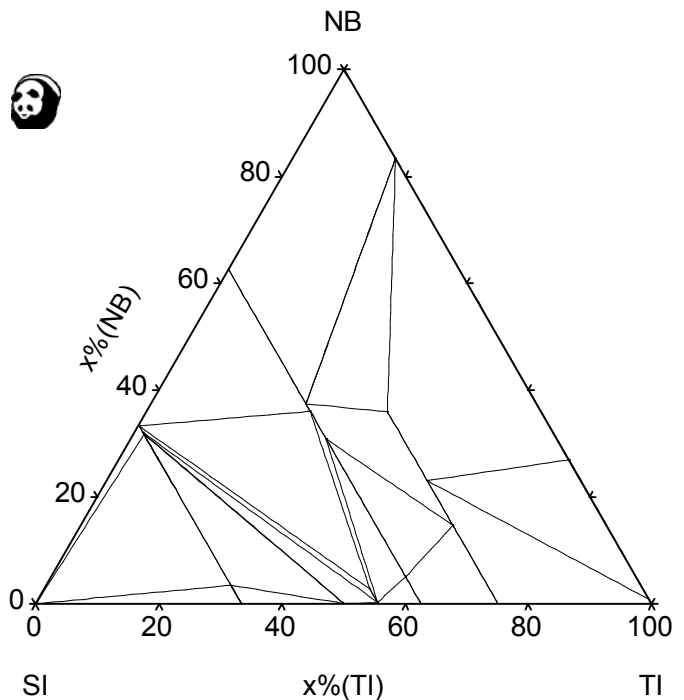
3-13 計算が終了すると状態図が表示されます。

Y軸タイトル: x%(Nb)

X軸タイトル: x%(Ti)

軸値範囲


0 ~ 100 mole %



500°Cの等温断面図です。

元素名がアルファベット順 (Nb, Si, Ti) に配置され、反時計周りで三角図の上部に Nb、左下に Si、右下に Ti が配置されます。
そこでX軸が Nb、Y軸が Si になるように変更してみましょう。

3-14 表示する軸変数の変更

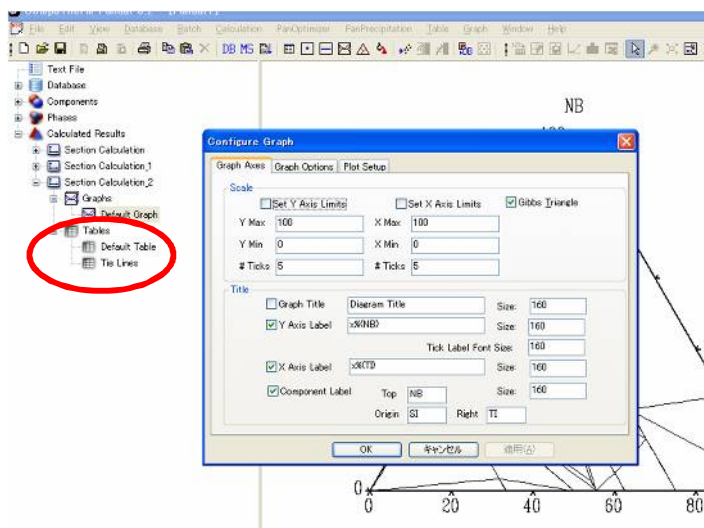
メニュー → Graph → Configure Graph を選択します。もしくは
 図上を1度クリック後に、ツールバーのアイコン  をクリックします。
 Configure Graph が表示されます。Plot Setup タグを選択します。

考え方

状態図計算を実施すると各種結果値がメモリー上に蓄積されます。その一部分だけが
 Default Table の名前にて表形式 (Table) で用意されます。またタイライン情報が
 Tables of Tie lines の名前にて表形式 (Table) で用意されます。

軸変数の変更とは列を選択し直すことです。

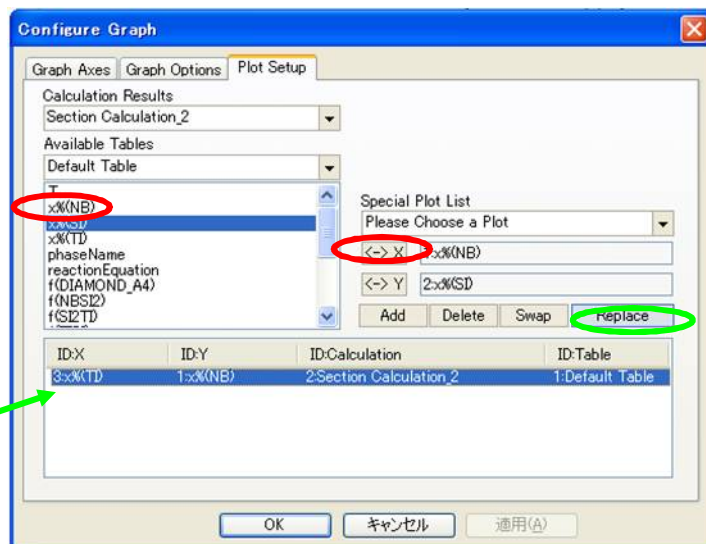
もし必要とする軸変数が Default Table に無い場合は、新しくテーブル (Table) を作成し、
 この中に変数を含めるようにします。軸変数を指定する際には先ずテーブルを選択します。



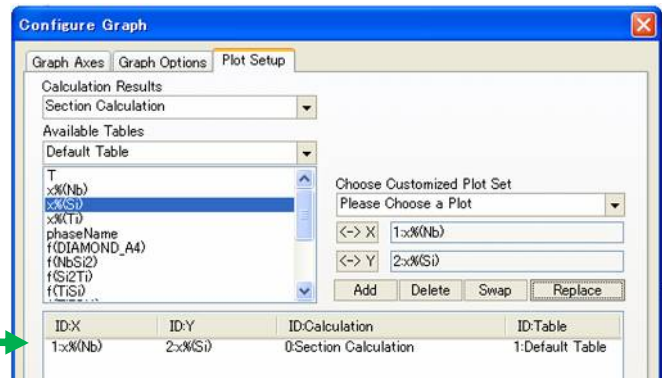
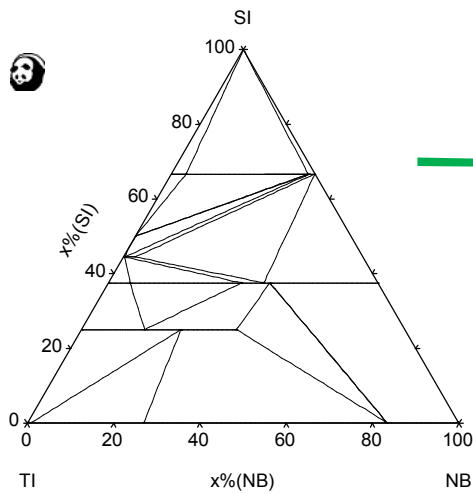
ここでは Default Table
 をそのまま利用しましょう。

Available Tables 欄の
 Default Table 名を確認し、
 X 軸を Nb 濃度とするために
 $x\%(Nb)$ を選択し中央の $\rightarrow X$ ボタン
 をクリックします。次に
 Y 軸を Si 濃度とするために
 $x\%(Si)$ を選択し中央の $\rightarrow Y$ ボタン
 をクリックします。

この行を1度クリックした後で
 Replace ボタンをクリック
 します。



軸変数が変わります。
適用ボタンをクリックします。



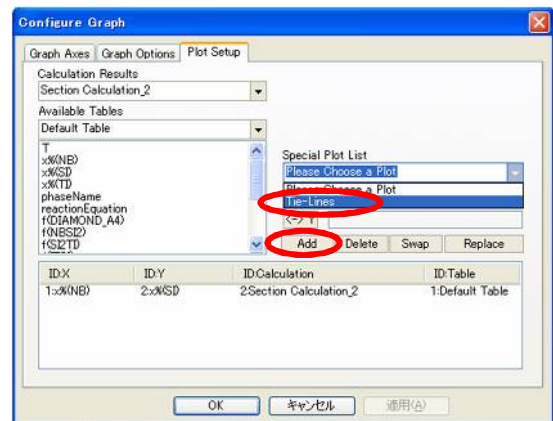
3-15 タイラインを表示させる手順

Special Plot Set

から Tie-Lines

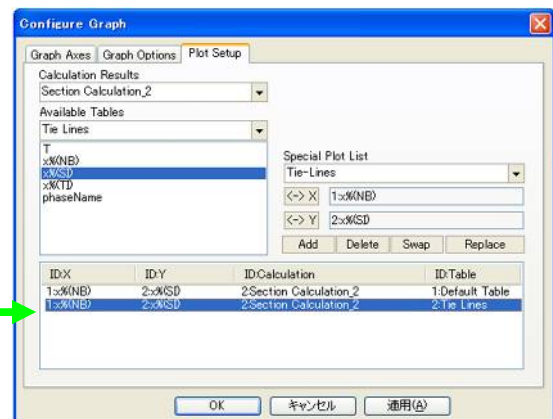
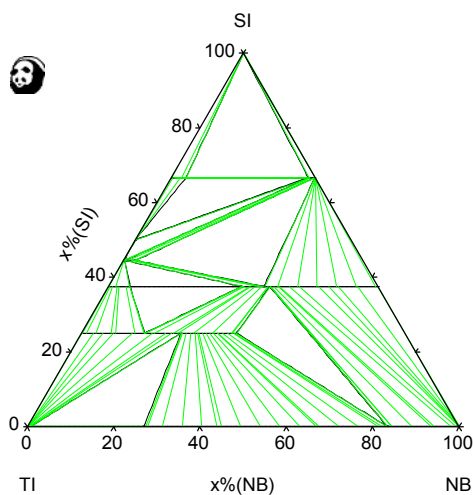
をプルダウン選択し、

Add ボタンをクリックします。



2行目が表示されます。

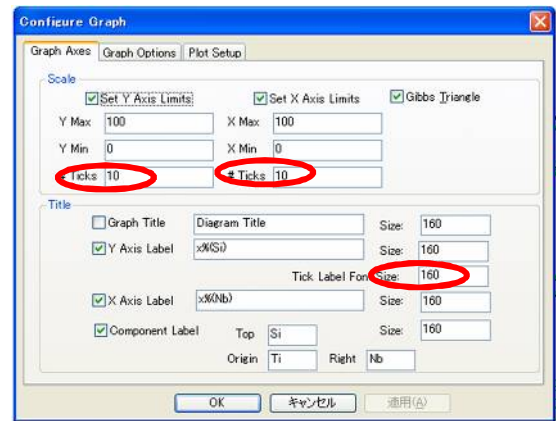
適用ボタンをクリックします。



3-16 軸値の調整

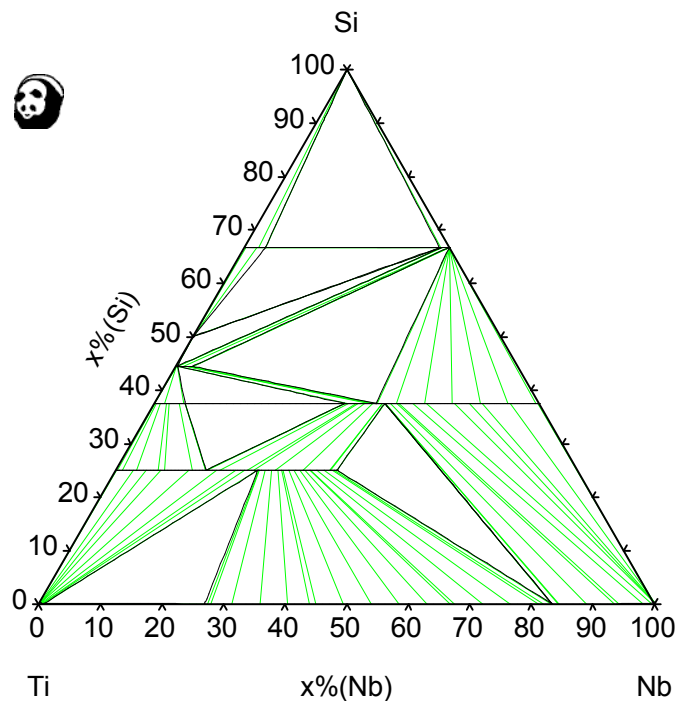
Graph Axes タグにて

3箇所を (Y軸の分割数を10、
X軸の分割数を10、軸値のフォント
サイズを160に) 変更し、
OK ボタンをクリックします。



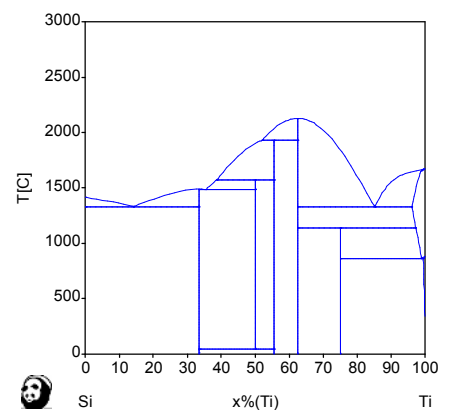
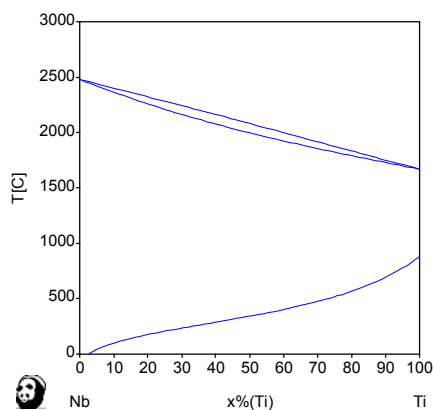
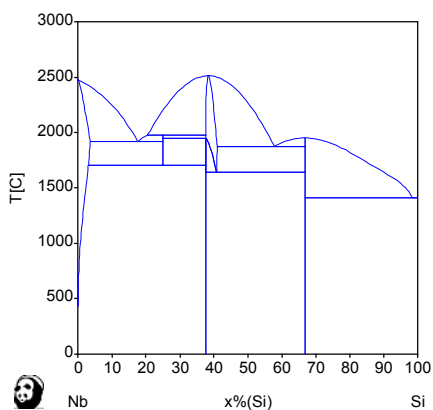
以上の操作で

Nb-Si-Ti 3元系 500°Cの等温断面図を得られました。



Nb-Si-Ti 3元系 500°C 等温断面図

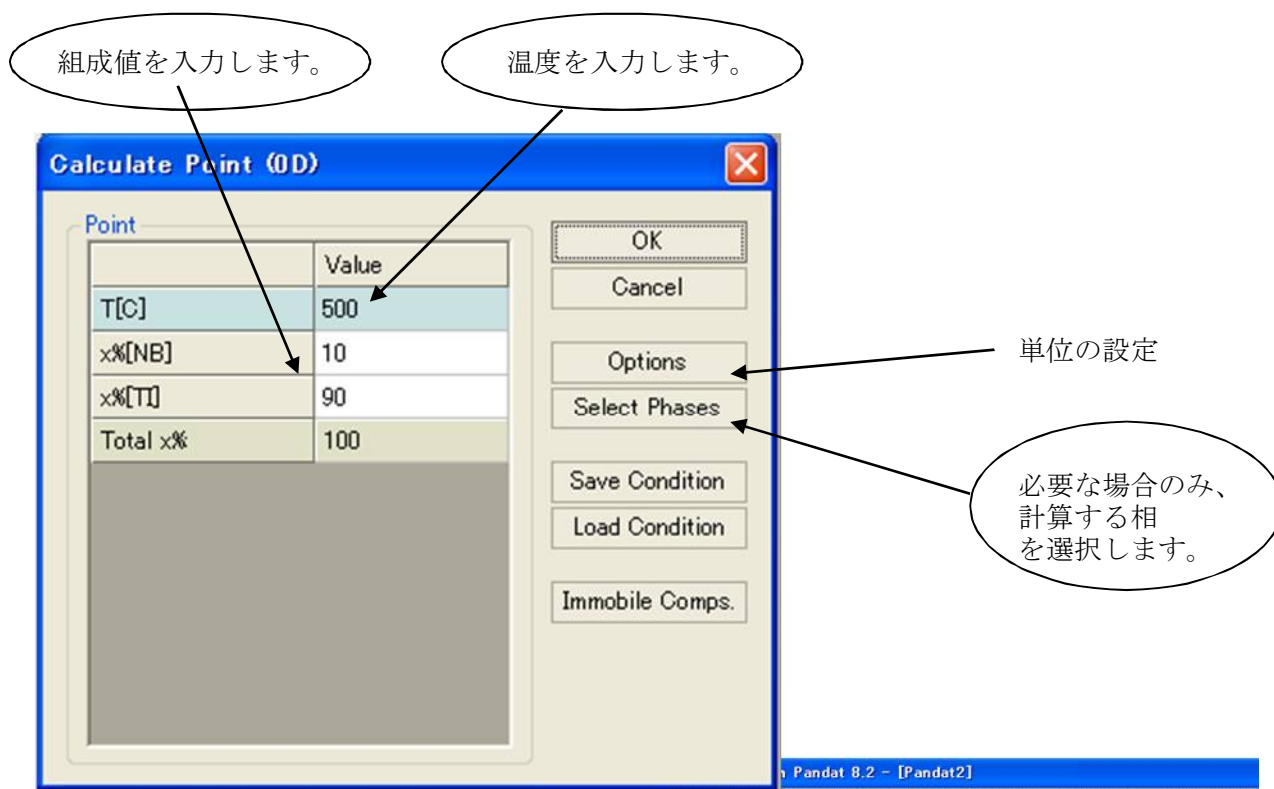
参考のために各2元系状態図を載せます。



4. 計算機能 1点計算



指定条件下における平衡計算を実行します。通常、温度と組成値を指定します。
 ガス相を含まない場合、圧力は1気圧とされます。
 計算結果が画面に表示されます。



計算結果表示例

温度 500 °C 、
 Nb-90at%Ti の
 点を計算しました。

2つの相 (BCC_A2 と
 HCP_A3) が平衡相である
 という結果を得られます。

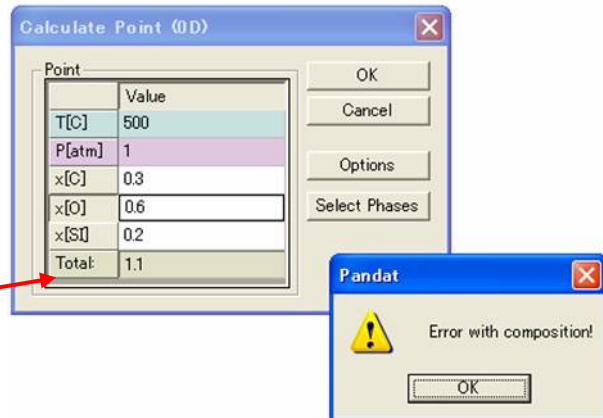
Pandat 8.2 - [Pandat2]

File Edit View Database Batch Calculation PanOptimizer PanPrecipitation

Text File Database Components All Components Selected Components NB TI Phases All Phases Selected Phases LIQUID BCC_A2 FCC_A1 HCP_A3 DIAMOND_A4 BNBSI3 Calculated Results Point Calculation Graphs Tables Results Default Table

Title = Point Calculation
 Time: 0 second(s)
 Equilibrium found
 Calculated Point
 Temperature = 773.15 K (500 C)
 Pressure = 101325 [Pa]
 System composition and chemical potential:
 NB : x = 0.1, wt = 0.17736, mu = -41193.9
 TI : x = 0.9, wt = 0.82264, mu = -30890.7
 G = -31867
 There are 2 stable phases:
 Phase BCC_A2: fraction = 0.354091
 G = -33611.6 (J/mol)
 H = 18084.4 (J/mol)
 S = 66.8641 (J/K.mol)
 Cp = 27.4505 (J/K.mol)
 T = 773.15 K
 x[NB] = 0.26834 (wt[NB] = 0.415768)
 x[TI] = 0.73166 (wt[TI] = 0.584232)
 Phase HCP_A3: fraction = 0.645909
 G = -30910.7 (J/mol)
 H = 13605.6 (J/mol)
 S = 57.5778 (J/K.mol)
 Cp = 30.7275 (J/K.mol)

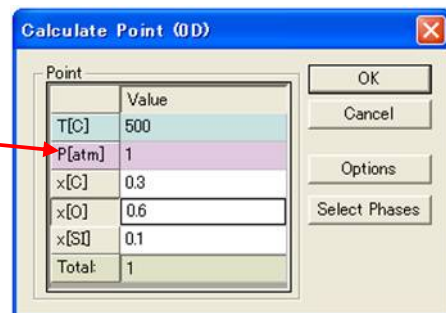
組成比率の合計値は自動的に計算され Total 欄に表示されます。



もし、合計値が1（もしくは100%）でない時にOKボタンをクリックすると（計算を開始すると）上図のような警告が表示されます。

データベースにガス相を含む場合は、計算する圧力値を入力できます。

1 気圧 = 101325 Pa



5. 計算機能 ライン計算



ある条件に沿って、連続して平衡計算を行ないます。通常、温度を固定して組成値を変える、もしくは組成値を固定して温度を変えたりします。

ガス相を含まない場合、圧力は1気圧とされます。

計算結果は図表示されます。



計算開始点を指示します。

温度を入力します。
組成値を入力します。

計算終了点を指示します。

計算回数を指示します。
この例は、組成値を0.01刻みで
100回計算します

必要な場合のみ、
計算する相を選択します。

中央の   ボタンを用いると便利です。

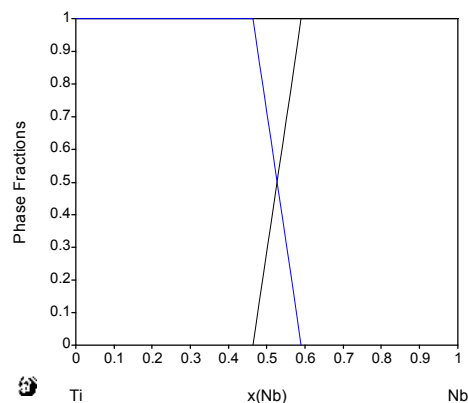
例えば、左側の計算開始点を入力後、 ボタンをクリックすると入力した値が右側の計算終了欄にコピーされます。終了条件のみ上書きすれば良い事になり入力手間が省けます。

計算結果

2000°Cにおける

縦軸が相比率、横軸が Nb 濃度の図
が表示されます。

Ti 側は Liquid 相、Nb 側は BCC 相
です。



計算結果表示例

値を画面表示
できます。

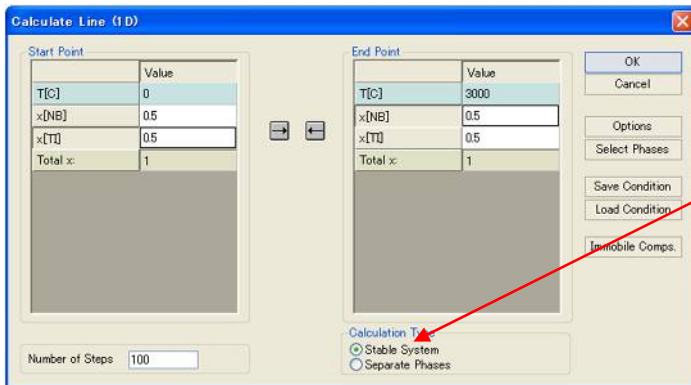
この部分を
クリック
します

100回の計算だけでなく
相境界点も計算し、
表示します。

T	x(NB)	x(TD)	phaseName	reactionEquation	f(BCC_A2)	f(LIQUID)	G	
C							J	
47	2000.00	0.540000	0.460000	BCC_A2	1.000000		-164729.86	
48	2000.00	0.530000	0.470000	BCC_A2	1.000000		-164729.68	
49	2000.00	0.520000	0.480000	BCC_A2	1.000000		-164722.66	
50	2000.00	0.510000	0.490000	BCC_A2	1.000000		-164708.81	
51	2000.00	0.505483	0.494517	BCC_A2+LIQUID	LIQUID -> BCC_A2	1.000000	0.00	
52	2000.00	0.500000	0.500000	BCC_A2+LIQUID	LIQUID -> BCC_A2	0.946428	0.053572	-164689.16
53	2000.00	0.490000	0.510000	BCC_A2+LIQUID	LIQUID -> BCC_A2	0.848726	0.151274	-164668.81
54	2000.00	0.480000	0.520000	BCC_A2+LIQUID	LIQUID -> BCC_A2	0.751024	0.248976	-164648.47
55	2000.00	0.470000	0.530000	BCC_A2+LIQUID	LIQUID -> BCC_A2	0.653322	0.346678	-164628.12
56	2000.00	0.460000	0.540000	BCC_A2+LIQUID	LIQUID -> BCC_A2	0.555620	0.444380	-164607.78
57	2000.00	0.450000	0.550000	BCC_A2+LIQUID	LIQUID -> BCC_A2	0.457919	0.542081	-164587.43
58	2000.00	0.440000	0.560000	BCC_A2+LIQUID	LIQUID -> BCC_A2	0.360217	0.639783	-164567.09
59	2000.00	0.430000	0.570000	BCC_A2+LIQUID	LIQUID -> BCC_A2	0.262515	0.737485	-164546.75
60	2000.00	0.420000	0.580000	BCC_A2+LIQUID	LIQUID -> BCC_A2	0.164813	0.835187	-164526.40
61	2000.00	0.410000	0.590000	BCC_A2+LIQUID	LIQUID -> BCC_A2	0.067111	0.932889	-164506.06
62	2000.00	0.403131	0.596869	BCC_A2+LIQUID	LIQUID -> BCC_A2	0.00	1.000000	-164492.08
63	2000.00	0.400000	0.600000	LIQUID			1.000000	-164485.33
64	2000.00	0.390000	0.610000	LIQUID			1.000000	-164458.57
65	2000.00	0.380000	0.620000	LIQUID			1.000000	-164423.87
66	2000.00	0.370000	0.630000	LIQUID			1.000000	-164381.14
67	2000.00	0.360000	0.640000	LIQUID			1.000000	-164330.31
68	2000.00	0.350000	0.650000	LIQUID			1.000000	-164271.27
69	2000.00	0.340000	0.660000	LIQUID			1.000000	-164203.93

温度 濃度 平衡相名 相比率

次に、組成を固定（50at%Nb-50at%Ti）し温度を変化させた場合（0～3000℃、30℃きざみで100回）を計算してみましょう。平衡相の存在比率を図表示できます。

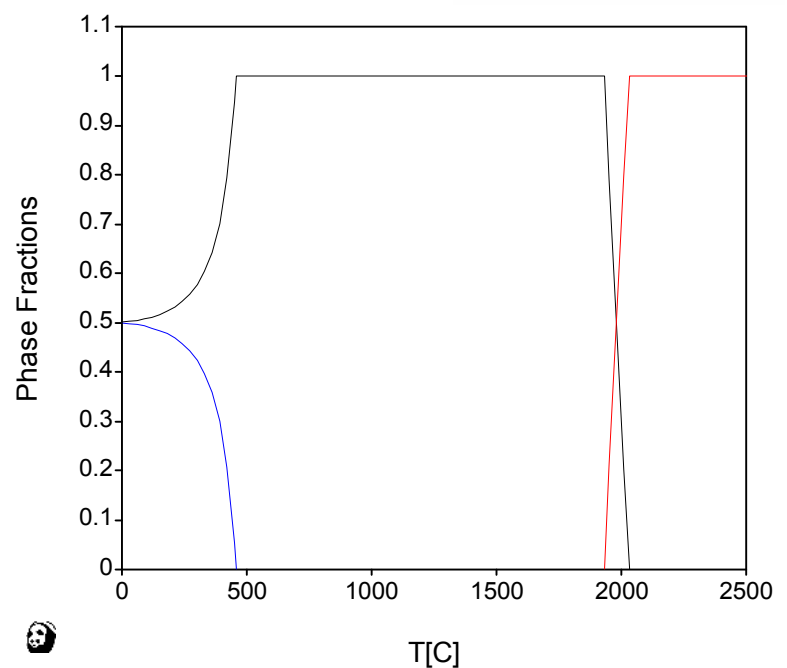
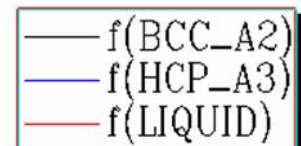
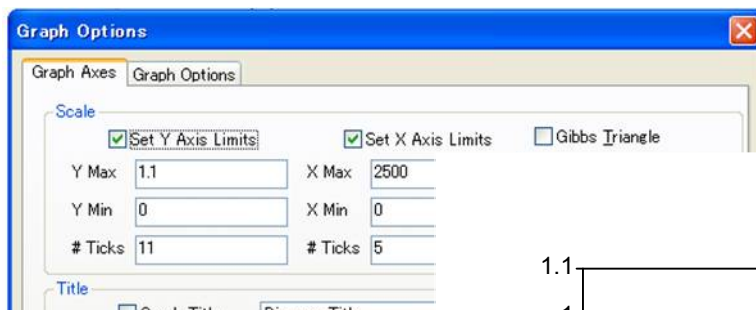


上段の計算タイプを選びます。
Stable system

計算後に Legend を利用して
線の凡例を表示できます。

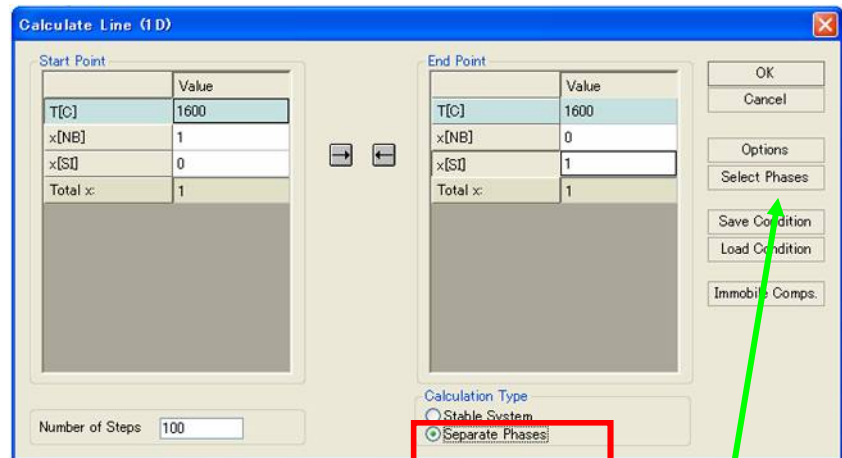


Y軸の表示範囲を 0～1.1 とし、
X軸の表示範囲を 0～2500℃とします。
赤線が液相、黒線が BCC 相、青線が HCP (α Ti) 相です。



組成—自由エネルギー—曲線 を計算し表示する場合

Nb-Si 2 元系
温度 1600°Cの断面を
計算します。



下段の計算タイプ **Separate** を選びます。

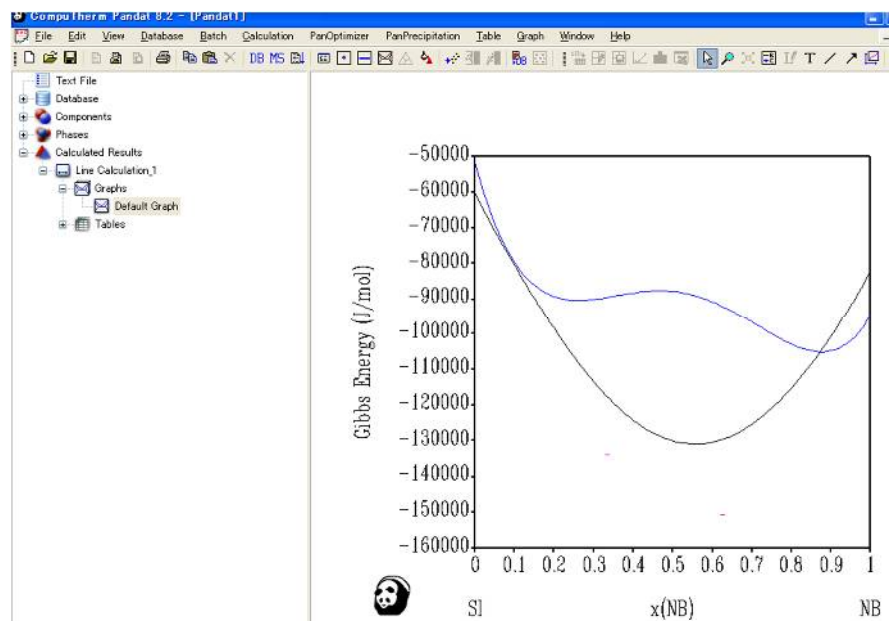
全ての相を選択すると図が複雑になるので
注目したい相だけにします。

選択した相の背景
色は青色です。
ここでは
4 個の相とします。

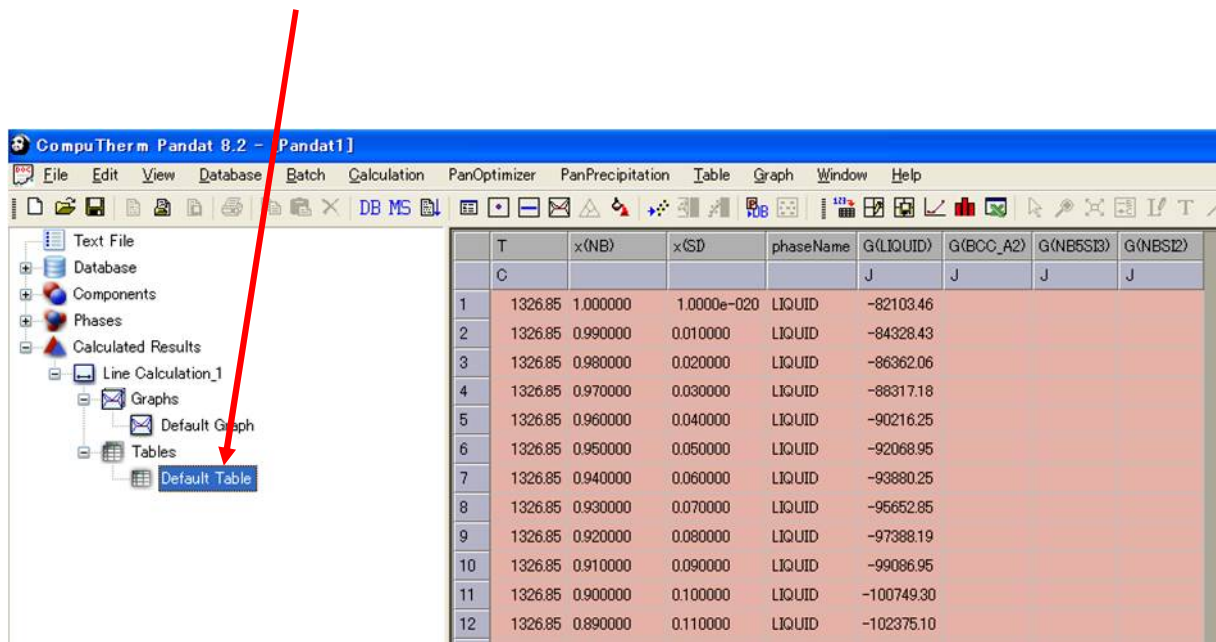


計算タイプ **Separate Phases** では平衡計算を行わず、
それぞれの相に対して自由エネルギー—曲線値を求めます。

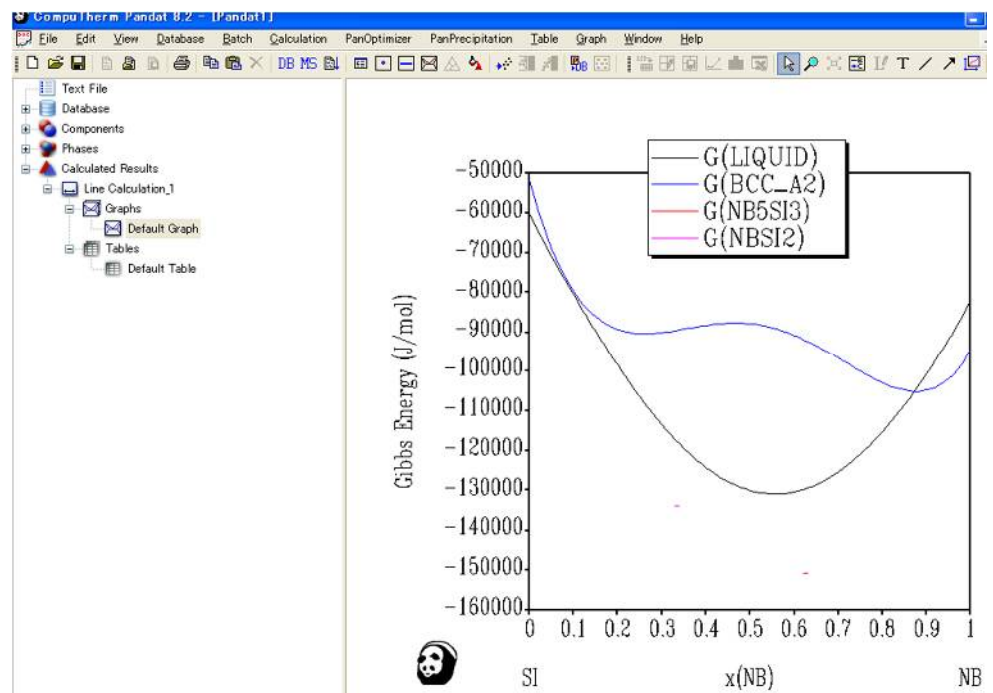
組成幅を持たない
ラインコンパウンド
化合物相は短い横線
で表されます。



それぞれの曲線がどの相に対応するのか表示させるためには、Legend（凡例）を利用します。それぞれの曲線の数値を取り出すためには、右側窓の Default Table をクリックします。



Legend（凡例）を付加した例



6. 計算機能 状態図



平衡状態図の計算を実行します。ここでは等温断面図、縦断面図を各種計算することができます。

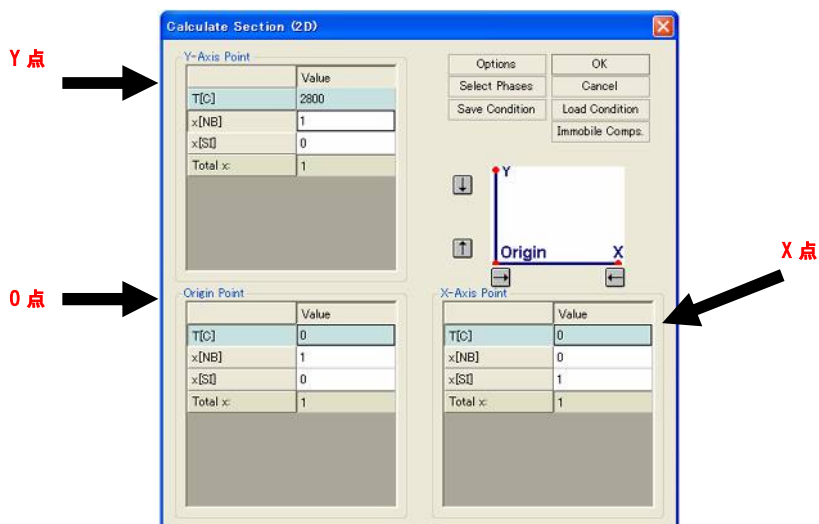
ガス相を含まない場合、圧力は1気圧とされます。

計算結果が画面に表示されます。

6. 1 2元系状態図の計算指示

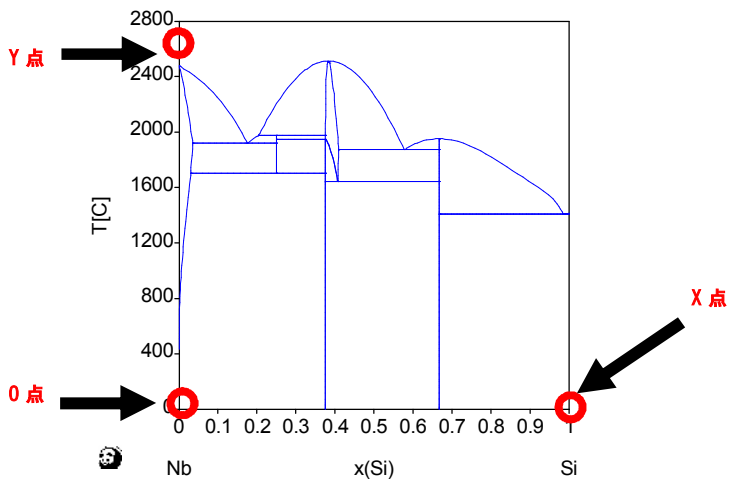
通常、このまま **OK** ボタンをクリックします。

3点 (Y点、O点 (Origin)、X点) の値を与えます。状態図をイメージし、左上がY点、左下がO点、右下がX点となります。温度はO点とX点を同じ値 (低温度) にし、Y点を高温度にします。組成値は、O点とY点を同じ値にします。O点では Si がゼロ、Nb が 100at% の断面とします。X点では Nb がゼロ、Si が 100at% の断面とします。



計算結果表示例

Nb-Si 状態図



6. 2 等温断面図の計算指示

温度を3箇所（Y点、O点、X点）とも同じにします。

3元系の場合は、3角コーナーの組成値をそれぞれ1にします。

多元系の場合は、組成を固定する元素の組成値を3箇所とも同じにします。（下の例は2at%In,10at%Znを固定）そして3角コーナーの組成値をそれぞれ残量にします。

Y-Axis Point	
Parameter	Value
T[C]	2000
x[Nb]	1
x[Si]	0
x[Ti]	0
Total x:	1

Origin Point	
Parameter	Value
T[C]	2000
x[Nb]	0
x[Si]	1
x[Ti]	0
Total x:	1

X-Axis Point	
Parameter	Value
T[C]	2000
x[Nb]	0
x[Si]	0
x[Ti]	1
Total x:	1

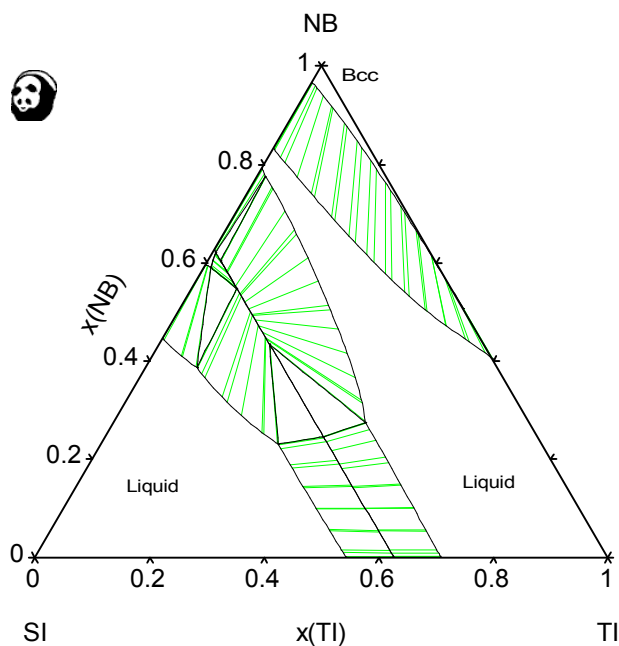
Y-Axis Point	
Parameter	Value
T[K]	2000
x[AG]	0.88
x[CU]	0
x[IN]	0.02
x[SN]	0
x[ZN]	0.1
Total x:	1

Origin Point	
Parameter	Value
T[K]	2000
x[AG]	0
x[CU]	0.88
x[IN]	0.02
x[SN]	0.88
x[ZN]	0.1
Total x:	1

X-Axis Point	
Parameter	Value
T[K]	2000
x[AG]	0
x[CU]	0
x[IN]	0.02
x[SN]	0.88
x[ZN]	0.1
Total x:	1

計算結果例

Nb-Si-Ti の 2000°C



6. 3 縦断面図の計算指示

温度は、O点とX点を同じ値で低温度にし、Y点を高温度にします。

組成を固定する元素の値を3箇所とも同じにします。

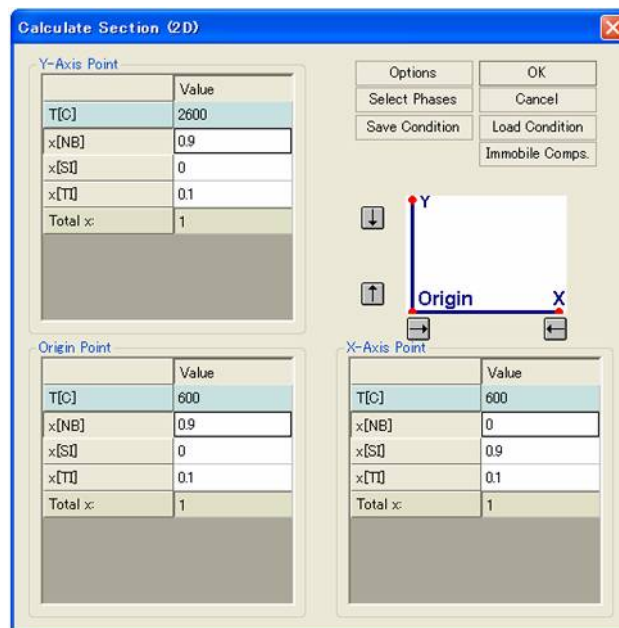
例えば Nb-10at%Ti-Si の場合、Ti の値を3箇所とも同じにします。

10at%Ti = 0.1 mole fraction

そして、残り2元素の値を指示します。

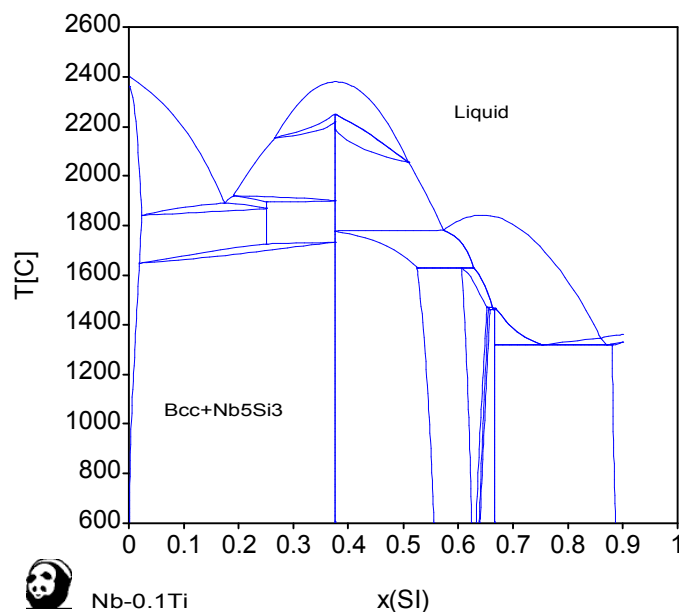
O点では Si がゼロ、Nb が 90at% の断面とします。

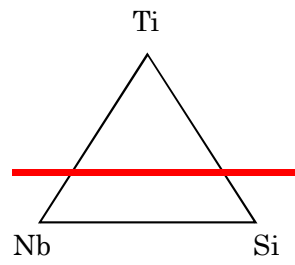
X点では Nb がゼロ、Si が 90at% の断面とします。



計算結果例

Nb-10at%Ti-Si の縦断面図





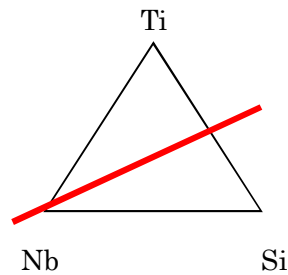
Ti の組成を固定した縦断面を計算する場合
20at%Ti

指示画面は

Y-Axis Point	
	Value
T[C]	2600
x[Nb]	0.8
x[Si]	0
x[Ti]	0.2
Total	1

Origin Point	
	Value
T[C]	0
x[Nb]	0.8
x[Si]	0
x[Ti]	0.2
Total	1

X-Axis Point	
	Value
T[C]	0
x[Nb]	0
x[Si]	0.8
x[Ti]	0.2
Total	1



断面($\text{Si}:\text{Ti} = a:b$)を切り出すことも
できます。

Si:Ti = 5:5

指示画面は

Y-Axis Point	
	Value
T[C]	2600
x[Nb]	1
x[Si]	0
x[Ti]	0
Total	1

Origin Point	
	Value
T[C]	0
x[Nb]	1
x[Si]	0
x[Ti]	0
Total	1

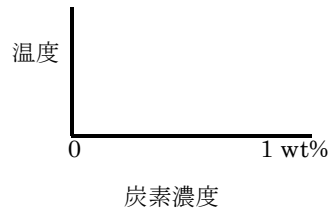
X-Axis Point	
	Value
T[C]	0
x[Nb]	0
x[Si]	0.5
x[Ti]	0.5
Total	1

多元系の場合も同じ指示画面を用います。

合金の計算指示例

Fe-C-Cr-Mn-Mo-Nb-Ni-Si-Ti-V 10 元系の例

計算したい図：



指示：

温度は 600°C ~ 1600°C、

炭素濃度は 0wt% ~ 1wt%C、

他の濃度は全て固定（3か所の値を同じにする）、
残量を Fe とする。

Calculate Section (2D)

Y-Axis Point	Value
T[C]	1600
w%[C]	0
w%[CR]	1.1
w%[FE]	94
w%[MN]	1
w%[MO]	0.9
w%[NB]	0.8
w%[NI]	0.7
w%[SI]	0.6
w%[TI]	0.5
w%[V]	0.4
Total w%	100

Options: Select Phases, Save Condition, Immobile Comps., OK, Cancel, Load Condition

Origin Point

Value	
T[C]	600
w%[C]	0
w%[CR]	1.1
w%[FE]	94
w%[MN]	1
w%[MO]	0.9
w%[NB]	0.8
w%[NI]	0.7
w%[SI]	0.6
w%[TI]	0.5
w%[V]	0.4
Total w%	100

X-Axis Point

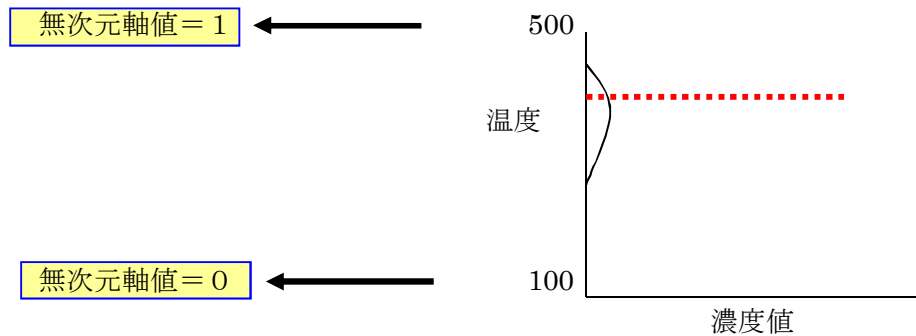
Value	
T[C]	600
w%[C]	1
w%[CR]	1.1
w%[FE]	93
w%[MN]	1
w%[MO]	0.9
w%[NB]	0.8
w%[NI]	0.7
w%[SI]	0.6
w%[TI]	0.5
w%[V]	0.4
Total w%	100

処理時間：新しいパソコンで 15 分程度

Scan Lines の利用

γ ループが極低濃度側に出るなど、状態図上どうしても計算しない領域がもし見つかった場合、下記の画面を利用します。

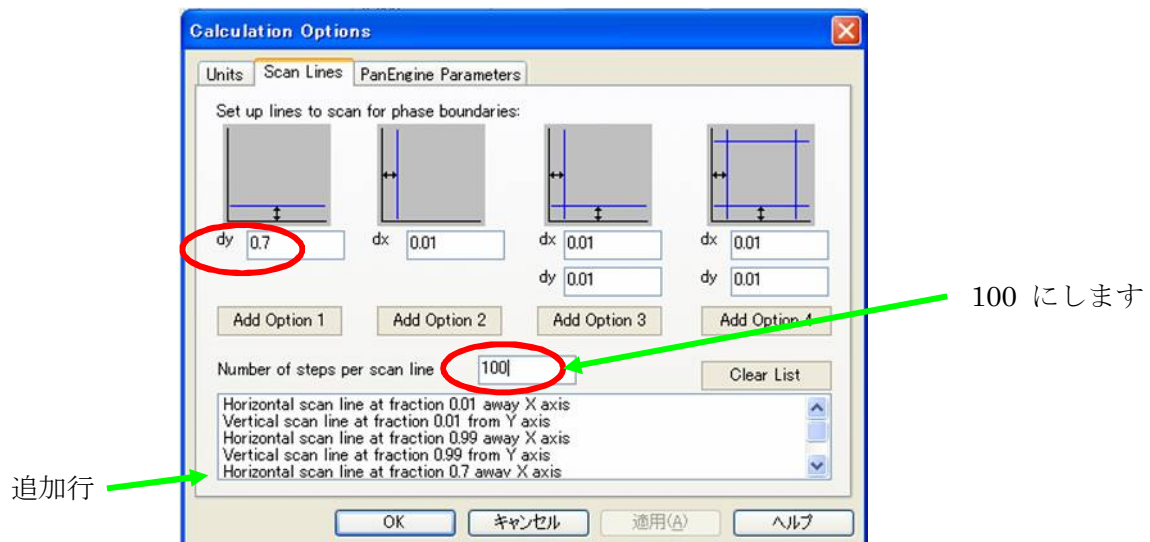
軸範囲をフラクシオン（図の上限を 1 とし、下限を 0）としてイメージします。縦断面図の場合に縦軸は温度となり、等温断面図の場合に縦軸は濃度になります。



例えば濃度値が 1% 以下で、ある温度域にだけ安定相が存在した場合、ライン に沿って計算するように手動で指示します。 温度 100°C を 0 とし 500°C を 1 と考え、約 0.7 の温度部分を計算したい場合 Scan Lines 画面上で 「 $dy = 0.7$ 」 と入力後、**Add Option 1** ボタンをクリックします。他に条件がなければ OK ボタンをクリックします。

最小値は 0.001

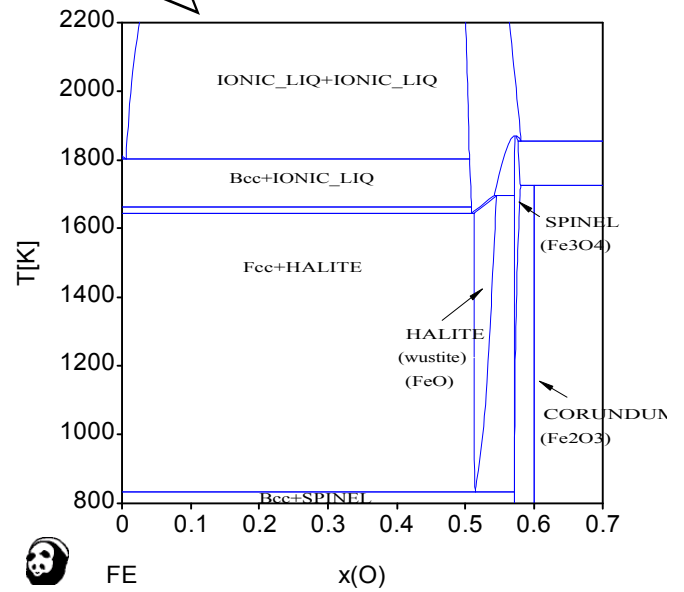
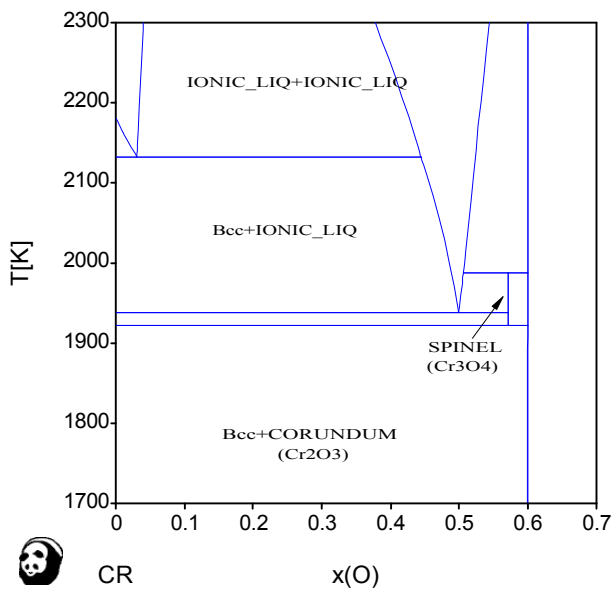
ソフトウェアは省略時値として、 $dx=0.01$ と 0.99
 $dy=0.01$ と 0.99
 の 4 ラインをまず計算し相境界を探しています。



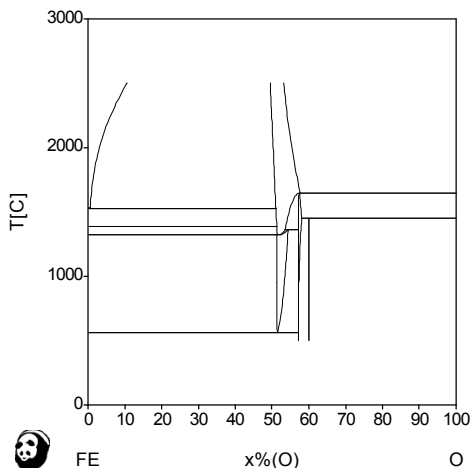
Ionic Liquid Model 計算例

Cr-Fe-O 文献 93Tay A Thermodynamic Assessment of the Cr-Fe-O System,
 J.R.Taylor, A.T.Dinsdale, Z. Metallkd. 84 (1993), 335-345.

(計算開始点) 初期値を入力する必要がありません。
 Pandat は自動的に相平衡を計算します。



Fe-O 2元系の状態図計算の場合
 合金と同じ計算指示で行います。



Calculate Section (2D)

Y-Axis Point	Value
T[C]	2500
P[Pa]	101325
x%(FE)	100
x%(O)	0
Total x%	100

Options: Select Phases, Save Condition, Load Condition, Stability (checkbox), OK, Cancel

Origin Point	Value
T[C]	500
P[Pa]	101325
x%(FE)	100
x%(O)	0
Total x%	100

X-Axis Point	Value
T[C]	500
P[Pa]	101325
x%(FE)	0
x%(O)	100
Total x%	100

Fe-Cr-O 3元系の場合

Stability をチェックします。

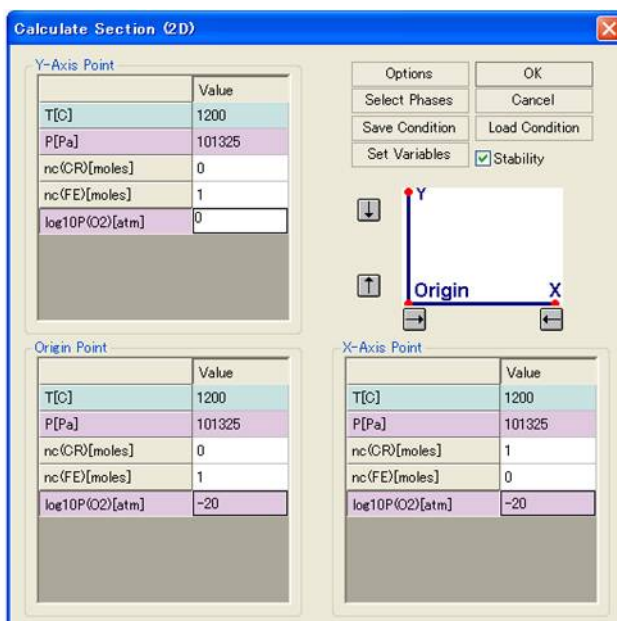
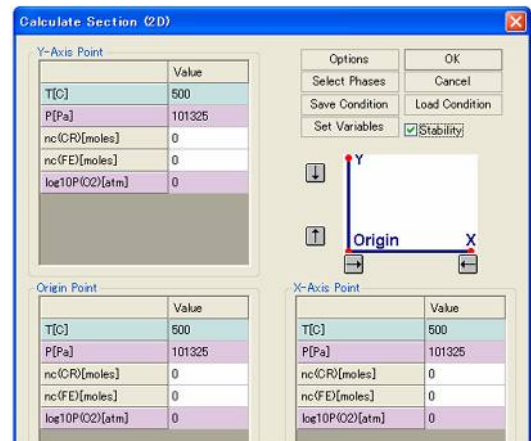
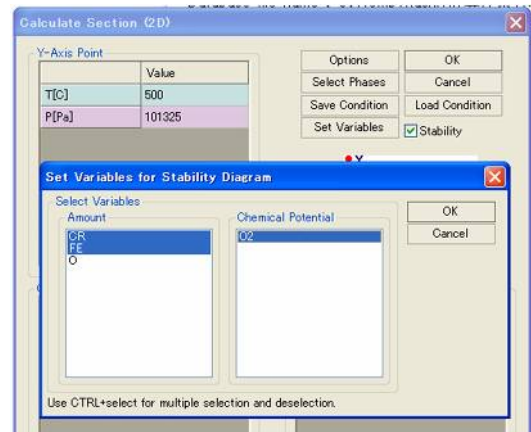
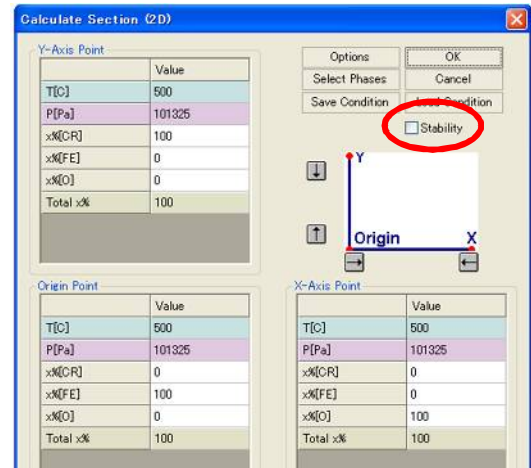
変数を変更する場合は2度目から
Set Variables ボタンをクリック
します。

Set Variables for stability diagram 画面
が表示されます。

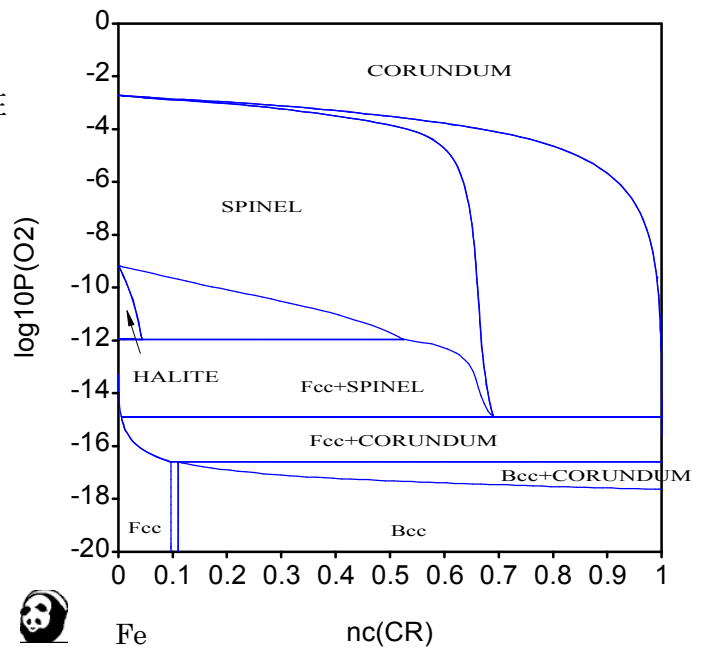
左側にある変数一覧から Ctrl キーを利用し
Cr と Fe を選択し、OKボタンを
クリックします。

系の温度を 1200 °Cとし、
X軸を Cr 濃度とし 0 ~ 1 とします。
Y軸を O₂ の対数とし -20 ~ 0 とします。

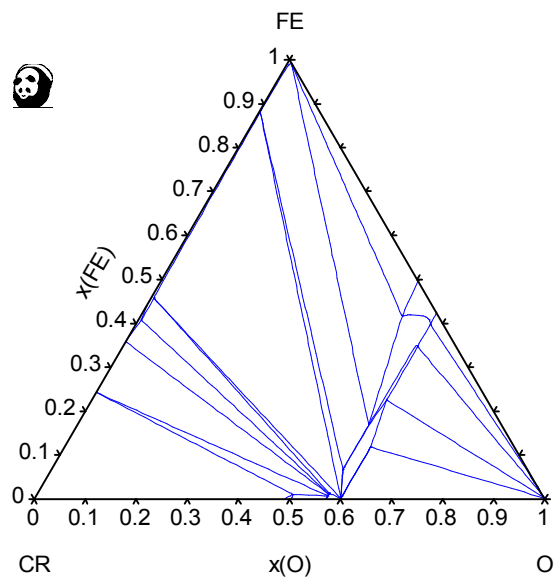
系の圧力断面は計算できません。



Y軸
 O_2 の分圧を 10^{20} 気圧から 1 気圧
 まで変化させる



Fe-Cr-O 3元系 1200°C stability diagram



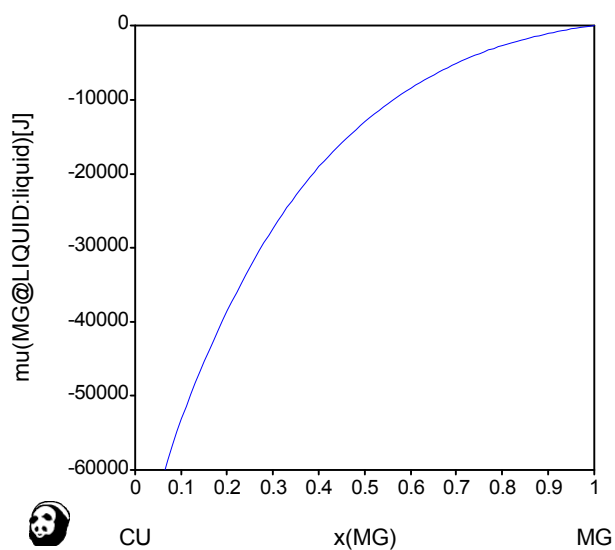
Fe-Cr-O 3元系 1700°C 等温断面図

Associate Model 計算例

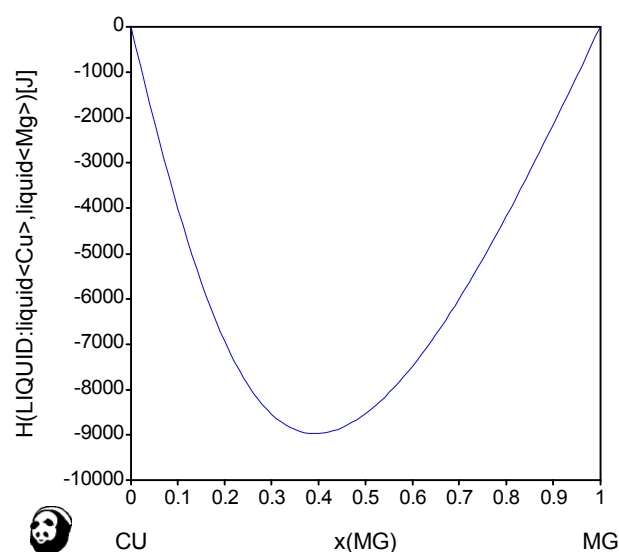
Cu-Mg 文献 07Zho Modeling of Thermodynamic Properties and Phase Equilibria for the Cu-Mg Binary System, S.Zhou, Y.Wang, et. al., J.Phase Equilibria Diffusion, 28 (2007), 158-166.

計算指示画面は標準の場合と同じです。

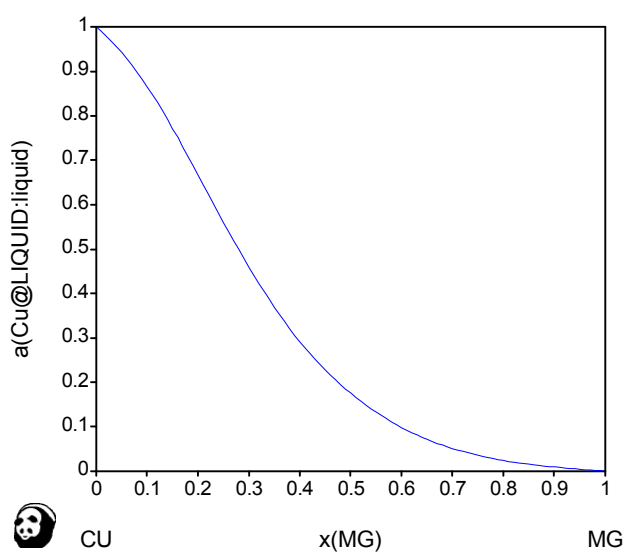
計算結果例



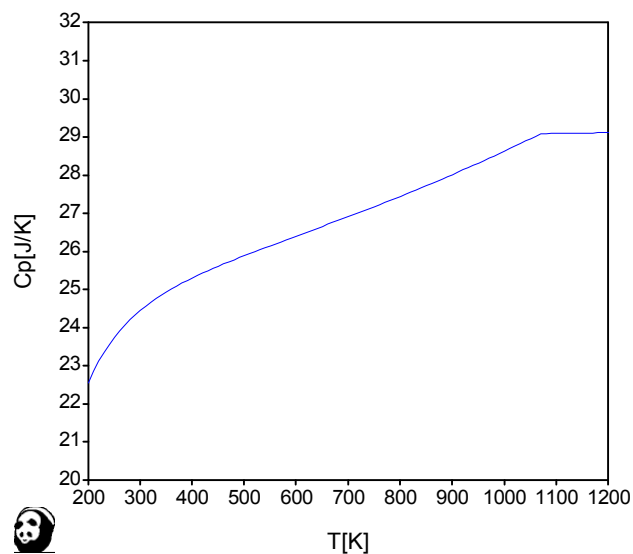
the chemical potential of Mg
for the Cu-Mg liquid phase at 1100 K.



the enthalpy of mixing of
the liquid phase at 1120 K



the activity of Cu at 1200 K



the heat capacity of Cu₂Mg

7. 計算機能 液相面図



液相面図の計算を実行します。

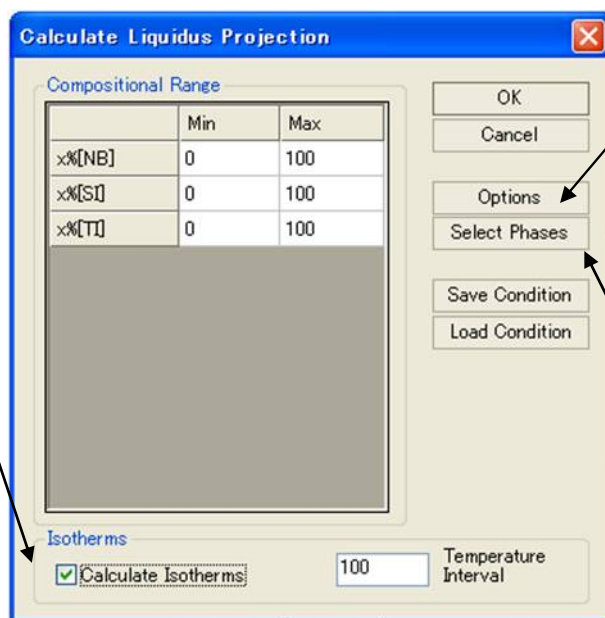
ガス相を含まない場合、圧力は1気圧とされます。

計算結果が画面に表示されます。

単位を°C、mol、percent に設定します。通常、このまま OK ボタンをクリックします。

液相面が複雑な谷形状をしていて明らかに初晶を計算していない場合、スキャンラインを複数指定することができます。

等温度の補助線が必要な場合にチェックします。

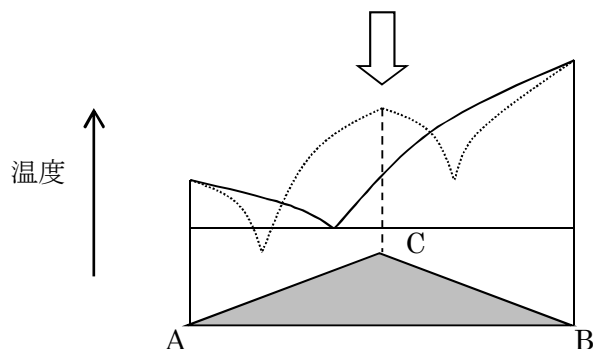


必要な場合のみ、計算する相を選択します。

液相面図とは、上部から投射した図です。

初晶相の範囲を示します。

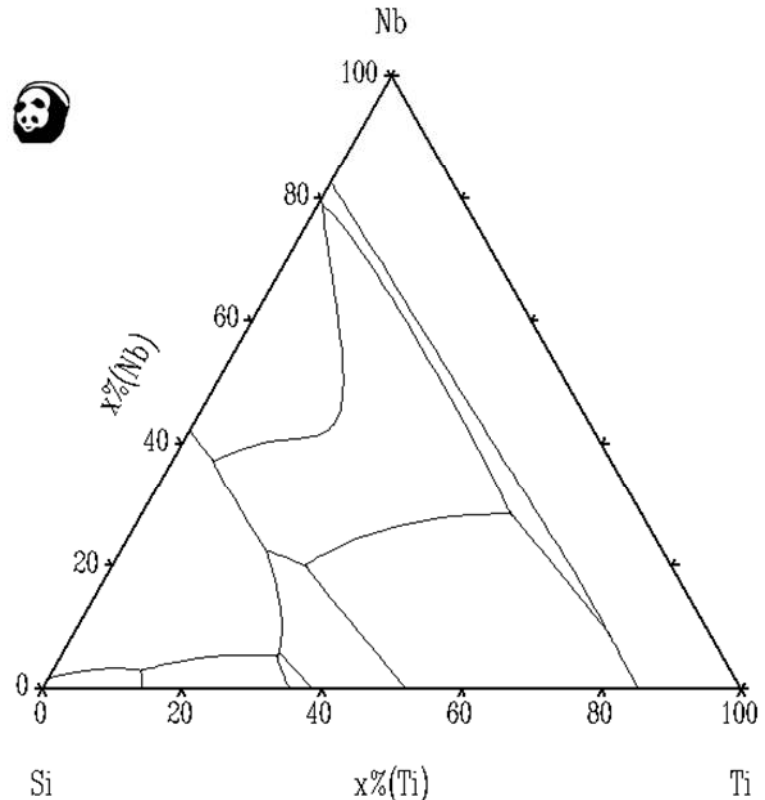
液相線の谷（第3元素の添加による変化）を示します。



Nb-Si-Ti の液相面図を計算します。

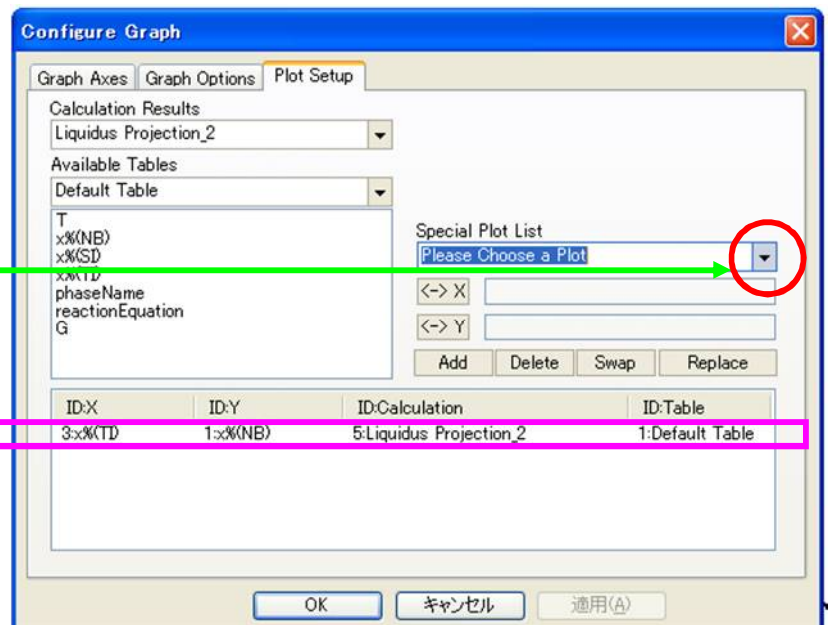
等温度補助線をチェックしても、そのままでは、補助線が表示されません。

Menu → Graph → Configure Graph を選択もしくは、アイコンをクリックします。



Configure Graph 画面が表示されます。Plot Setup タグを選択します。(右図) 等温度線を表示させるために、「Special Plot Set」の右をクリックします。

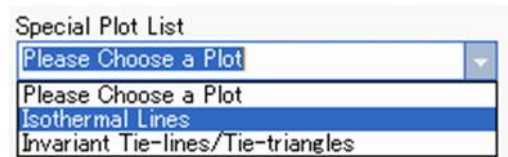
ここには現在表示されているデータが表示されます。



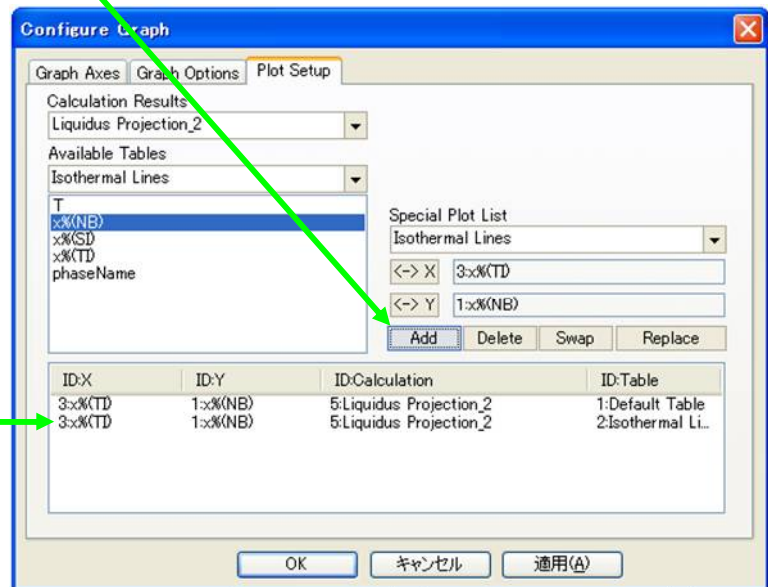
プルダウンメニューが表示されます。

「Isothermal Lines」を選択します。

「Add」ボタンをクリックします。



2行目が追加されたことを
確認できます。

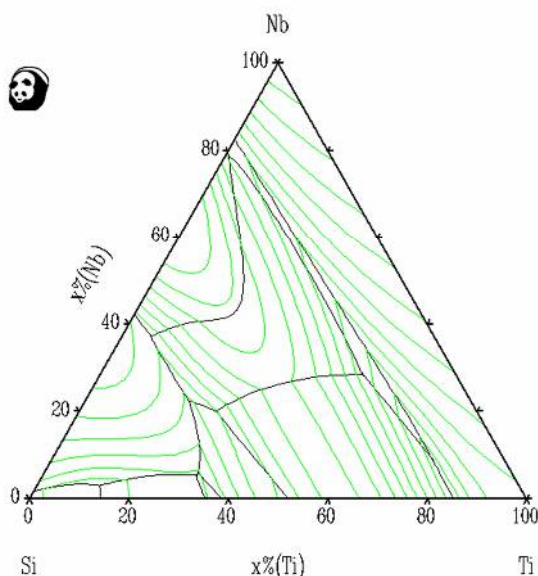


「適用」ボタンをクリック
します。

「OK」ボタンをクリック
します。以上の操作で液相
面図上に等温度線を表示できます。

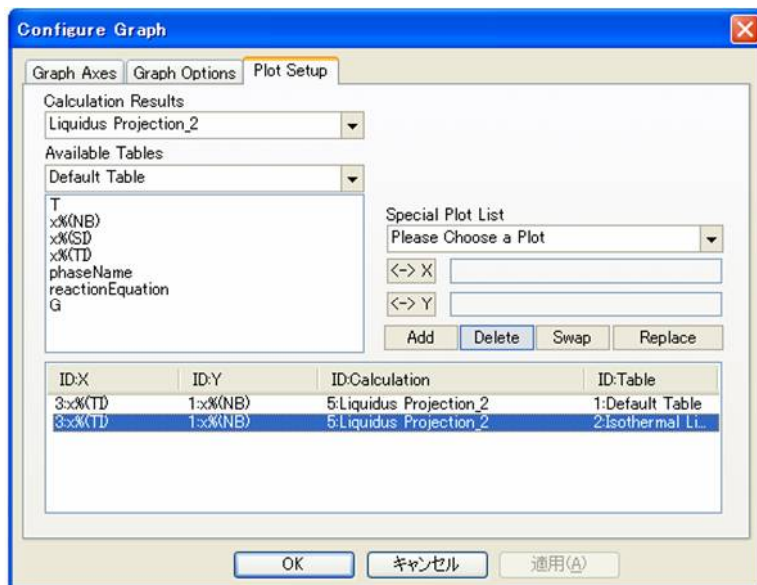
アドバイス :

もし軸変数を変更する際には
「Available Tables」の
「Isothermal Lines」
からX軸とY軸の変数を選択
できます。

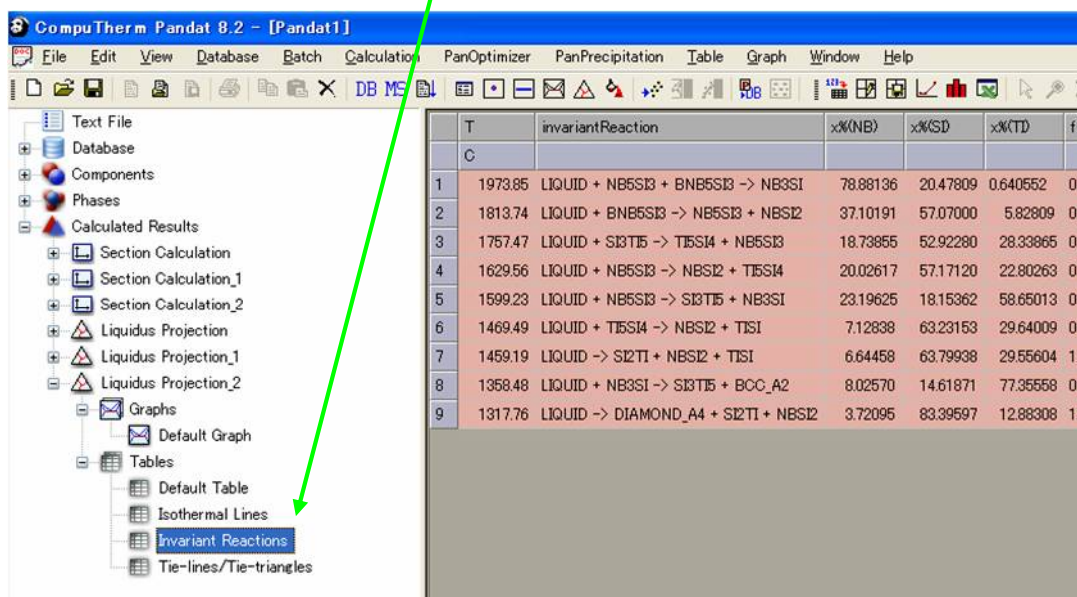


等温度線の間隔をさらに細かくしたい場合は再度、計算をし直します。

現在の等温度線の表示を消す方法は、等温度線のデータ行を選択し、その行を青色にし、「Delete」ボタンをクリックします。「適用」ボタンをクリックします。

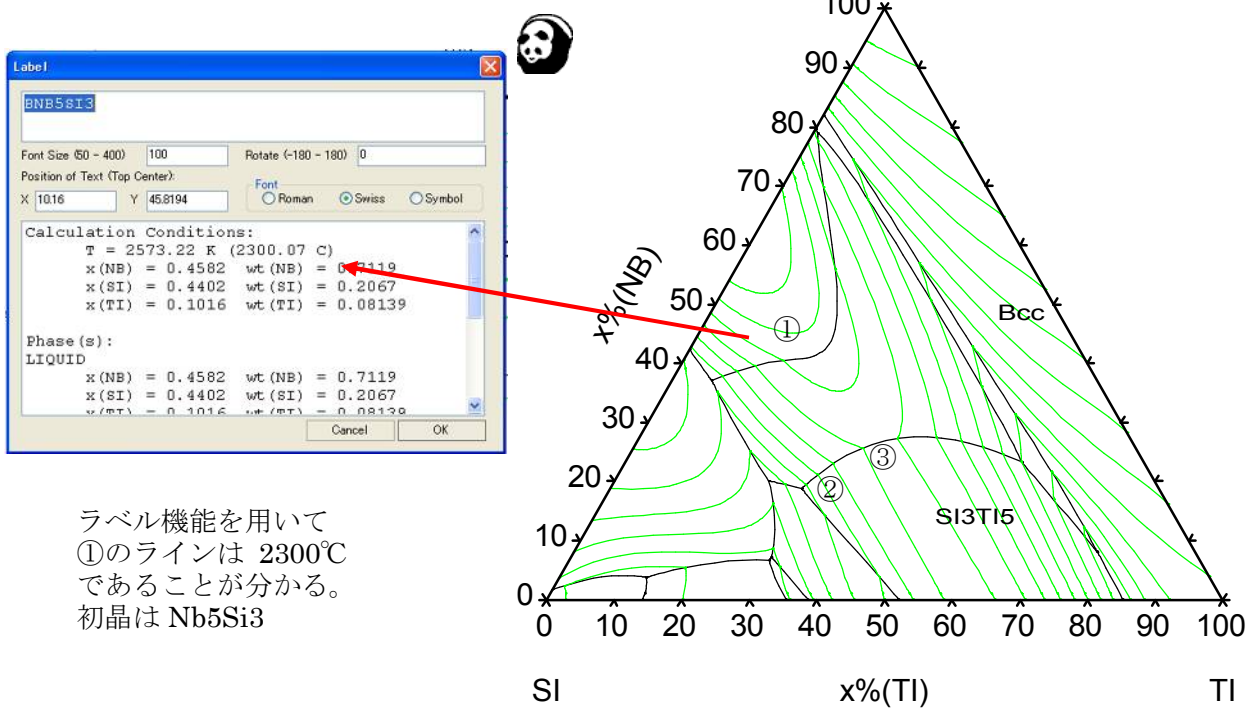


Invariant Reactions を確認するためには、Tables を選択クリックすることで表示されます。



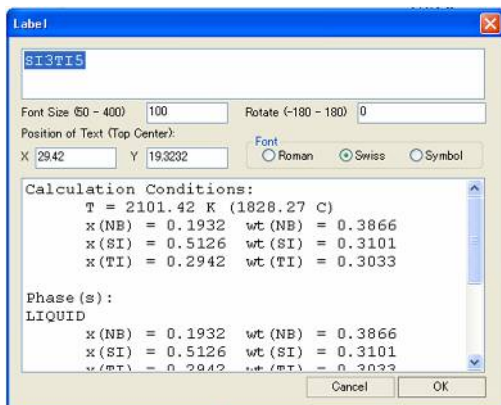
計算結果例

Nb-Si-Ti の液相面図



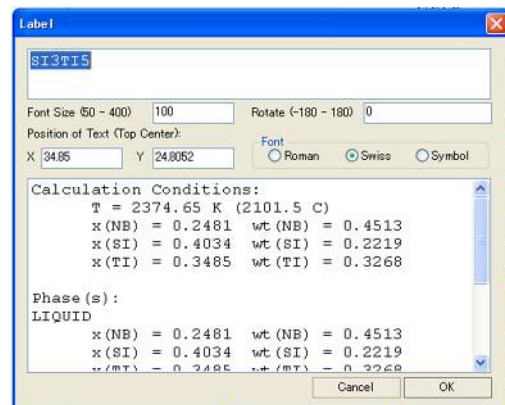
谷がどちらに傾斜しているのか図から判断できないので、
ラベル機能を用いて2点以上をクリックしその温度を調べます。

②の点では



温度は約 1828°C
初晶は Si3Ti5

③の点では



温度は約 2101°C
初晶は Si3Ti5

したがって③の方が温度が高い。

8. 計算機能 凝固計算



凝固シミュレーションの計算を実行します。 温度-固相率の関係を計算します。
 計算モデルは、Scheil と lever rule モデルが用意されています。後者は平衡計算モデルです。
 ガス相を含まない場合、圧力は1気圧とされます。
 計算結果が画面に表示されます。

温度は高めの値にしておきます。

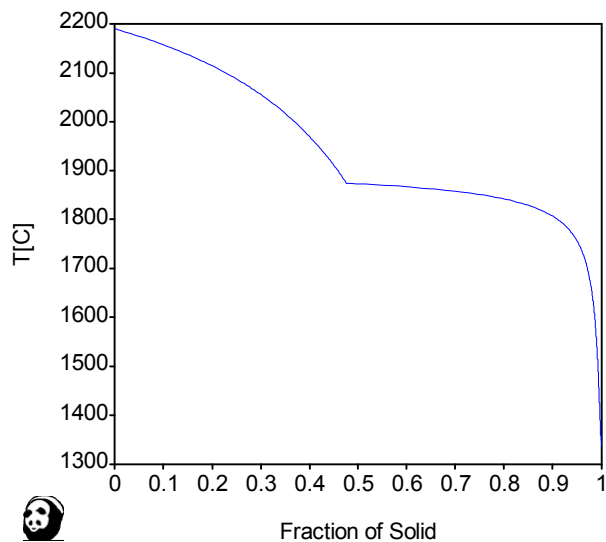
組成値を入力し、OK ボタンをクリックします。

Liquid Composition	
	Value
T[C]	3000
x[NB]	0.8
x[S]	0.1
x[TI]	0.1
Total x:	1

必要な場合のみ、
計算する相を選択
します。

計算結果例

縦軸に温度、横軸に固相率
の図が表示されます。



温度 晶出相 固相率 潜熱

画面上にテーブル値を表示します。温度、晶出相、固相率値などを確認できます。
エクセルなどにこの表値を export できます。

バッチ機能もしくはテーブル機能を利用することで次のような数値を出力できます。

温度 (K)、温度 (°C)、固相率、系のエンタルピー、液相の比率、液相中の各元素濃度、
晶出相の比率、各相中の各元素濃度

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	
1	T(K)	T(°C)	fs	Hm	f(Liquid)	x(Nb@Liquid)	x(Si@Liquid)	x(Ti@Liquid)	f(BCC_A2)	x(Nb@BCC)	x(Si@BCC)	x(Ti@BCC)	f(NB3S1)	x(Nb@NB3S1)	x(Si@NB3S1)	x(Ti@NB3S1)	f(TBS1)	x(Nb@TBS1)	
2																			
145	2153.58	1880.43	0.343557	58707.7	0.656443	0.739856	0.140886	0.119159	0.343557	0.901872	0.027851	0.070277							
146	2152.78	1879.63	0.344302	58710.7	0.655698	0.739671	0.141114	0.119214	0.344302	0.901794	0.027889	0.070316							
147	2152.38	1879.23	0.344674	58712.1	0.655326	0.739598	0.141179	0.119242	0.344674	0.901755	0.027909	0.070336							
148	2152.18	1879.03	0.344866	58712.8	0.65514	0.739534	0.141211	0.119256	0.344866	0.901736	0.027918	0.070346							
149	2152.08	1878.93	0.344952	58713.1	0.655048	0.739511	0.141227	0.119263	0.344952	0.901726	0.027923	0.070351							
150	2152.06	1878.91	0.344974	58716.2	0.655026	0.739505	0.14123	0.119265	0.344974	0.901724	0.027924	0.070352	0.640674	0.25	0.108326				
151	2151.86	1878.71	0.358387	57555.4	0.641613	0.738953	0.141191	0.119856	0.351428	0.901402	0.027928	0.070699	0.006958	0.640198	0.25	0.109802			
152	2151.46	1878.31	0.38426	56124.7	0.61574	0.737852	0.141111	0.121037	0.363687	0.900761	0.027937	0.071302	0.020374	0.639251	0.25	0.110749			
153	2150.66	1877.51	0.432432	53526.6	0.567568	0.735655	0.140955	0.12339	0.387111	0.899487	0.027952	0.072561	0.045322	0.637372	0.25	0.112628			
154	2149.06	1875.91	0.516152	49223.7	0.483848	0.731285	0.140651	0.128064	0.427588	0.896967	0.027981	0.075052	0.086585	0.633673	0.25	0.116327			
155	2147.46	1874.31	0.583423	47905.1	0.416577	0.726947	0.140359	0.132694	0.460155	0.894483	0.028007	0.077351	0.123269	0.630051	0.25	0.119949			
156	2145.86	1872.71	0.638131	46798.8	0.361869	0.722641	0.140077	0.137282	0.486718	0.892034	0.028091	0.079935	0.151413	0.626508	0.25	0.123487			
157	2144.26	1871.11	0.68311	45861.2	0.31869	0.718366	0.139805	0.141829	0.508606	0.889618	0.028051	0.08233	0.174504	0.623028	0.25	0.126972			
158	2142.66	1869.51	0.72046	45059	0.27954	0.714121	0.139543	0.146336	0.526822	0.887234	0.02807	0.084696	0.193638	0.619622	0.25	0.130378			
159	2141.06	1867.91	0.751759	44366.8	0.248241	0.709906	0.139291	0.150804	0.542119	0.88488	0.028066	0.087034	0.20964	0.616283	0.25	0.133717			

9. 単位の設定

メニュー「Calculation」→「Options」を選択します。

ここでは計算に用いる単位を「圧力」「温度」「組成」「比率」に関して指示します。
温度は K か°C、組成はモル組成か重量組成か、比率値は%値かフラクシオン値か、指示できます。

ガス相を含まない場合、

Atmosphere 1 気圧

Pascal = 101325 Pa

と自動的にセットされます。



Scan Lines タグにおいて、
「必ずスキャンして欲しい場所」
を手動で指示できます。

$dx=0.01$, $dy=0.99$ とは

単位設定において

Weight-Percent を指示した場合、

(等温断面図を計算させる際)

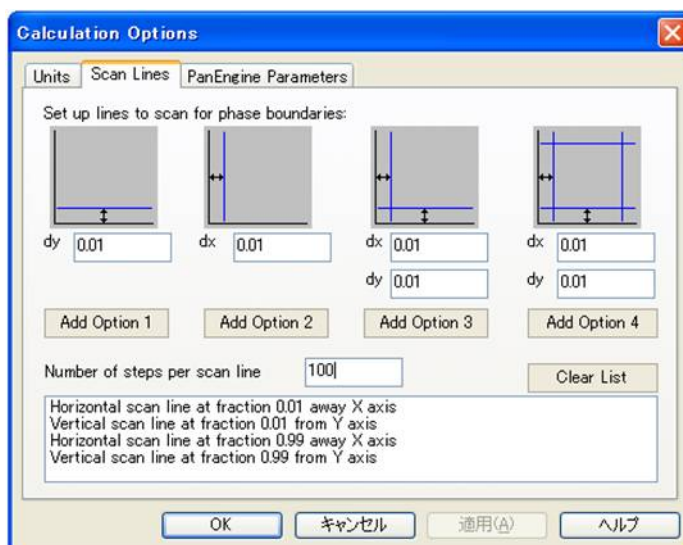
この意味は

$dx=1wt\%$

$dy=99wt\%$

のラインをスキャンすることです。

なおシステム内部では、組成をモルフラクシオン値に変換し計算しています。



10. ファイル操作

Pandat ではメニュー「New」、「Open」、「Save」、「Save As」を使用できます。これはテキストファイルに関する操作です。

計算結果の作業ファイルを **Workspace** と呼びます。このファイルは Pandat 独自のファイル形式であり、テキストファイルではありません。

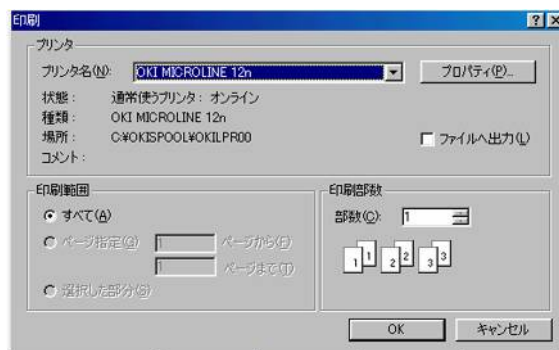
作業ファイルを閉じる場合は「Close Workspace」を選択します。

新規に作業ファイルを作る場合は「New Workspace」を選択します。

図上を 1 一度クリックすると、**Print** が有効になります。

Print を選択すると、「印刷」画面が表示されます。

プリンターを選択しOKボタンをクリックすることで図を印刷できます。



Print Preview を選択すると、プレビューが表示されます。

Close ボタンをクリックすると元に戻れます。

Print Setup を選択すると、「プリンターの設定」画面が表示されます。

11. バッチ機能

なぜこの機能を作ったのか：

過去に計算した条件を少しだけ変えて再度計算することを簡単にしたい。特に多元系の合金を計算する場合、合金濃度値を毎度画面入力するのは面倒でした。

そこで、画面に入力した値を保存できるようにしました。

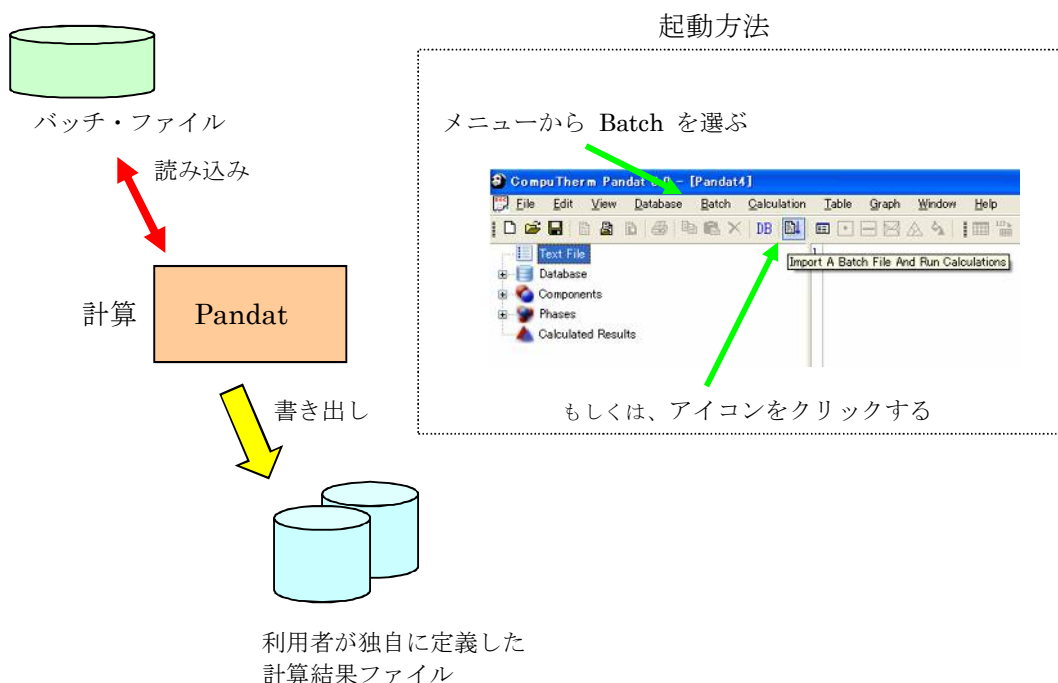
何ができるのか：

画面入力と同じ計算ができます。この他、

画面入計算では得られない熱力学データを外部ファイルに書き出すことができます。

例えば、凝固時の分配係数を知りたい場合、晶出相中の元素濃度値を書き出すことができます。さらに、大量の計算を一括して処理出来ます。

動作環境：

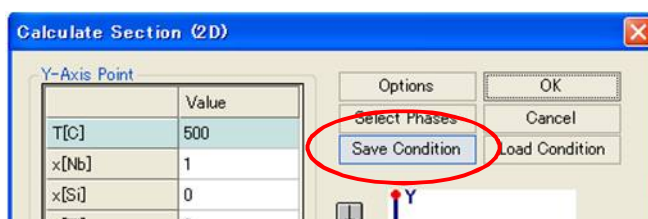


操作例：

11-1 例：Nb-Si-Ti 3元系 500℃の等温断面図を計算します。

単位は、℃、モル fraction とします。

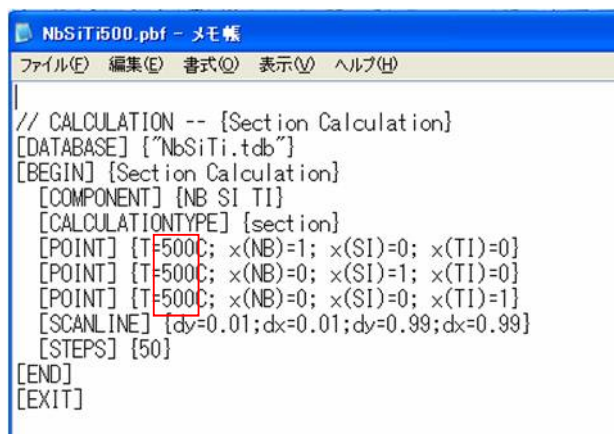
11-2 計算指示画面の **Save Condition** ボタンを選択します。



- 11-3 名前を付けて保存します。
たとえば NbSiTi500.pbf

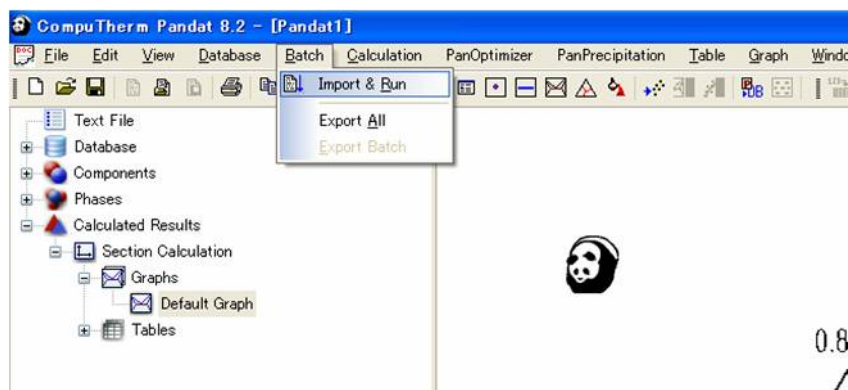


- 11-4 メモ帳などを利用して
このテキストファイル
を開きます。



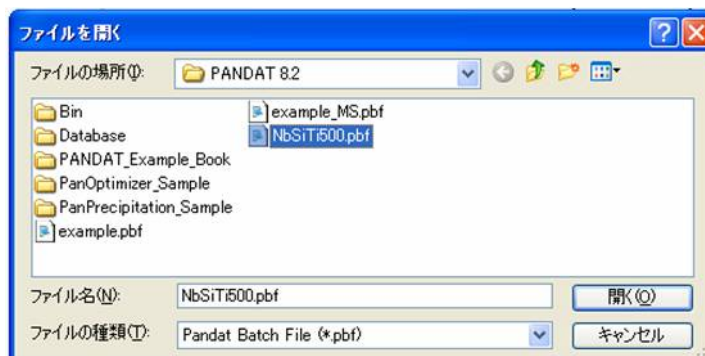
これがバッチ・ファイルの中身です。 500°Cを 800°Cに変えてみましょう。
500C が3箇所ありますので、800C に変えて上書き保存します。

- 11-5 Pandat に戻り、
メニュー Batch から Import & Run
を選択します。



0.8
/

- 11-6 「開く」ボタン
をクリックすると
計算が始まります。
800°Cの
計算結果が画面上
に表示されます。



11-7 バッチ・ファイルの決め事

- 画面操作（及び値入力）後にその情報を保存できます。
その情報（テキストファイル）を編集できます。
「メモ帳」等のプログラムを用いて編集できます。
- ファイル名の拡張子は、 p b f とします。（パンダ・バッチ・ファイル）
- どのような計算を行うのか ① [キーワード] で記述し、続いて具体的な数値を ② {値} で記述します。画面入力とほぼ同じ要領で値が並びます。
[] と { } では、括弧の種類が違うことに注意して下さい。
- コメント行は // で始めます。
- 大文字・小文字の違いはありません。
例えば、 [Begin] と [begin] と [BEGIN] とは同じです。
- ひとつの計算処理は [Begin] で始まり、[End] で終わります。
例：
[Begin]
 縦断面図計算
[End]
[Begin]
 等温断面図計算
[End]
- バッチ処理は、キーワード [Exit] 行で終了します。

表 11-1

① [キーワード]	② {値}	説明
[Database]	{ "NbSiTi.tdb" }	利用するデータベースファイル名を記述します。途中で他のデータベースに変更できます。
[Begin]	{ 計算タイトル }	ひとつの計算処理がここから始まることを記述します。計算タイトルを記述できます。このタイトルは画面上に表示されます。
[End]	なし	ひとつの計算処理がここまでであることを記述します。
[Exit]	なし	バッチ・ファイルの読み込みを終了させます。計算処理がここで終了します。
[CalculationType]		計算種類として5つの中のどれかを必ず指示します。
	{Point}	1点計算
	{Line}	ライン計算
	{Section}	状態図計算
	{Projection}	液相面図計算
	{Solidification}	凝固計算

(続く)

表 11-1

[キーワード]	{値}	説明
[Component]	{ Nb Si Ti }	計算に用いる元素を記述します。
[Point]	{ T=1000 } { T=1000C } { x(Nb)=0.1 } { x%(Nb)=10 } { w(Si)=0.05 } { w%(Si)=5 }	温度の単位はケルビンです。 記号Cを付ければ°C単位になります。 x: mole fraction x%: mole percent w: weight fraction w%: weight percent 濃度値合計が1もしくは100以上になった場合は、補正され 指定値/合計値になります。 濃度値を記述していない1個の元素が存在する場合、その濃度値は残量とされます。
[Steps]	{ 50 }	ライン計算の場合、ステップ数を記述します。 (刻み数)
[Model]	{ Scheil } { Lever }	凝固計算の場合、計算モデルをどちらか指示します。 Lever = equilibrium 平衡
[Interval]	{ 100K } { 100C }	液相面図計算の場合、等温線を付加できます。付加する場合、温度間隔を指示します。 100C と入力した場合、100°C, 200°C, 300°C, …の温度線を計算します。
[Scanline]	{ dx = 0.2, dy = 0.3 }	必要な場合に限り、相境界を検索するスキャン位置を指示できます。
[Suspend] [Restore]	{*} {Liquid} {FCC_A1, BCC_A2}	{*} は全ての相を意味します。 計算から除外する相や、計算対象に含める相を指示します。

(続く)

表 11-1

[キーワード]	{値}	説明
[Output]	{ fileName="hashi01.dat", format = "T, phaseName, fs, fl, H_Latent" }	<p>必要な場合、 利用者が独自に定義する計算結果ファイルを作れます。</p> <p>作成するファイル名を記述します。もし既に同じ名前のファイルが在れば、上書きされます。</p> <p>一方、ファイル名に ## を含めれば、例えば、hashi##.dat とすれば、##の部分は自動的に2桁の番号が付けられ、上書きを防止します。</p> <p>hashi00.dat hahsi01.dat hashi02.dat ⋮</p> <p>T: 温度 (ケルビン) T(C): 温度 (°C) phaseName: 平衡相の名前</p> <p>fs: 固相率 fl: 液相率 H_Latent: 凝固中の系の潜熱</p>
option	{searchlevel=2}	Search Level = 1 は計算処理が速い Search Level = 2 は遅くなりますが 相境界をもれなく探します。
alloy		合金名
loop	{ step = "4"; x(Si)=" 0.1, 0.5 " }	ステップ数 繰り返し時の開始値と終了値
table		テーブル
graph		グラフ

表 11-2 テーブル入力形式

シンタックス	意味	備考
T T[C], T[K] 1_T	温度 温度の逆数は 1_T	温度の単位はケルビンです。記号 C を付ければ℃単位になります。 T 温度 (ケルビン) T[C] 温度 (°C)
phaseName reactionEquation invariantEquation ZPF (PhaseName) extreme (T) f(*), fw(*), fv(*) f%(*), fw%(*), fv%(*) x(*), x%(*) w(*), w%(*) x(*@*), x%(*@*) w(*@*), w%(*@*) y(*@*)	平衡相の名前 各相のモル分率、重量分率 体積分率 各相のモル%、重量%、 体積% 各コンポーネント (元素) の濃度、モル比率とモル% 各コンポーネント (元素) の濃度、重量比率と重量% 相中の各元素の濃度、 モル比率とモル% 相中の各元素の濃度、 重量比率と重量% 相中での、各副格子中の濃 度サイトフラクション	平衡状態の全ての相に対して 熱力学データを抽出します。 全てのコンポーネント (元素) に 対して値を抽出します。 計算対象の全ての相に関して、相 中の全ての元素に対する熱力学デ ータを抽出します。 x(元素名@相名) 副格子番号は自動的に振られます 例 y(Cu#0@fcc), y(Cu#1@fcc),
a(Cu@fcc:liquid) a(*@fcc:liquid) a(*@*:liquid) a(*@*:liquid<*,T>) G, H, S, Cp G(:phase<*>), H(:phase<*>), S(:phase<*>) DF (*)	基準相 Liquid に対する指 定相 fcc の Cu の活量 a(Cu@fcc:liquid) = exp{ (mu(Cu@fcc) - mu(pure Cu@liquid))/RT } 系のギブスエネルギー、エン タルピー、エントロピ ー、熱容量 基準相に対する 系のギブスエネルギー、エン タルピー、エントロピ ー、熱容量 駆動力	Activity 基準相の化学ポテンシャル値 mu(pure Cu@liquid) を計算でき ない場合、活量 -1 がセットされ ます。

(続く)

表 11-2 テーブル入力形式

シンタックス	意味	備考
<p>mu(*)</p> <p>pmG(*), pmH(*), pmS(*), pmCp(*)</p> <p>mu(*:phase<*>), pmG(*:phase<*>), pmH(*:phase<*>), pmS(*:phase<*>), pmCp(*:phase<*>)</p> <p>G(*), H(*), S(*), Cp(*)</p> <p>G(*:phase<*>), H(*:phase<*>), S(*:phase<*>), Cp(*:phase<*>)</p> <p>a(*@*)</p> <p>mu(*@*)</p> <p>pmG(*@*), pmH(*@*), pmS(*@*), pmCp(*@*)</p>	<p>各元素の化学ポテンシャル</p> <p>各元素の部分モル量</p> <p>基準相に対する各元素の部分モル量</p> <p>各相のギブスエネルギー、エンタルピー、エントロピー、熱容量</p> <p>基準相に対する各相のギブスエネルギー、エンタルピー、エントロピー、熱容量</p> <p>相中の元素の活量 a(元素@相)</p> <p>相中の元素の化学ポテンシャル mu(元素@相)</p> <p>相中の元素に対する部分モル量</p>	<p>全てのコンポーネント（元素）に対して値を抽出します。</p> <p>mu(*:phase<*>) = pmG(*:phase<*>)</p> <p>全ての相に対して値を抽出します。</p> <p>全てのコンポーネント（元素）に対して値を抽出します。</p>
<p>mu(*@*:phase<*>), pmG(*@*:phase<*>), pmH(*@*:phase<*>), pmS(*@*:phase<*>), pmCp(*@*:phase<*>)</p> <p>aa(*@*:phase<*>)</p>	<p>基準相に対する各相の部分モル量</p> <p>基準相に対する相中の元素の活量</p>	
<p>fs</p> <p>fl</p> <p>H_tot</p> <p>H_Latent</p>	<p>凝固 {Solidification} 計算時の固相率</p> <p>液相率</p> <p>凝固中の系のエンタルピー</p> <p>凝固中の系の潜熱</p>	<p>Htot は H(*)とは異なる</p>

(続く)

表 11-2 テーブル入力形式

シンタックス	意味	備考
ftot(fcc), ftot(*)	{Solidification} 計算時における固相の累積 phase fraction 値	ftot(liquid) = fl
f_tot(fcc), f_tot(*)	{Solidification} 計算時における固相の累積 phase fraction 値 その相が存在する温度領域でのみ表示されます。	
Vm, density, MW	系のモル体積、密度、モル重量	
Vm(*), density(*), MW(*)	相のモル体積、密度、モル重量	
surfaceTension, viscosity	液相の表面張力、粘性	
M (*@*) logM (*@*) DC (*,j@*:n) logDC (*,j@*:n) DT (*@*) logDT (*@*)		

11-8 記述の注意点：

ライン計算：[CalculationType] {Line} の場合、

[Point] キーワードは2行になります。

1行目は計算開始点を、2行目は計算終了点を記述します。

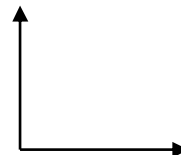
状態図計算：[CalculationType] {Section} の場合、

[Point] キーワードは3行になります。

1行目 Y点の値

2行目 O点の値

3行目 X点の値



バッチファイルに記述する内容は、画面上に入力する内容と一致しています。

```
[begin] {Nb-Si binary phase diagram}
      [CalculationType] {SECTION}
```


```
[COMPONENT] {Nb Si}
```

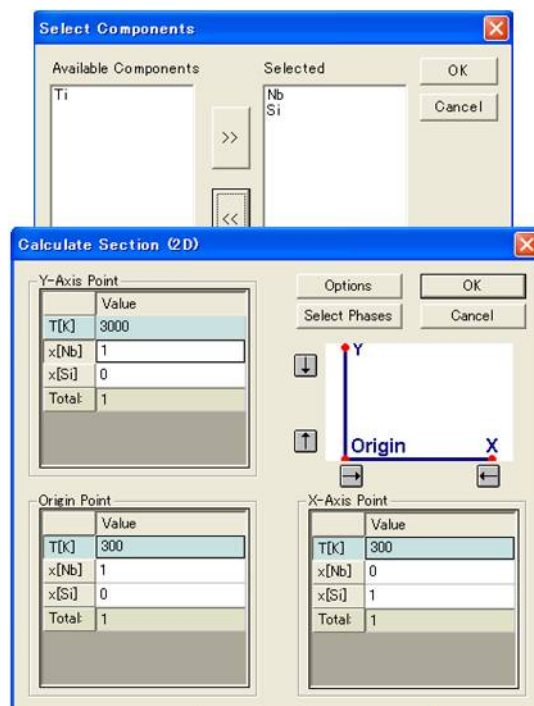
```
[POINT] {T = 3000, x(Nb) = 1}
```

```
[POINT] {T = 300, x(Nb) = 1}
```

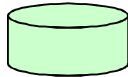
```
[POINT] {T = 300, x(Si) = 1}
```

```
[end]
```

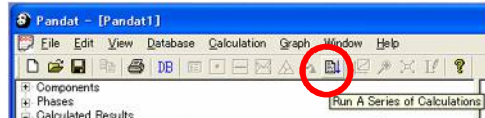
 ボタン



11-9 操作の流れ：



① バッチファイルを作成する。

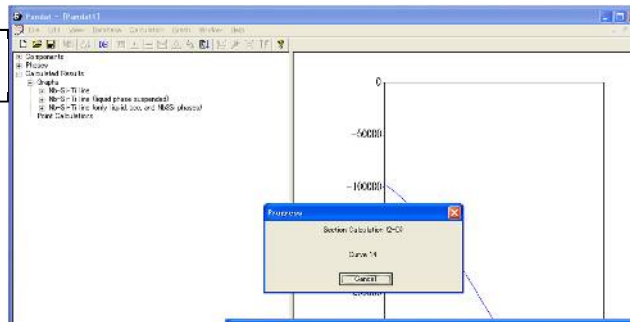


② Pandat から
バッチファイルを選択する。

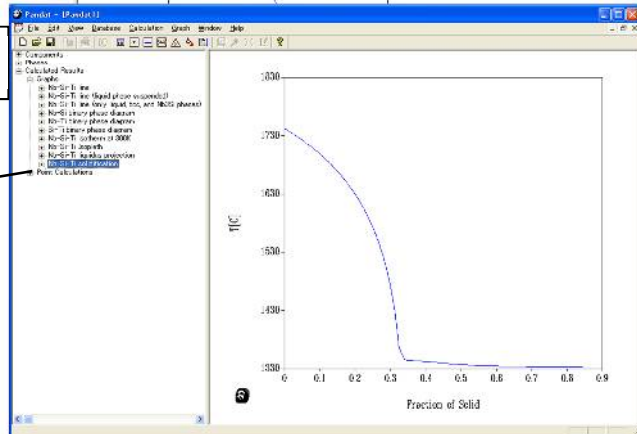


「開く」をクリックすると計算処理を始めます。

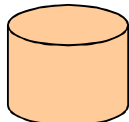
計算処理中



計算終了後



③ 計算タイトルをクリックし、
計算結果を見る。



④ 利用者が独自に定義した
テーブルを見る。
ファイル名や各欄にどの値を
出力させるかを指示できます。

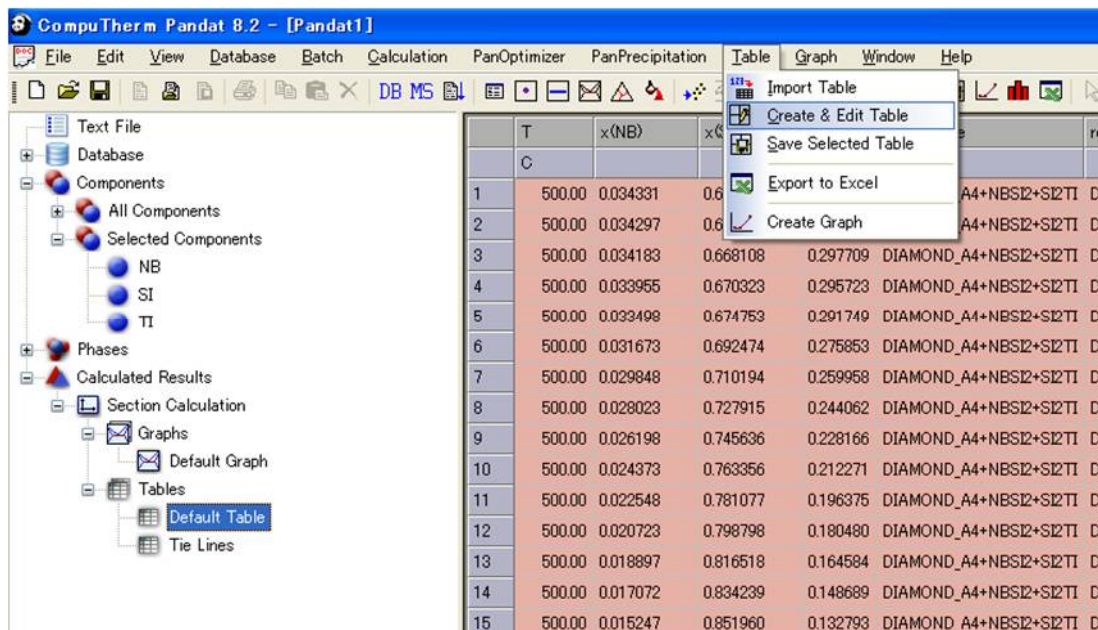
1	phaseName	T	f ₀	f ₁	D	H _m	A(Liquid)	A(Solid)	RT	CDA/CND
235	Liquid+M82	1048.18	0.322123	0.077877	37482.1	0.677877	0.322123			
236	Liquid+M82	1046.68	0.322978	0.077022	37419	0.677022	0.322978			
237	Liquid+M82	1044.99	0.323829	0.076171	37356.1	0.676171	0.323829			
238	Liquid+M82	1043.59	0.324677	0.075323	37293.4	0.675323	0.324677			
239	Liquid+M82	1041.78	0.325522	0.074478	37230.9	0.674478	0.325522			
240	Liquid+M82	1040.18	0.326364	0.073636	37168.6	0.673636	0.326364			
241	Liquid+M82	1039.58	0.327204	0.072796	37106.6	0.672796	0.327204			
242	Liquid+M82	1038.98	0.328044	0.071956	37044.8	0.671956	0.328044			
243	Liquid+M82	1038.78	0.328573	0.071427	37026.9	0.671427	0.328573			
244	Liquid+M82	1038.68	0.328990	0.070812	37012.8	0.670812	0.328990			
245	Liquid+M82+T82	1038.63	0.328990	0.070804	37122.7	0.670804	0.328990			0
246	Liquid+T82	1038.63	0.328990	0.070804	37122.7	0.670804				0
247	Liquid+M82	1038.63	0.328990	0.070804	37122.7	0.670804				0
248	Liquid+M82+T82	1038.63	0.328990	0.070804	37122.7	0.670804	7.72E+10			0
249	Liquid+T82	1038.63	0.328990	0.070804	37122.7	0.670804				1.47E+10
250	Liquid+T82	1038.43	0.329791	0.070209	37099.8	0.670209				0.000155
251	Liquid+T82	1038.00	0.330491	0.069509	37063.3	0.669509				0.000065
252	Liquid+T82	1037.23	0.331682	0.068531	36989.9	0.668531				0.000066
253	Liquid+T82	1035.63	0.332882	0.067409	36843.7	0.667409				0.000028
254	Liquid+T82	1034.00	0.334082	0.066104	36718.7	0.666104				0.000008
255	Liquid+T82	1032.43	0.335444	0.064556	36567.7	0.664556				0.000047
256	Liquid+T82	1030.63	0.336870	0.062709	36381.6	0.662709				0.000011
257	Liquid+T82	1028.93	0.338366	0.060524	36160.4	0.660524				0.000004
258	Liquid+T82	1027.43	0.339922	0.057976	35907.6	0.657976				0.000024
259	Liquid+T82	1026.08	0.341648	0.055048	35618.8	0.655048				0.000005
260	Liquid+T82	1024.43	0.343462	0.051816	35297.9	0.651816				0.000104
261	Liquid+T82	1022.83	0.345317	0.048283	34947.7	0.648283				0.000282
262	Liquid+T82	1021.23	0.347247	0.044459	34567.7	0.644459				0.000396
263	Liquid+T82	1019.43	0.349275	0.040285	34158.5	0.640285				0.000108
264	Liquid+T82	1018.08	0.351009	0.035841	33720.1	0.635841				0.000403
265	Liquid+T82	1017.23	0.351922	0.034072	33618.0	0.634072				0.000712
266	Liquid+T82=C14H10D	1017.2	0.351925	0.034075	33618.4	0.634075				0

Excel 画面

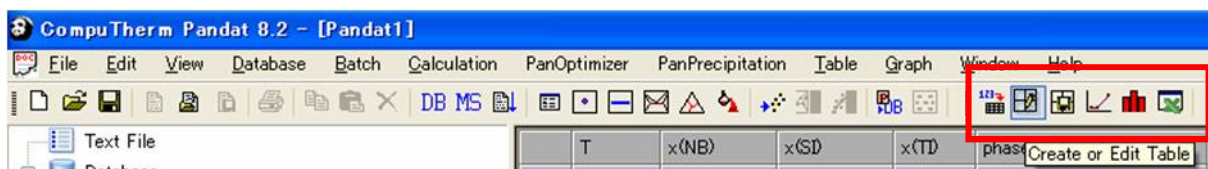
12. テーブル機能

Pandat 5.0 からテーブル機能が新規に追加されました。Pandat 8.1 ではさらに各種熱力学データをテーブル機能を用いて表示できるようになりました。メニュー Table には Import, Edit, Save, Excel, Create Graph が用意されています。

メニュー Table は下図の通りです。



ツールバーにも各アイコンが用意されています。但し、メニュー Table とツールバーともに、Explorer window（ツリー表示画面）において Tables が選択された時のみ有効となります。



12.1 Table Options

Pandat 7.0 からこのオプションを無くしました。

12.2 Edit Tables

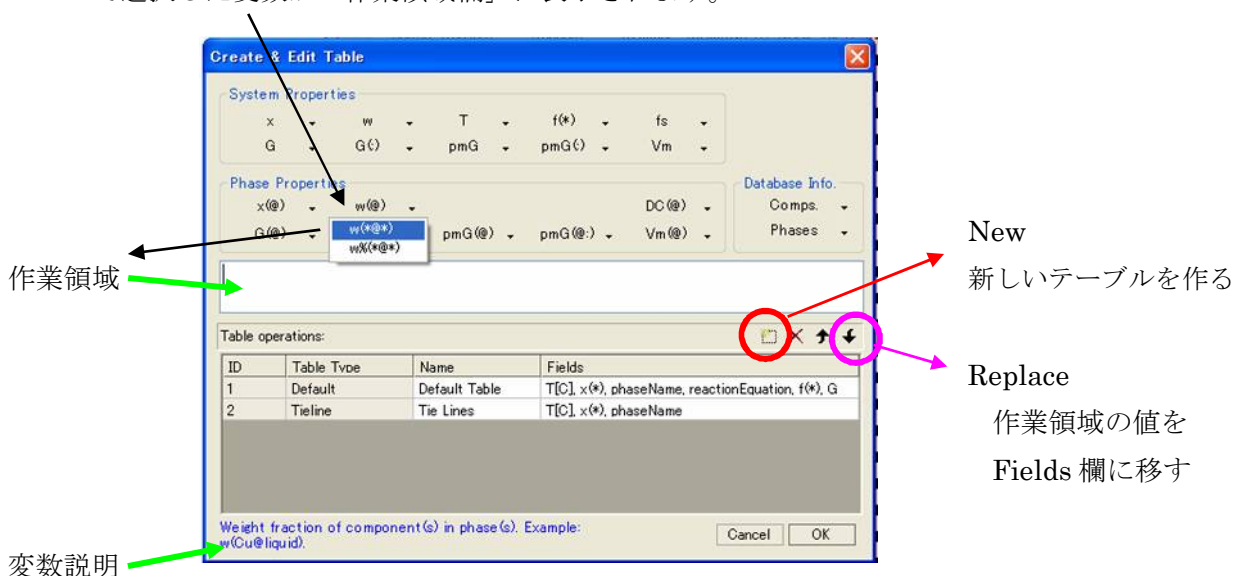
計算後、Pandat が自動的に作成したテーブルを画面上で確認した後に、「他の値を見たい」「計算結果値の単位を mass から mol に変換したい」ときなどにこの機能を利用します。

通常、新規にテーブルを定義します。

注意：Default Table を削除・変更しないでください。 Default Table 欄に定義されている変数が現在数値表テーブルとして表示され、グラフ表示もこの変数が用いられています。

変数名の一覧は表 12-1 にあります。

ここで選択した変数が「作業領域欄」に表示されます。



New ボタンをクリックすると、

新しい空白行が作られます。

水色（青色）の行

ID	Table Tvoe	Name	Fields
1	Default	Default Table	T[C], x(*), phaseName, reactionEquation, f(*), G
2	Tieline	Tie Lines	T[C], x(*), phaseName
	Default		

Replace ボタンをクリックすると

作業領域の変数が

Fields 欄に移されます。

ID	Table Tvoe	Name	Fields
1	Default	Default Table	T[C], x(*), phaseName, reactionEquation, f(*), G
2	Tieline	Tie Lines	T[C], x(*), phaseName
	Default		T[C], w%(*), w%(*@*)

OKボタンをクリックすると、新しいテーブル値が表示されます。

画面表示されるテーブル名は自動的に **Table2** と名付けられます。

計算はモル比率でしたが、
前ページにて定義した変数は
T[C], w%(*), w%(*@*) であり
これらの列値が表示されます。

	T	w%(NB)	w%(SD)	w%(TD)	w%(NB@DIAMOND_A4)	w%(S)@DIAMOND_A4	w%(T)@DIAM
	C						
1	500.00	8.80375	51.68121	39.51504	100.00000	5.4941e-015	
2	500.00	8.79692	51.71870	39.48439	100.00000	5.4941e-015	
3	500.00	8.77421	51.84330	39.38248	100.00000	5.4941e-015	
4	500.00	8.72870	52.09308	39.17822	100.00000	5.4941e-015	
5	500.00	8.63728	52.59487	38.76785	100.00000	5.4941e-015	
6	500.00	8.26600	54.63258	37.10142	100.00000	5.4941e-015	
7	500.00	7.88559	56.72045	35.39396	100.00000	5.4941e-015	
8	500.00	7.49569	58.86038	33.64393	100.00000	5.4941e-015	
9	500.00	7.09595	61.05432	31.84972	100.00000	5.4941e-015	
10	500.00	6.68599	63.30436	30.00965	100.00000	5.4941e-015	
11	500.00	6.26542	65.61267	28.12191	100.00000	5.4941e-015	
12	500.00	5.83380	67.98154	26.18465	100.00000	5.4941e-015	

このように各種熱力学量をテーブルを介して表示することが出来ます。

表 12-1 Create & Edit Table 画面にて選択可能な変数名と変数説明

System Properties		
x	x(*)	Molar fraction of component in system. Example: x(Cu).
	x%(*)	Molar percentage of component in system. Example: x%(Cu).
w	w(*)	Overall weight fraction. Example: w(Cu)
	w%(*)	Overall weight percentage. Example: w%(Cu).
T	T[C]	Temperature [C]
	T[K]	Temperature [K]
	1_T	1/Temperature [K^-1]
f(*)	phaseName	Names of phases in equilibrium
	reactionEquation	Reaction equations
	invariantReaction	Invariant reactions
	extreme (T)	extreme value of T (min or max)
	DF (*)	Driving Force of a phase
	act (*)	activity of a phase : $act(*) = \exp (DF(*)/RT)$
	ZPF (*)	Zero-Phase-Fraction of the phase
	f(*)	Phase molar fraction(s). Example: f(liquid).
	fw(*)	Phase weight fraction(s). Example: fw(liquid).
	fv(*)	Phase volume fraction(s). Example: fv(fcc).
f%(*)	Phase molar percentage(s). Example: f%(liquid).	
fw%(*)	Phase weight percentage(s). Example: fw%(liquid).	
fv%(*)	Phase volume percentage(s). Example: fv%(fcc).	
fs	Hm	Total enthalpy of system during solidification.
	H_Latent	Latent heat during solidification with Scheil model.
	H_tot	Total enthalpy of system during solidification.
	fs	Total phase fraction of solid phase (accumulated) during solidification
fl	fl	Phase fraction of liquid phase during solidification.
	G	Gibbs energy of system.
	H	Enthalpy of system.
	S	Entropy of system.
Cp	Cp	Heat capacity of system.
	G(:phase<*>)	Gibbs energy of system with given reference state. Example: G(:liquid<Cu>,liquid<Al>).
	H(:phase<*>)	Enthalpy of system with given reference state. Example: H(:liquid<Cu>,liquid<Al>).
	S(:phase<*>)	Entropy of system with given reference state. Example: S(:liquid<Cu>,liquid<Al>).
pmG	a(*)	Activity of component in system. Example: a(Cu).
	mu(*)	Chemical potential of component(s) in system. Example: mu(Cu).
	pmG(*)	Partial Gibbs energy of component(s) in system. Example: pmG(Cu).
	pmH(*)	Partial enthalpy of component(s) in system. Example: pmH(Cu).
	pmS(*)	Partial entropy of component(s) in system. Example: pmS(Cu).
	pmCp(*)	Partial heat capacity of component(s) in system. Example: pmCp(Cu).

表 12-1 Create & Edit Table 画面にて選択可能な変数名と変数説明 (続)

System Properties		
pmG(:)	a(*:phase)	Activity of component in system with given reference state. Example: a(Cu:liquid).
	mu(*:phase)	Chemical potential of component(s) in phase(s) with given reference state. Example: mu(Cu:liquid).
	pmG(*:phase)	Partial Gibbs energy of component(s) in system with given reference state. Example: pmG(Cu:liquid).
	pmH(*:phase)	Partial enthalpy of component(s) in system with given reference state. Example: pmH(Cu:liquid).
	pmS(*:phase)	Partial entropy of component(s) in system with given reference state. Example: pmS(Cu:liquid).
	pmCp(*:phase)	Partial heat capacity of component(s) in system with given reference state. Example: pmCp(Cu:liquid).
Vm	Vm	molar volume of system
	density	density of system
	MW	Molecular weight of system
Phase Properties		
x (@)	x(*@*)	Molar fraction of component(s) in phase(s). Example: x(Cu@liquid).
	x%(*@*)	Molar percentage of component(s) in phase(s). Example: x%(Cu@liquid).
	y(*@*)	Site fraction of species in a phase. Example: y(cu@fcc).
w(@)	w(*@*)	Weight fraction of component(s) in phase(s). Example: w(Cu@liquid).
	w%(*@*)	Weight percentage of component(s) in phase(s). Example: w%(Cu@liquid).
DC(@)	M(*@*)	Mobility of species in a phase
	DC(*,J@*:N)	Chemical diffusivity of species in a phase. J=gradient species, N=reference species (N cannot be *)
	DT(*@*)	Trace diffusivity of species in a phase
	logM(*@*)	Logarithm (base 10) of mobility of species in a phase
	logDC(*,J@*:N)	Logarithm (base 10) of chemical diffusivity of species, J=gradient species, N=reference species (N cannot be *)
	logDT(*@*)	Logarithm (base 10) of trace diffusivity of species in a phase
G(@)	G(*)	Gibbs energy of phase(s). Example: G(liquid).
	H(*)	Enthalpy of phase(s). Example: H(liquid).
	S(*)	Entropy of phase(s). Example: S(liquid).
	Cp(*)	Heat capacity of phase(s). Example: Cp(liquid).
G(@:)	G(*:phase<*>)	Gibbs energy of phase(s) with reference state. Example: G(liquid:FCC_A1<Al>,FCC_A1<Cu>).
	H(*:phase<*>)	Enthalpy of phase(s) with reference state. Example: H(liquid:FCC_A1<Al>,FCC_A1<Cu>).
	S(*:phase<*>)	Entropy of phase(s) with reference state. Example: S(liquid:FCC_A1<Al>,FCC_A1<Cu>).
	Cp(*:phase<*>)	Heat capacity of phase(s) with reference state. Example: Cp(liquid:FCC_A1<Al>,FCC_A1<Cu>).

表 12-1 Create & Edit Table 画面にて選択可能な変数名と変数説明 (続)

Phase Properties		
pmG(@)	a(*@*) mu(*@*) pmG(*@*) pmH(*@*) pmS(*@*) pmCp(*@*)	Activity of component in phase(s). Example: a(Cu@fcc). Chemical potential of component in phase(s). Example: mu(Cu@fcc) Partial Gibbs energy of component in phase(s). Example: pmG(Cu@fcc). Partial enthalpy of component in phase(s). Example: pmH(Cu@fcc). Partial entropy of component in phase(s). Example: pmS(Cu@fcc). Partial heat capacity of component in phase(s). Example: pmCp(Cu@fcc).
pmG(@:)	a(*@*:phase) mu(*@*:phase) pmG(*@*:phase) pmH(*@*:phase) pmS(*@*:phase) pmCp(*@*:phase)	Activity of component in phase(s) with reference state. Example: a(Cu@fcc:liquid). Chemical potential of component(s) in phase(s) with reference state. Example: mu(Cu@liquid:fcc). Partial Gibbs energy of component(s) in phase(s) with reference state. Example: pmG(Cu@liquid:liquid). Partial enthalpy of component(s) in phase(s) with reference state. Example: pmH(Cu@liquid:liquid). Partial entropy of component(s) in phase(s) with reference state. Example: pmS(Cu@liquid:liquid). Partial heat capacity of component(s) in phase(s) with reference state. Example: pmCp(Cu@liquid:liquid).
Vm(@)	Vm(*) density(*) MW(*) surfaceTension(*) viscosity(*)	molar volume of phase(s) density of phase(s) Molecular weight of a phase(s) Surface tension of phase Viscosity of liquid phase

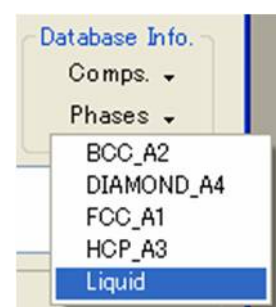
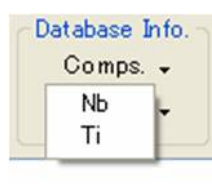
Database Info.

Comps.

現在選択中の元素名

Phases

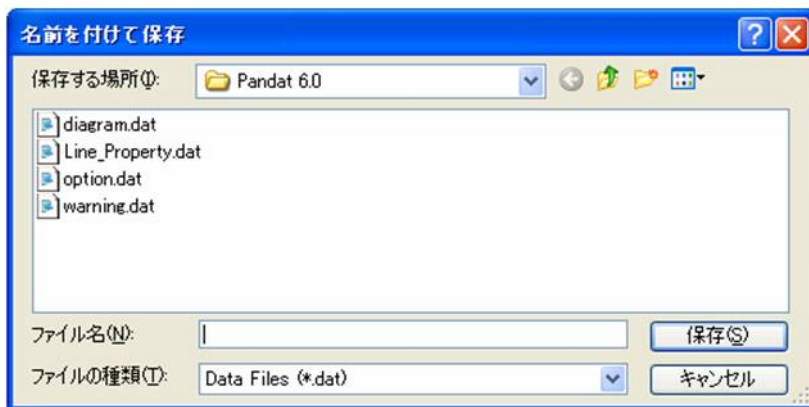
現在選択中の相名



12.3 Save Table

画面表示中のテーブル値をファイルに保存できます。 テーブル定義を保存するのではなく、テーブルの中身（数値）を保存します。

ファイルの1行目には変数名が書き込まれます。 列はタブで区切られます。



画面表示中の値を
コピー
メニュー Edit の
Select All
Copy
を利用できます。

WORD や EXCEL に
その値（数値表）を貼り付け
ることが出来ます。

w(ti)	t [c]
0.137587	1909.66
0.137599	1909.56
0.137622	1909.36
0.137668	1908.96
0.137759	1908.16
0.137938	1906.56
0.138281	1903.36
0.138609	1900.16
0.138923	1896.96
0.139223	1893.76
0.139510	1890.56

12.4 Excel

テーブル値を直接 Excel に貼り付けます。

12.5 Create Graph

画面表示されている数値テーブルに関し、2つ以上の列を選択することによりその図を表示させることができます。

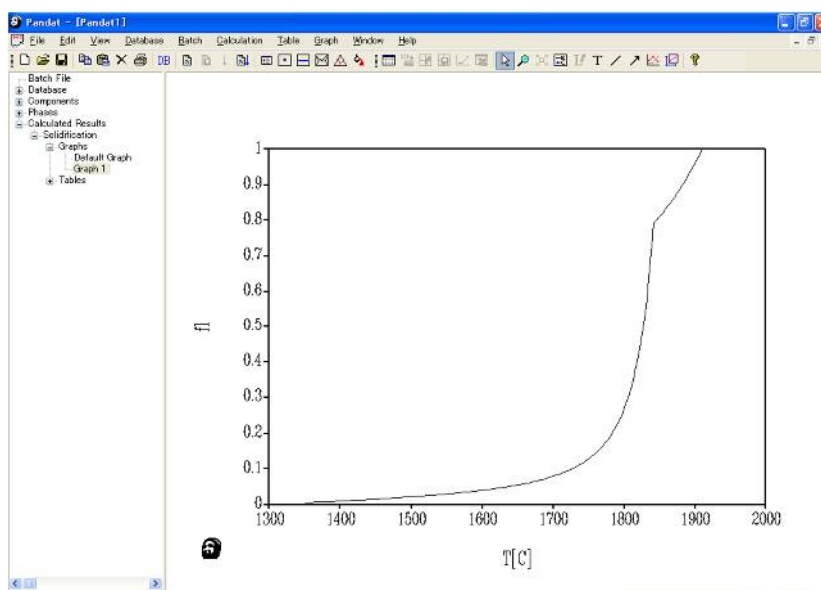
最も左側に選択した列がX軸となります。 右側に選択した列がY軸となります。

列を指定するにはタイトル行をクリックします。 2列目を指定する際には **Ctrl** キーを押しながらタイトル行をクリックします。

そしてメニュー **Table** → **Create Graph** を選択します。

T [C]	x(Nb)	x(Si)	x(Ti)	G [J]	phaseName	f_l	f_s
1909.06	0.630000	0.160000	0.210000	-114816.70	Liquid+Nb3Si	1.000000	0.000000
1909.56	0.630016	0.159962	0.210022	-114820.78	Liquid+Nb3Si	0.999577	0.000423
1909.36	0.630048	0.159886	0.210066	-114821.30	Liquid+Nb3Si	0.998734	0.001266
1908.96	0.630113	0.159734	0.210153	-114822.31	Liquid+Nb3Si	0.997052	0.002948
1908.16	0.630243	0.159431	0.210326	-114824.19	Liquid+Nb3Si	0.993712	0.006288
1906.56	0.630507	0.158826	0.210667	-114827.41	Liquid+Nb3Si	0.987120	0.012880
1903.36	0.631046	0.157624	0.211330	-114831.73	Liquid+Nb3Si	0.974282	0.025718
1900.16	0.631595	0.156434	0.211971	-114714.58	Liquid+Nb3Si	0.961390	0.038110
1896.96	0.632153	0.155255	0.212592	-114597.58	Liquid+Nb3Si	0.949920	0.050080
1893.76	0.632700	0.154077	0.213199	-114480.74	Liquid+Nb3Si	0.939950	0.061850

テーブルから
作成した図



12.6 Import

この機能を利用してあらかじめ用意しておいたデータ（例えば実験数値）を Pandat に取り込むことができます。データはアスキーファイル（テキストファイル、*.txt もしくは *.dat）として用意します。データの1行目は「列の名前」にする必要があります。

注意：「列の名前」は重複させないで下さい。同じ名前を使わないで下さい。

データの列は空白文字もしくはタブでセパレートします。

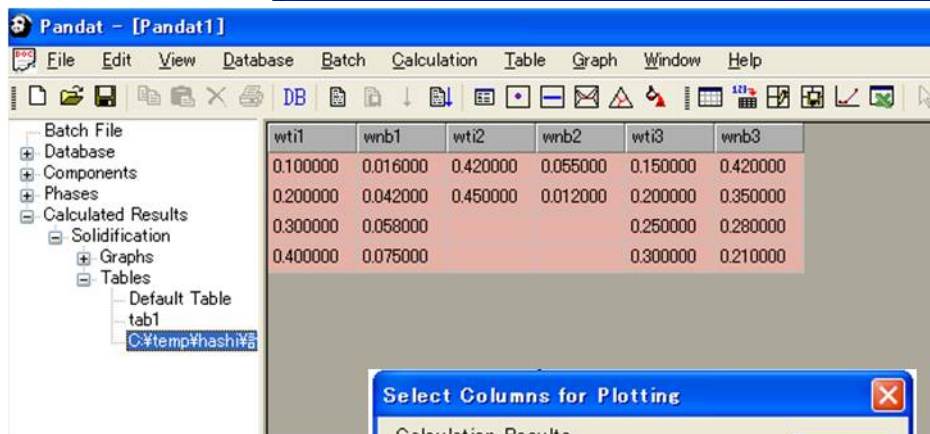
メモ帖などを用いて
まずデータファイルを作ります。

wt i1	wnb1	wt i2	wnb2	wt i3	wnb3
0.10	0.016	0.42	0.055	0.15	0.42
0.20	0.042	0.45	0.012	0.20	0.35
0.30	0.058			0.25	0.28
0.40	0.075			0.30	0.21

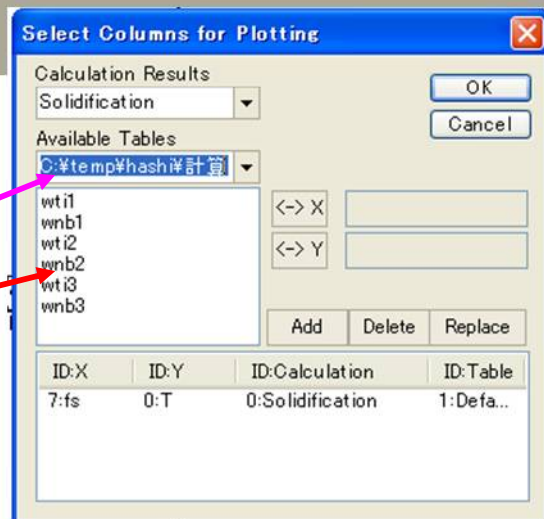
計算後、Import を実行します。



Pandat にデータを取り込む
ことが出来ます。



このデータファイル名がテーブル名となり、
図を作成する際に Available Tables 項にて
選択できます。ファイルの1行目に定義した
「列の名前」一覧が表示されます。
図のX変数とY変数を選択出来るようになります。



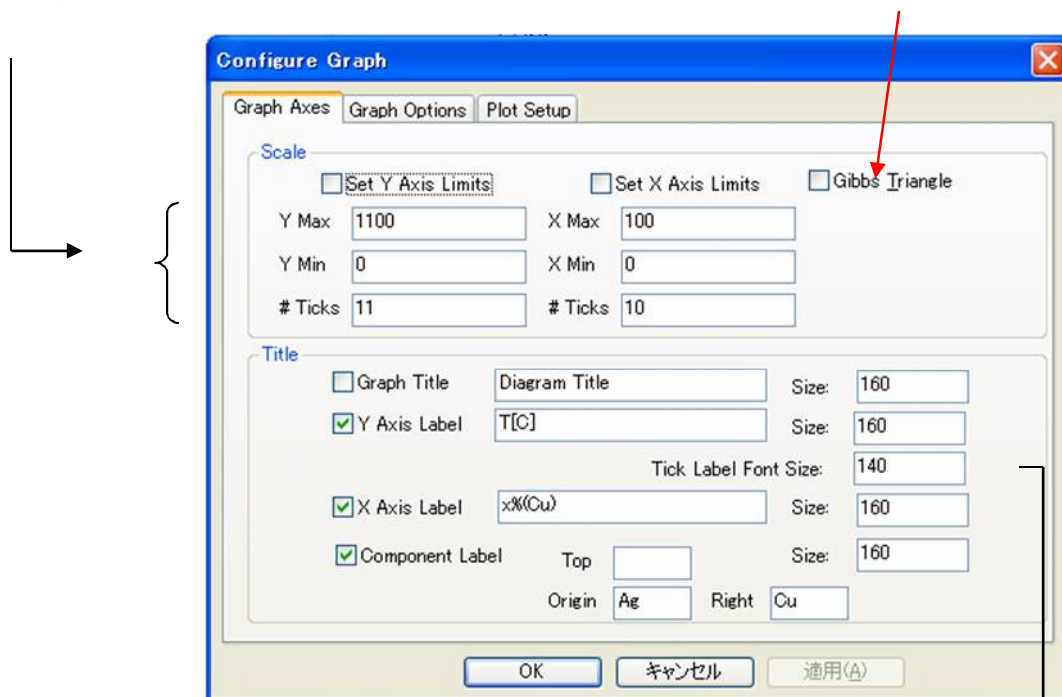
13. 1 グラフ機能 グラフオプション

計算結果の図をカスタマイズできます。

Axes 画面

1. 軸値の範囲を変更する。

2. 三角状態図表示を指示する。



3. グラフのタイトルを入力できます。(日本語入力不可)

図タイトルのサイズを変更できます。

4. Y軸とX軸のタイトルを変更できます。(日本語入力不可)

軸タイトルのサイズを変更できます。

5. 軸値のサイズを変更できます。

推奨値： 160

Options 画面

①このラインを選択してから

②それぞれの線の色、線幅を変更できます。

Plot Style を symbol にすると計算点上にシンボルマークを表示できます。

タイライン (共役線) の線数

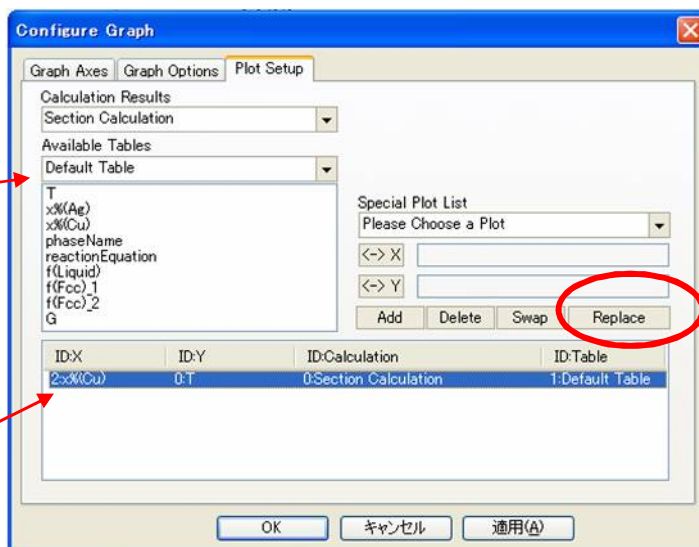
Plot Setup 画面

X軸とY軸の変数を変更できます。

通常は Default Table が自動的に作られ、このテーブルを用いてグラフ表示されます。

テーブルに含まれる変数一覧が表示されます。どの変数をX軸にするかY軸にするか選択できます。

既存の設定行を選び Replace ボタンをクリックすると表示する変数を変更できます。



表示したい変数がテーブル Default Table に存在しない場合、新規にテーブルを作成し、表示したい変数をそのテーブル中に定義する必要があります。

モル比率 (mol fraction, x) を重量比率(mass fraction, w) に変えたい場合やその逆の場合、新規にテーブルを作成し、表示したい変数をそのテーブル中に定義する必要があります。

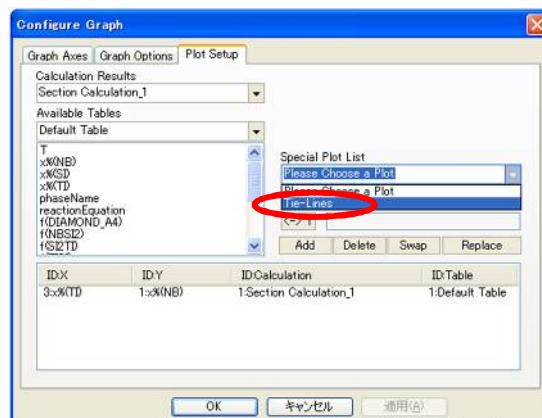
タイラインの表示

右側の Special Plot Set

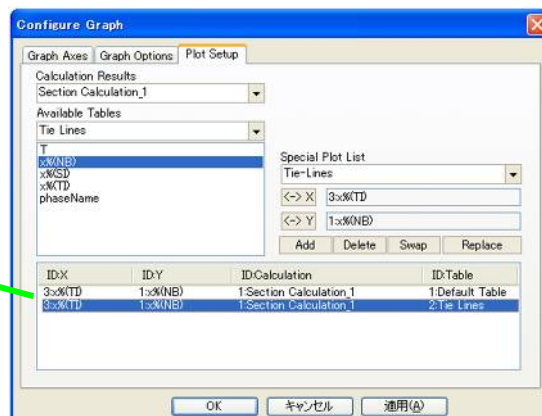
から Tie-Lines

をプルダウン選択し、

Add ボタンをクリックします。




2行目が表示されたことを確認し適用ボタンをクリックします。



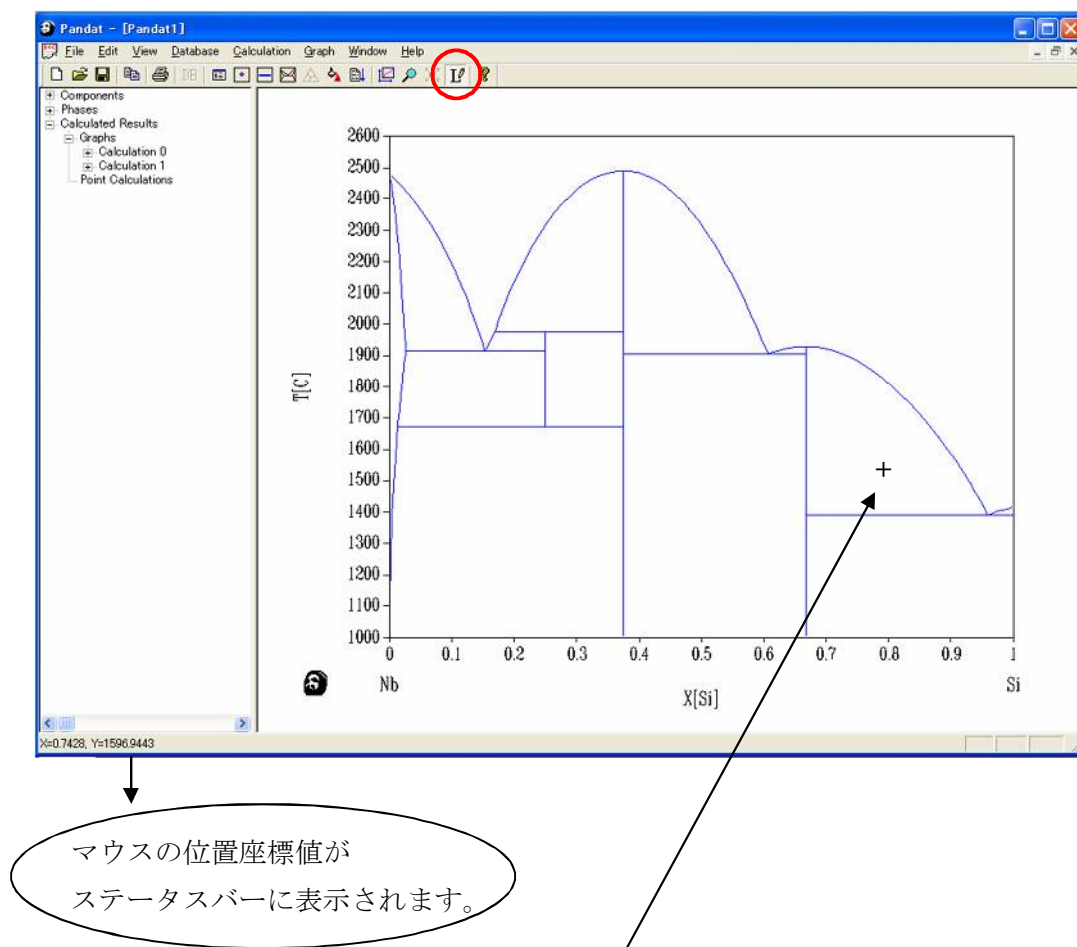
13. 2 グラフ機能 ラベルモード

2元系状態図、多元系縦断面図、多元系等温断面図、多元系液相面図において領域のラベルを付けることができます。ラベルとは平衡相の名前です。この平衡相の名前はデータベースに記述されているものが表示されますが、例えば、BCC を α にテキスト変更できます。

図上を一度クリックします。次に、

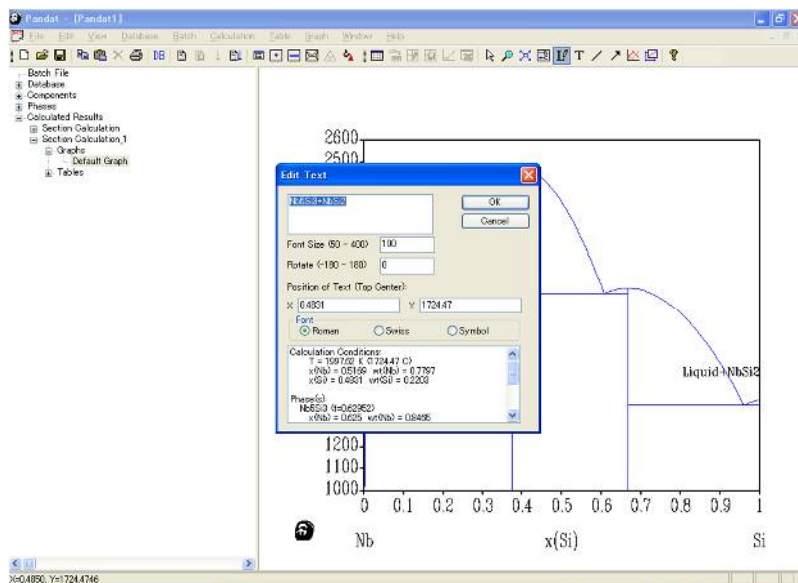
 アイコンを1回クリックするとラベルモードがオンになります。もう1回クリックするとオフに戻ります。もしくはメニュー「Graph」→「Label Mode」を選択するとラベルモードがオンになり、もう一度選択するとオフになります。

ラベルモードをオンにすると、マウス形状が+印になります。




- ② 知りたい位置にてマウスを一度左クリックします。

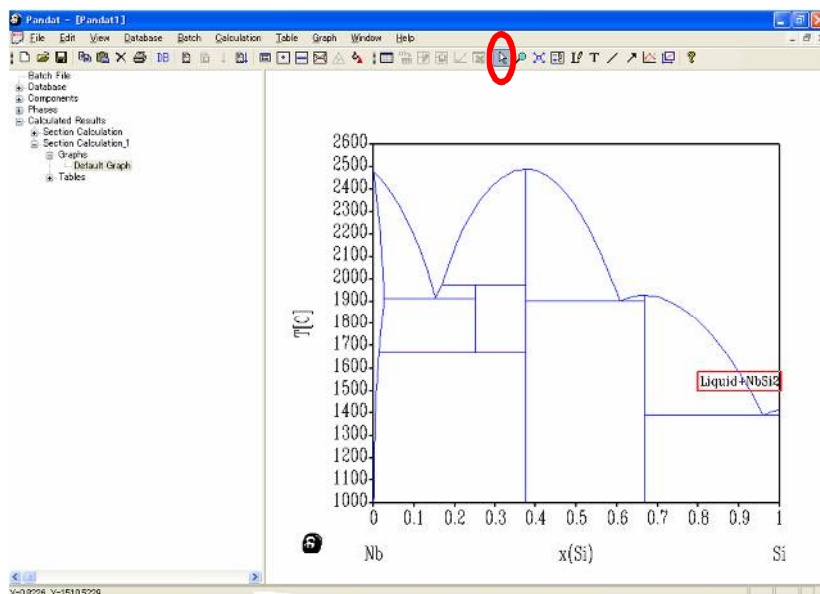
- ② マウスの位置にて1点平衡計算をした後に、Edit Text 画面が表示されます。



Edit Text 画面には計算結果が表示され、この画面でラベルの文字、文字サイズ、表示角度、フォント種類を指定できます。OKボタンをクリックすると、状態図上にラベルが表示されます。ラベルは何個でも表示できます。

- ③ ラベルの文字を変更したい場合や、ラベルの位置を変更したい場合や、ラベルを削除したい場合、 ポインターを選択後、そのラベルテキスト上をクリックします。ラベルが赤枠で囲まれます。ラベルを移動できます。


ラベルの赤枠上で右クリックすると、ラベルのコピー、削除、変更ができます。



13. 3 グラフ機能 ズームモード

計算結果の図を拡大表示できます。

数値を入力する方法は、13.1 節にてズーム可能です。数値ではなく、マウス操作だけでもズームできます。拡大表示は四角形状範囲で指定します。拡大表示したい領域の左上を先ずクリックし、クリックしたまま領域の右下までマウスを動かし、マウスボタンを離します。この操作によりズームインします。

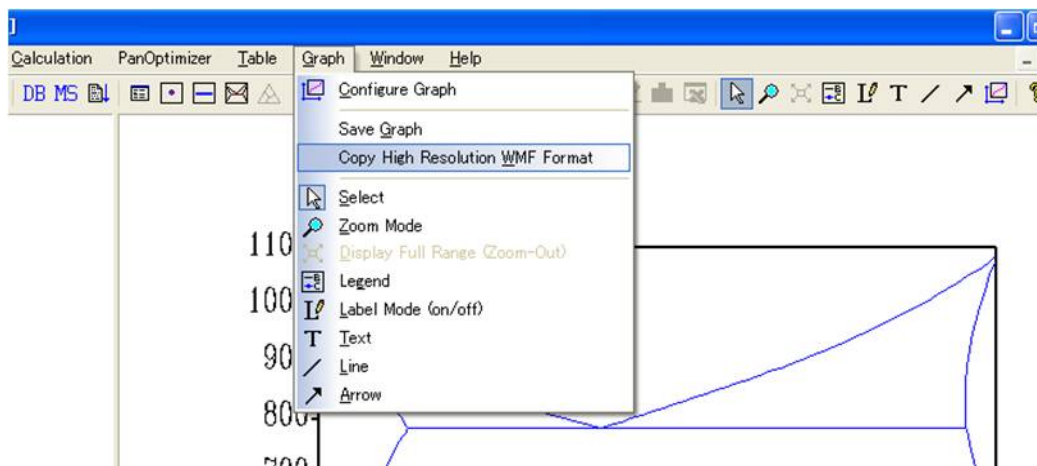
Display Full Range (Zoom-out)  を選択することにより、拡大表示から全体表示に戻ります。

13. 4 グラフ機能 グラフコピー

計算結果は端末画面上に表示されます。 この計算結果グラフ・イメージを WMF 形式でクリップボードにコピーすることができます。

Microsoft-Word や PowerPoint に貼り付けるためには、WMF 形式をお勧めします。

メニュー → Graph → Copy WMF Format



形式を選択して貼り付け

Windows メタファイル
形式で貼り付ける



他の方法：

Windows のポストスクリプト・プリンター・ドライバーを経由させ、印刷イメージをファイルに保存します。「File」→「Print」→ ポストスクリプト・プリンターを選択し、「ファイルへ出力」をチェックします→「OK」を選択します。 ファイル名を指定し、ポストスクリプトファイルを作成します。

このファイルをイラストレータ等の他ソフトウェアで読み込みます。

13. 5 グラフ機能 グラフの保存

お勧め

図を表示させ

メニュー Graph から「Copy High Resolution WMF Format」を選択します。
その後、PowerPoint 等にてペーストできます。

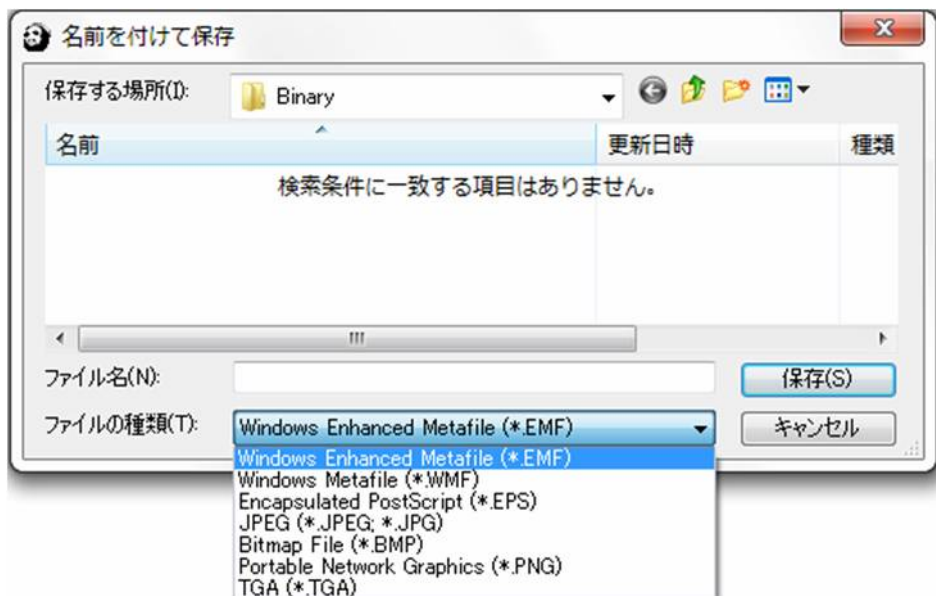
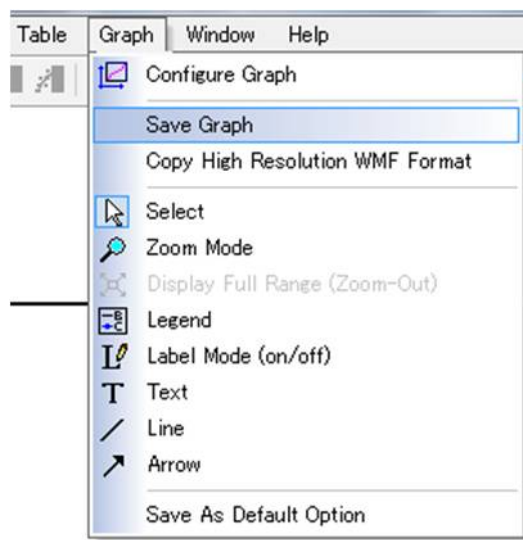
[形式を選択して貼り付け、Windows メタファイル]

その他

図を表示させ、

メニュー Graph から「Save Graph」を選択します。

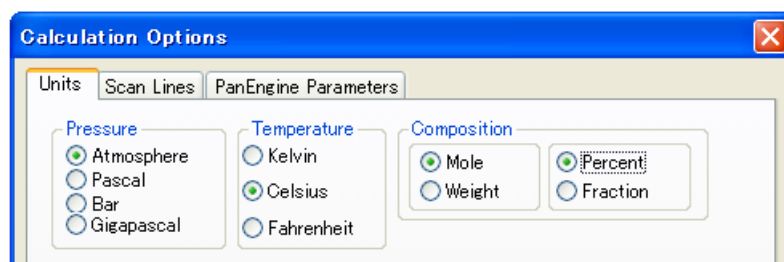
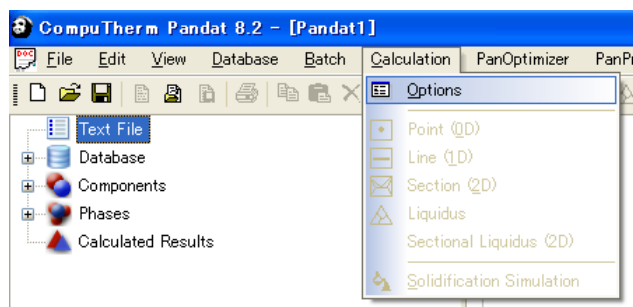
ファイルの種類を選択し、ファイルに保存できます。



14. お勧めの操作方法

14.1 Pandat 8.2 を起動したら、 先ず単位を決めましょう。

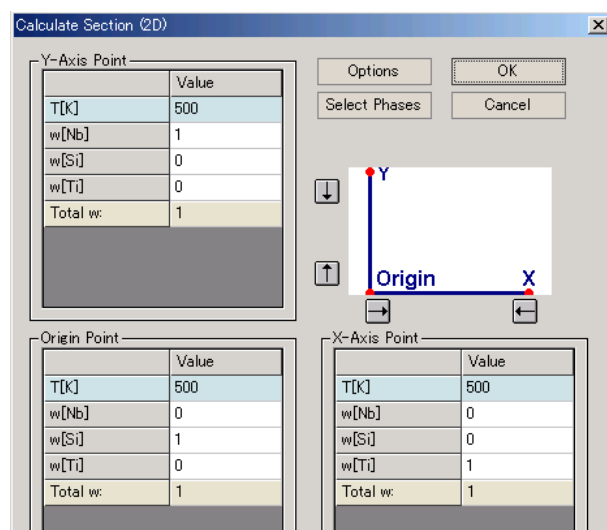
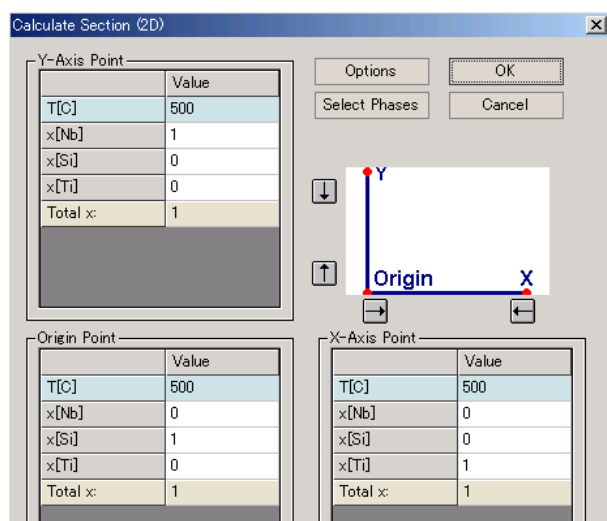
計算状態図をイメージし、
温度はケルビンか°Cか、
濃度は mol か mass か、
選択して OK ボタンを
クリックします。



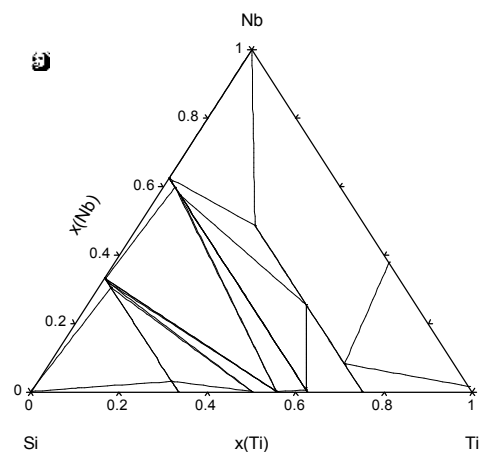
選択したオプションにより、計算指示画面の単位が変わります。

モルの場合 X(元素名)

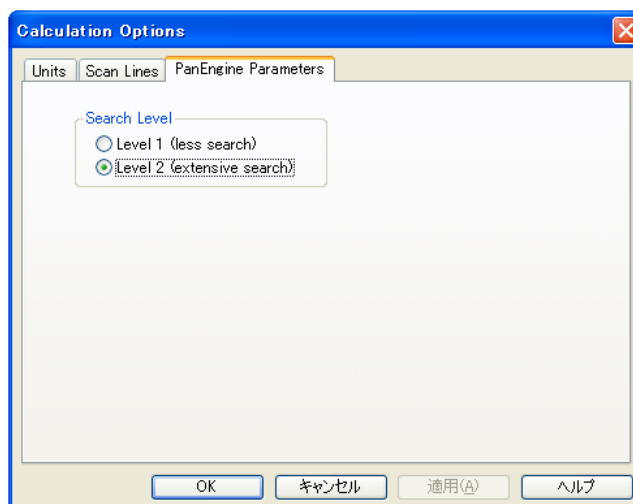
重量の場合 W(元素名)



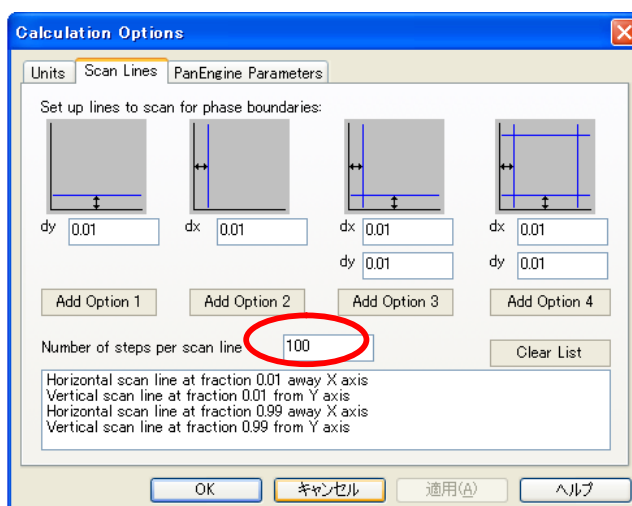
Nb-Si-Ti 3元系 500°C
等温断面図の計算結果
(モル比率単位)



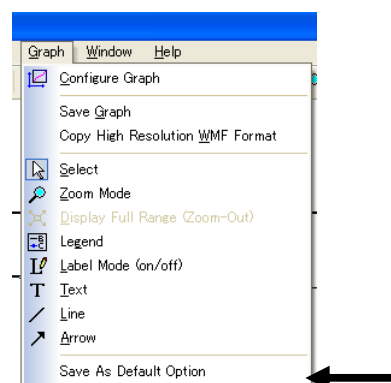
単位の他に、パラメータ・タグにて Level 2 にしておくことをお勧めします。



最後に、スキャンライン・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。

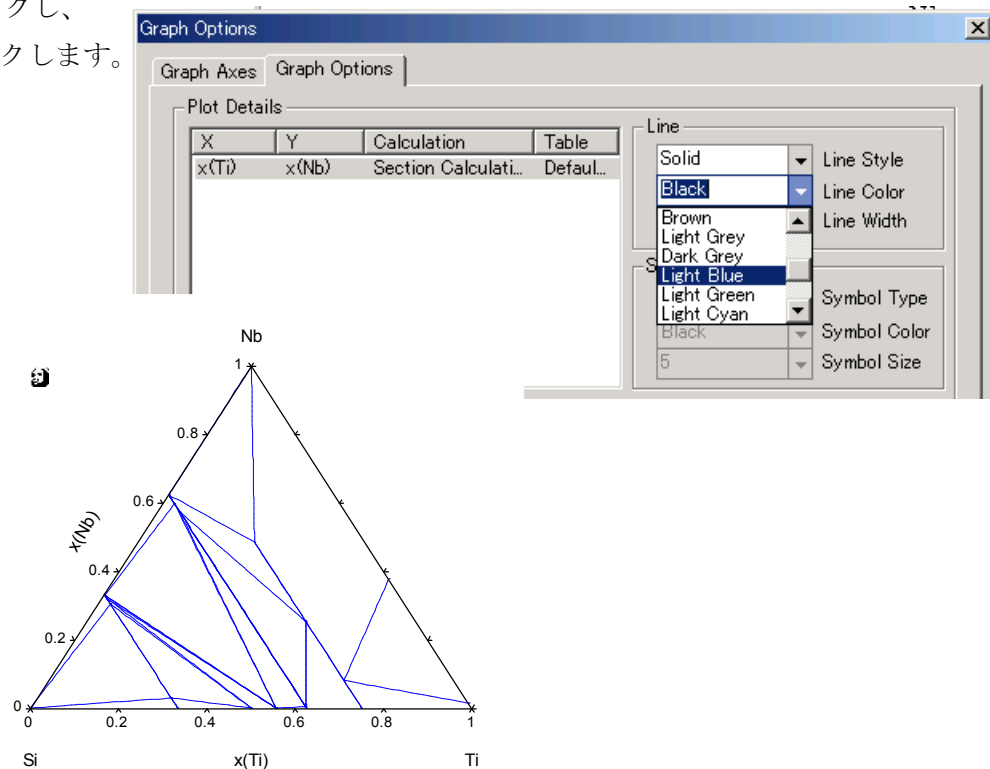


グラフの表示フォントサイズなどの情報を保存できます。



14. 2 境界線を青色にする方法

アイコン  もしくは、メニューから Graph → Configure を選択します。
Graph Options 画面にて、Line Color を Light Blue にします。
適用ボタンをクリックし、
OK ボタンをクリックします。

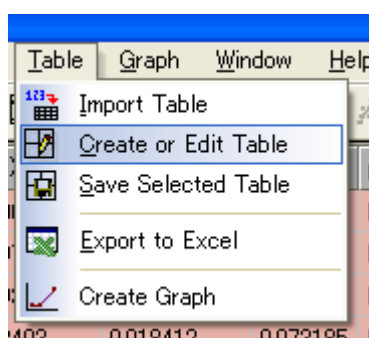
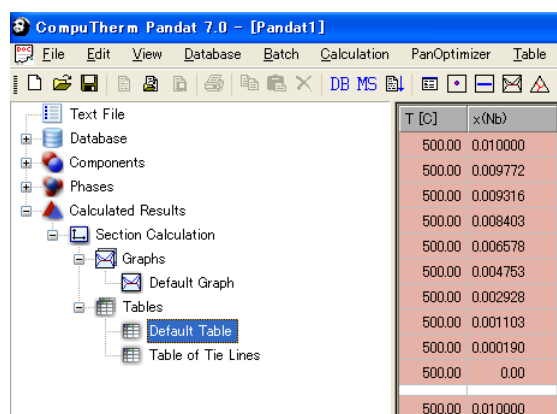


14. 3 軸の単位をモル比率から重量比率に変える方法 $x \rightarrow w$

単位設定を変えて再度計算し直すことも出来ますが、ここでは一度計算した結果を利用することにします。

テーブルを作り、作成したテーブルを用いて新しく図を表示させる手順になります。

まず、画面左側の Tables → Default Table を選択します。 選択することにより、数値表が画面上に表示され、Table メニューが使用できるようになります。

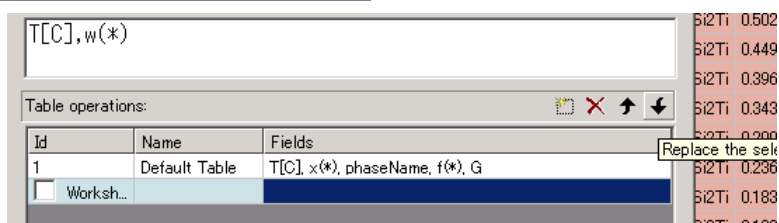
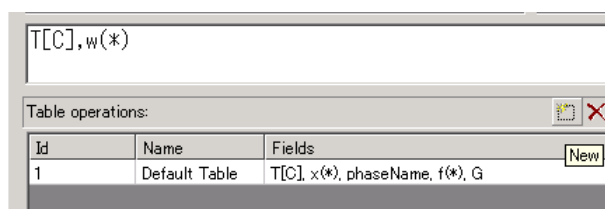



T [C]	x(Nb)
500.00	0.010000
500.00	0.009772
500.00	0.009316
500.00	0.008403
500.00	0.006578
500.00	0.004753
500.00	0.002928
500.00	0.001103
500.00	0.000190
500.00	0.00
500.00	0.010000

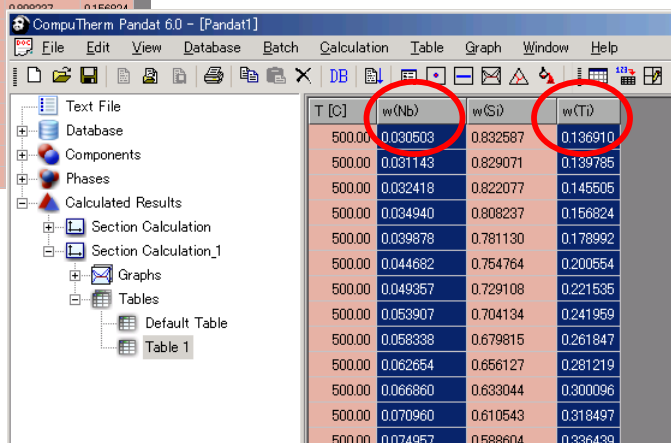
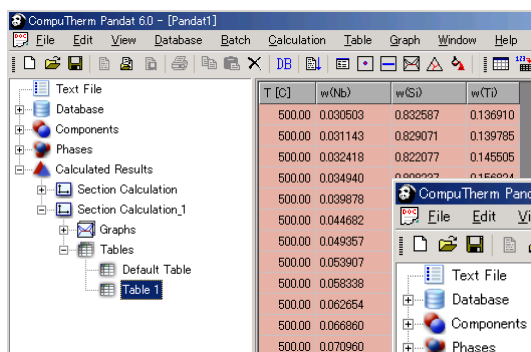
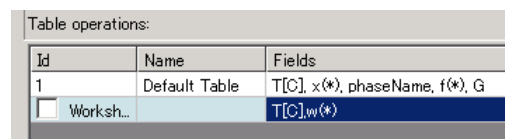
Table → Create Edit Table を選択します。

まず温度 T[C]を選択します。
作業領域に変数 T[C] が記録されます。
次に、重量濃度 W(*) を選択します。
作業領域が T[C],w(*) となります。

Table operations: 欄の New ボタンをクリックすると水色のテーブル行が新規に追加されます。次に Replace ボタンをクリックすると、作業領域に記録した変数名が Fields 欄にペーストされます。

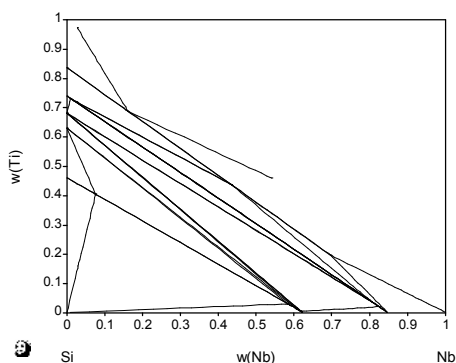


OK ボタンをクリックすると、テーブル名 Table2 が自動的に付けられ、その数値が表示されます。



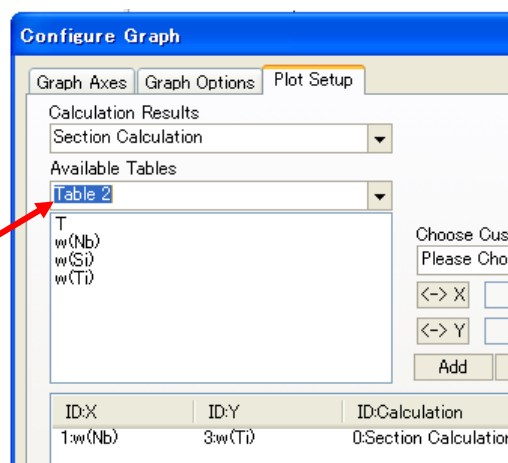
グラフ表示させる
2列を Ctrl キーを
利用して選びます。

Table → Create Graph を選択します。

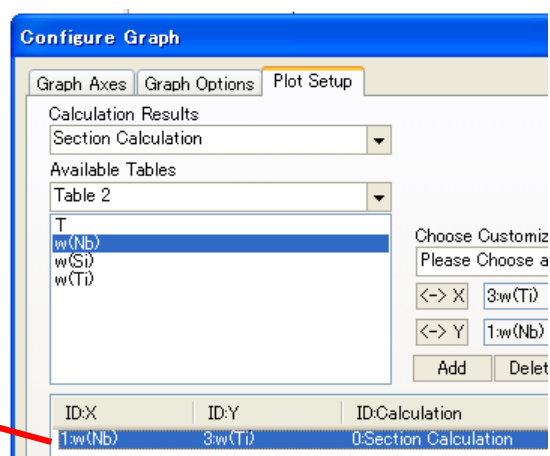


ボタンもしくは Graph → Configure
を選択し、表示させる軸変数を決めます。
横軸を Ti、縦軸を Nb にしましょう。

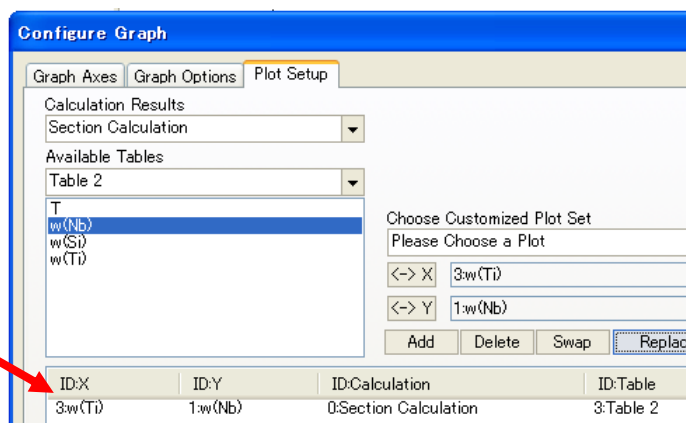
Available Tables から Table1 を選択します。
W(Ti) を選択し、中央の $\leftrightarrow X$ ボタンをクリック
します。
W(Nb) を選択し、中央の $\leftrightarrow Y$ ボタンをクリック
します。



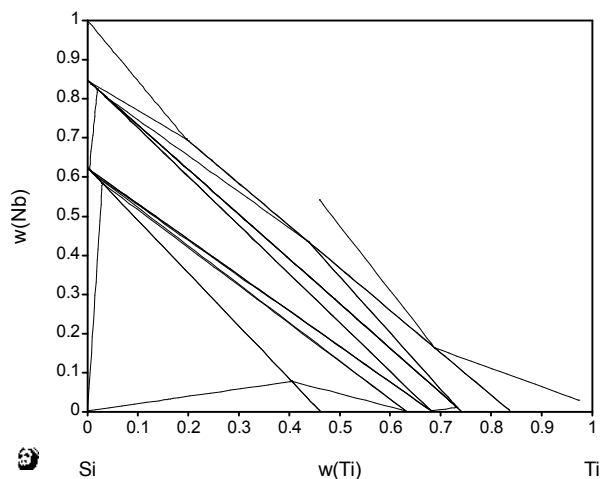
表示中の行を選択し、
Replace ボタンをクリックします。



X 軸が $w(Ti)$ 変数に、
Y 軸が $w(Nb)$ 変数にセットできました。

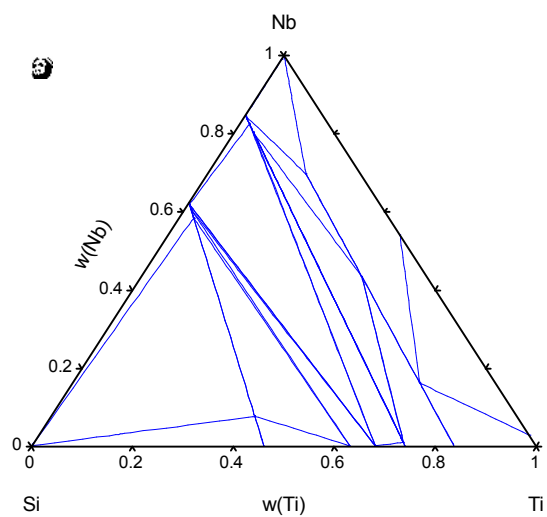


OK ボタンをクリックすると
 X 軸が mass fraction of Ti
 Y 軸が mass fraction of Nb の
 図が得られます。



境界線を青色に変えて、
 Gibbs Triangle 表示に変えると
 右図が得られます。

以上で
 Nb-Si-Ti 3元系 500°Cの
 重量比率による
 等温断面図が得られます。



14. 4 計算状態図上に印を付ける方法

テキストファイルに数値を入力します。

第1行目は列名とします。

タブで列を揃えます。

2列で1組とします。

右の例では3組あります。

数値は Ti と Nb の濃度 (mass fraction) を意味します。

wt i1	wnb1	wt i2	wnb2	wt i3	wnb3
0.10	0.016	0.42	0.055	0.15	0.42
0.20	0.042	0.45	0.012	0.20	0.35
0.30	0.058			0.25	0.28
0.40	0.075			0.30	0.21

計算状態図を表示後に

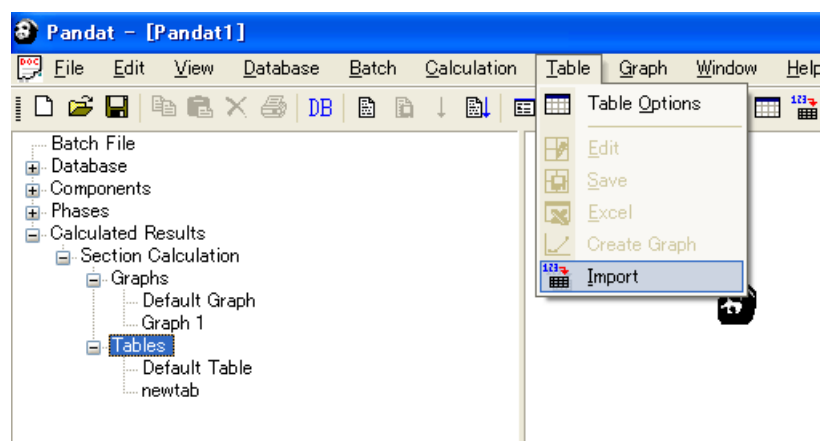
画面左側の Tables を

クリックし、その後、図上

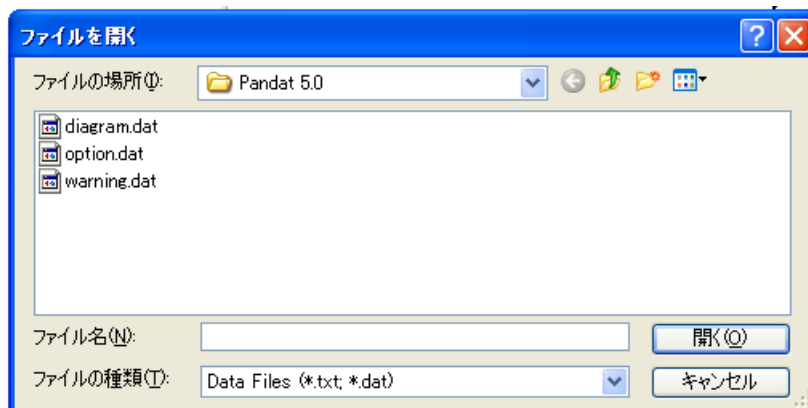
を再度クリックします。

Table → Import メニュー

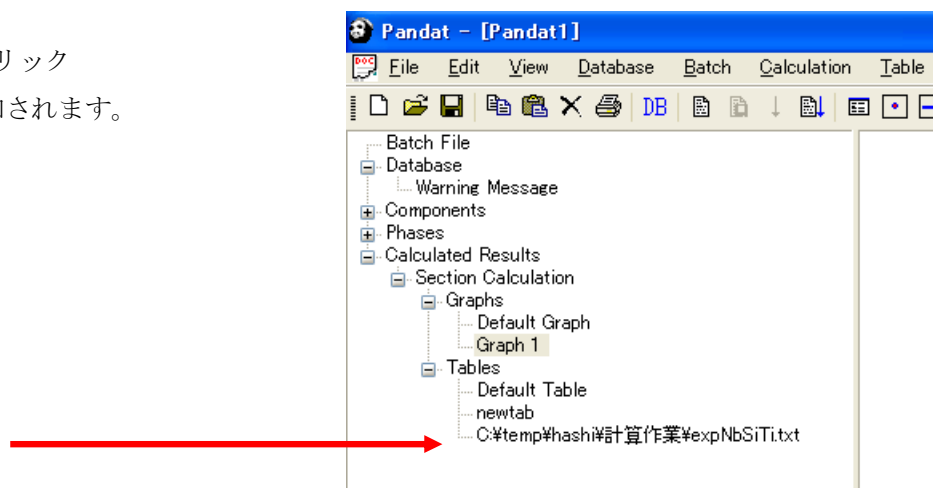
が利用可能となります。



テーブル数値表を読み込むために、ファイルを選択します。



「開く」ボタンをクリックすると、Tables に追加されます。



画面左側の
 Calculated Results
 Section Calculation
 Graphs
 Default Graph

を選択すると、先ほどの
 計算結果図が表示されます。

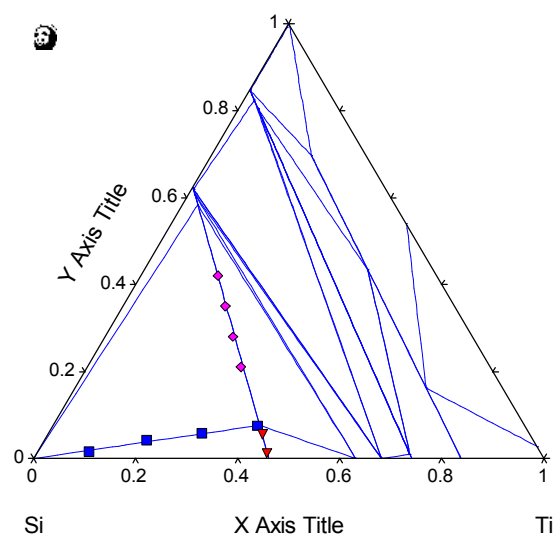
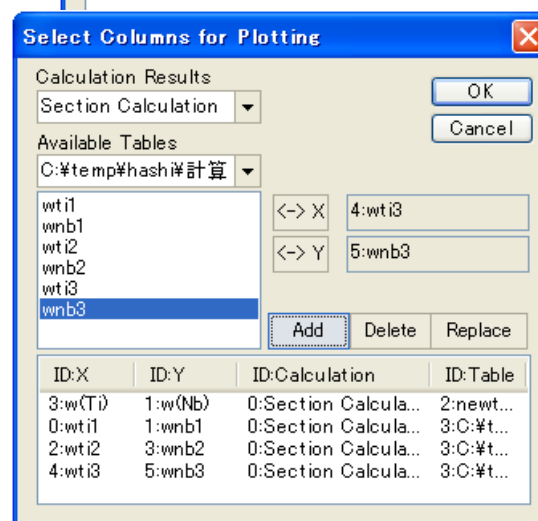
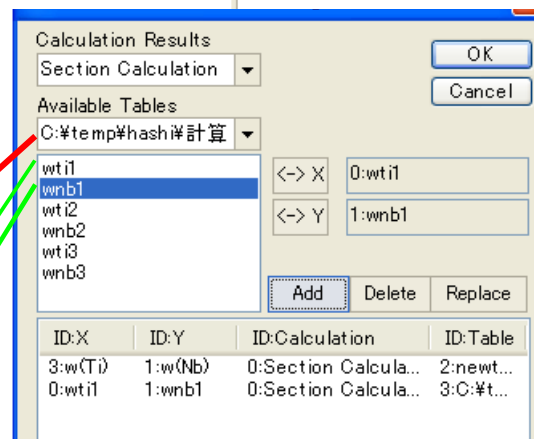
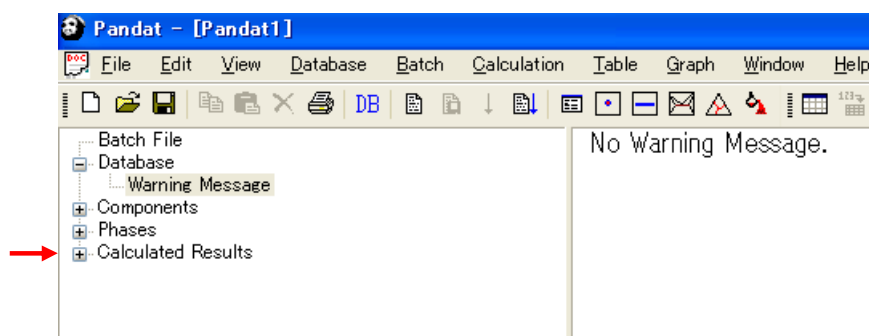
画面上を一度クリックした後、
 Graph → Configure メニュー
 Plot Setup を選択します。

Available Tables から
 自作のファイル（テーブル）を選択し、
 第1組目として、
 wt1 列を選び ボタンをクリックし、
 wnb1 列を選び ボタンをクリックします。
 そして Add ボタンをクリックします。

続けて第2組目を追加します。
 wt2 列を選び ボタンをクリックし、
 wnb2 列を選び ボタンをクリックします。
 そして Add ボタンをクリックします。

続けて第3組目を追加します。
 wt3 列を選び ボタンをクリックし、
 wnb3 列を選び ボタンをクリックします。
 そして Add ボタンをクリックします。

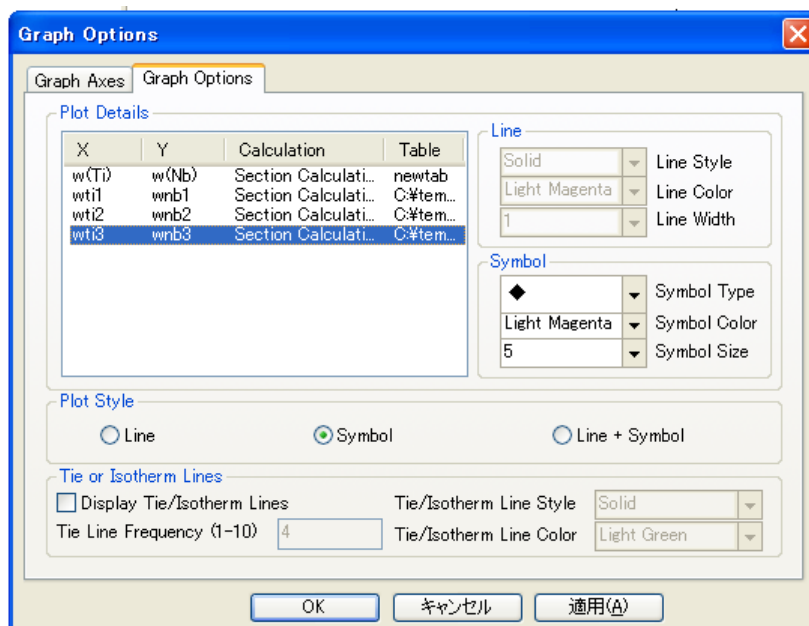
OK ボタンをクリックすると
 計算状態図上に、
 1組目の4個のデータが青色の■印で、
 2組目の2個のデータが赤色の▼印で、
 3組目の4個のデータが桃色の◆印で、
 表示されます。



印の色や大きさは

Graph → Configure

Graph Options 画面にて指定（変更）できます。



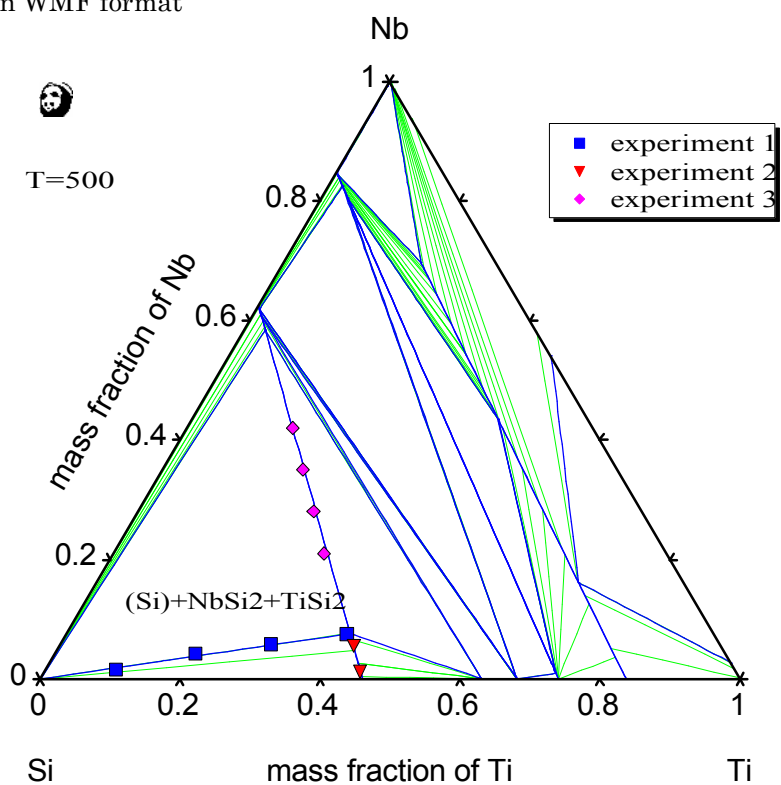
凡例は

Graph → Legend により表示できます。

図をワードファイルに貼り付ける場合、

Graph → “Copy high resolution WMF format”

を選択します。



14. 5 画面表示されているテーブル値をコピーする方法

(例： Nb-Si-Ti 3元系
500°Cの等温断面図を計算後)

計算後の Tables の Default Table
を表示させます。

コピーしたい部分を選択します。
Shift キーを利用します。

表全部の場合、先ず左端しのタイトル
部分 (灰色の T[C]) をクリックし、
Shift キーを押しながら、右端しのタイトル
部分をクリックします。

コピー操作は
Cntrl + “C”
です。

表計算ソフト上に数値を
ペースト (貼り付け) 出来ます。

T [C]	XNb	XSi	XTi	G [J]	phaseName
500.00	0.01000	0.88689	0.103131	-40215.76	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.010193	0.884686	0.105121	-40699.87	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.010579	0.880318	0.109103	-41064.46	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.011285	0.871584	0.117065	-42994.10	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.012895	0.854114	0.132991	-45969.33	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.014444	0.836645	0.148916	-49223.57	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.015984	0.819175	0.164841	-52885.91	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.017528	0.801706	0.180766	-56949.05	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.019072	0.784236	0.196692	-61403.23	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.020616	0.766767	0.212617	-66257.32	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.022160	0.749297	0.228542	-71511.41	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.023705	0.731828	0.244468	-77165.50	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.025249	0.714358	0.260393	-83219.59	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.026793	0.696889	0.276318	-89673.68	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.028337	0.679419	0.292244	-96527.77	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.029109	0.670684	0.300206	-99881.86	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.029302	0.668501	0.302197	-100000.00	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.029399	0.667409	0.303192	-100000.00	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.029464	0.666667	0.303869	-100000.00	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2

T [C]	XNb	XSi	XTi	G [J]	phaseName
500.00	0.01000	0.88689	0.103131	-40215.76	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.010193	0.884686	0.105121	-40699.87	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.010579	0.880318	0.109103	-41064.46	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.011285	0.871584	0.117065	-42994.10	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.012895	0.854114	0.132991	-45969.33	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.014444	0.836645	0.148916	-49223.57	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.015984	0.819175	0.164841	-52885.91	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.017528	0.801706	0.180766	-56949.05	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.019072	0.784236	0.196692	-61403.23	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.020616	0.766767	0.212617	-66257.32	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.022160	0.749297	0.228542	-71511.41	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.023705	0.731828	0.244468	-77165.50	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.025249	0.714358	0.260393	-83219.59	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.026793	0.696889	0.276318	-89673.68	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.028337	0.679419	0.292244	-96527.77	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.029109	0.670684	0.300206	-99881.86	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.029302	0.668501	0.302197	-100000.00	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.029399	0.667409	0.303192	-100000.00	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2
500.00	0.029464	0.666667	0.303869	-100000.00	DIAMOND_A4+TiSi2+H5Si2

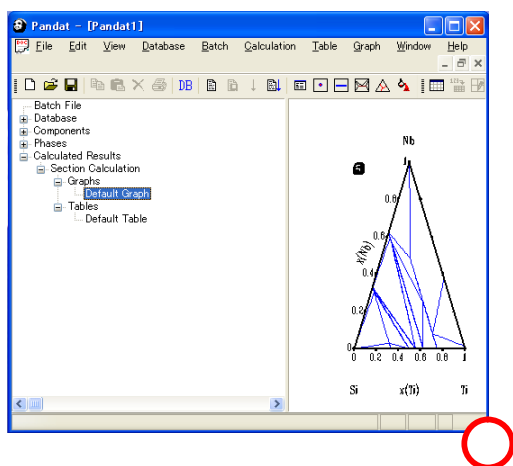
もしくはメニュー Edit の
Select All
Copy を利用できます。
そして
メニュー Table の
Export to Excel を実行します。

	A	B	C	D	E	F	G
1							
2		500	0.01	0.886869	0.103131		
3		500	0.010193	0.884686	0.105121		
4		500	0.010579	0.880318	0.109103		
5		500	0.011351	0.871584	0.117065		
6		500	0.012895	0.854114	0.132991		
7		500	0.014444	0.836645	0.148916		
8		500	0.015984	0.819175	0.164841		
9		500	0.017528	0.801706	0.180766		
10		500	0.019072	0.784236	0.196692		
11		500	0.020616	0.766767	0.212617		
12		500	0.022160	0.749297	0.228542		
13		500	0.023705	0.731828	0.244468		
14		500	0.025249	0.714358	0.260393		
15		500	0.026793	0.696889	0.276318		
16		500	0.028337	0.679419	0.292244		
17		500	0.029109	0.670684	0.300206		
18		500	0.029302	0.668501	0.302197		
19		500	0.029399	0.667409	0.303192		
20		500	0.029464	0.666667	0.303869		
21							

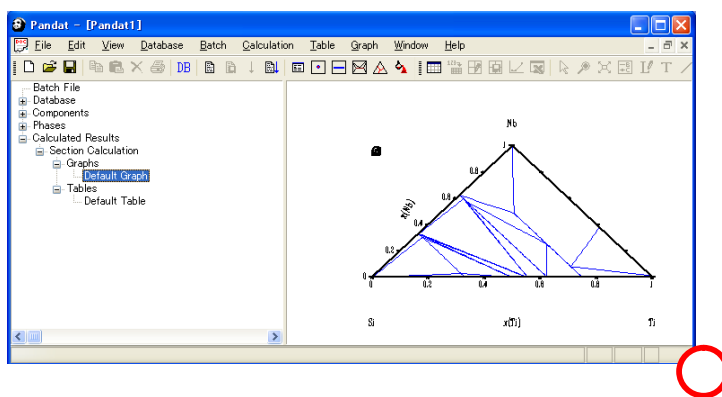
14. 6 正三角形の図を表示させる方法

正三角形を表示させるオプションはありません。
手動で形を整えます。

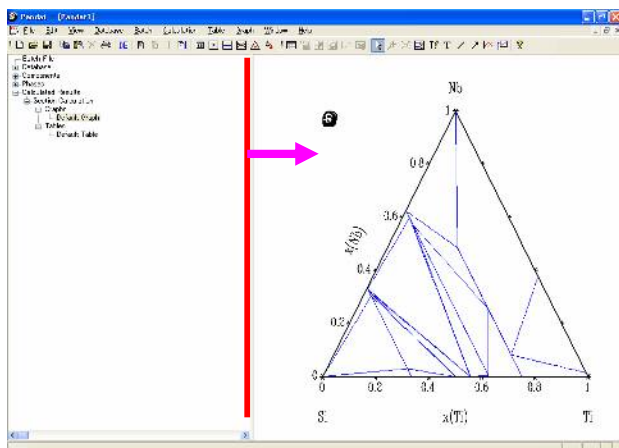
- 1) Windows 枠の右下を
左（もしくは下）に移動させると
図全体が横に縮小します。
(これは Windows の機能)



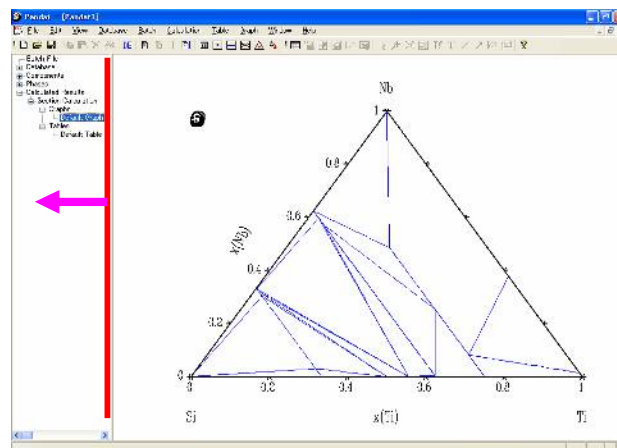
- Windows 枠の右下を
右（もしくは上）に移動させると
図全体が横に拡大します。
(これは Windows の機能)



- 2) Pandat 内の領域バーを
右に移動させると
図全体が横に縮小します。



- Pandat 内の領域バーを
左に移動させると
図全体が横に拡大します。



3) お勧めの操作

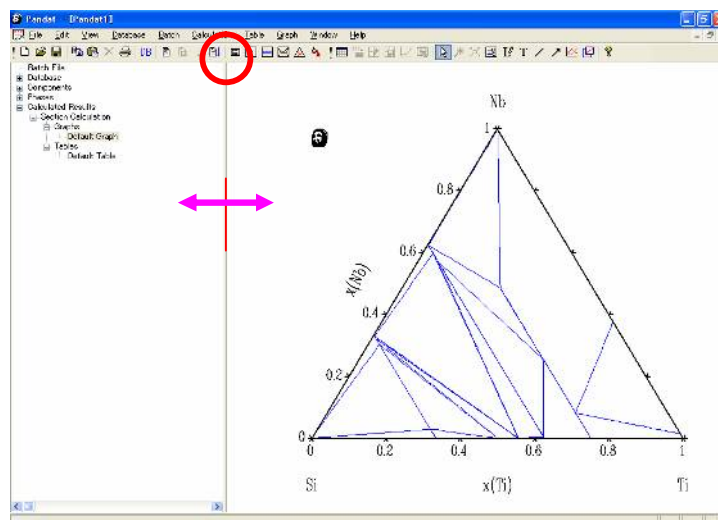
Pandat をフルスクリーン (最大化) 表示させます。

縦のサイズを固定することになります、

Pandat 内の領域バーを左右に移動させて、図が正三角形になる位置を決めます。

アイコン・メニューのどの場所か覚えます。

次回からはこの場所に領域バーを移動させます。

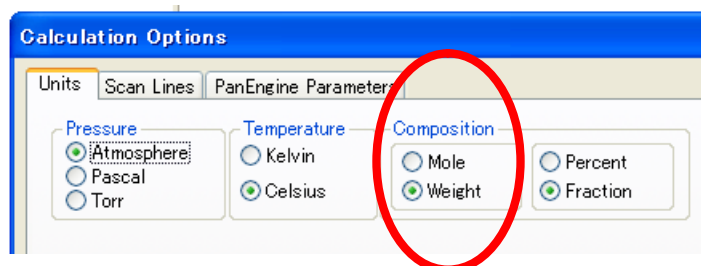
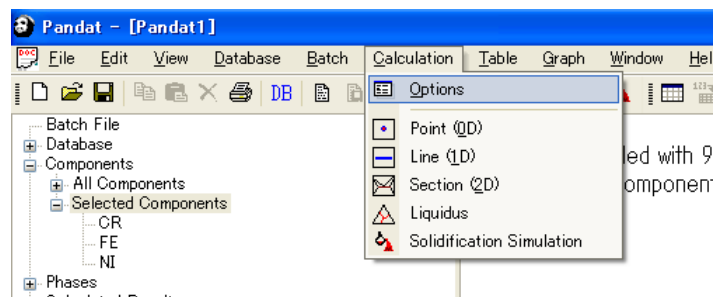


14. 7 相の重量分率値の表示について

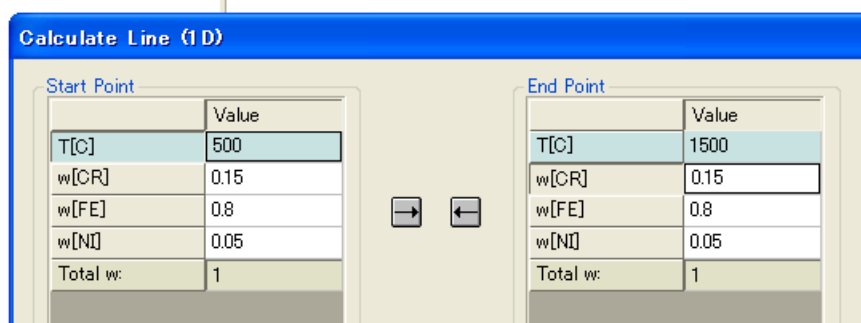
14-7-1 単位の確認

合金組成値の入力単位を
Weight とします。

(勿論、入力単位を Mole にして
計算を行い、計算結果値を
Weight で表示することも
できます。)



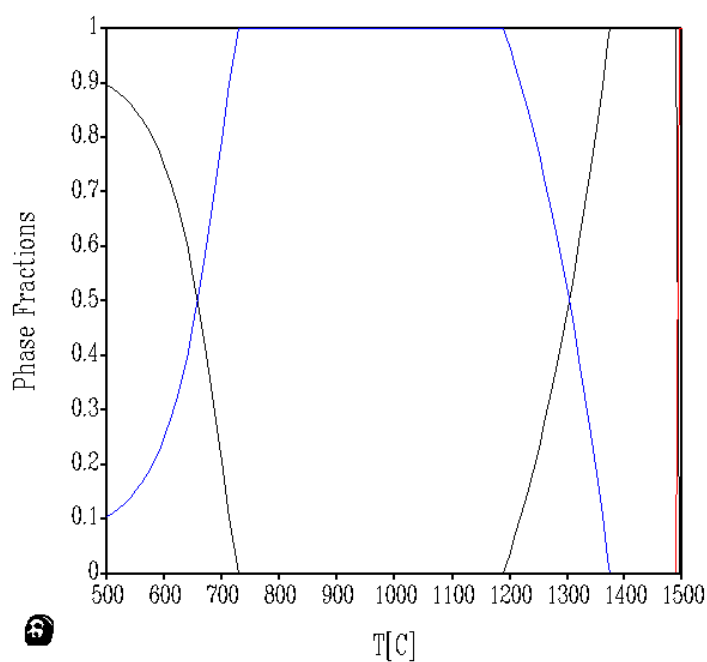
入力画面の単位が
w[]
と表示されます。



14-7-2 ライン計算の例

合金組成値を固定し、温度を
変えた場合の平衡相について
計算します。

80mass%Fe-15Cr-5Ni
温度 500°Cから 1500°Cまで
の平衡相のモル分率が
縦軸に表示されます。



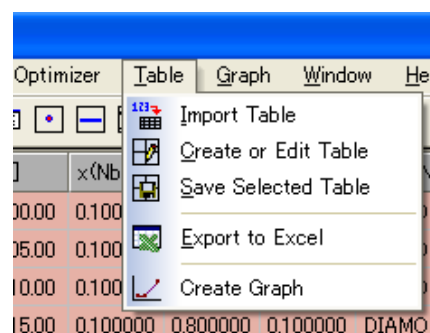
左側の窓の Tables 欄をクリックすると、表形式の数値表が表示されます。

各列の意味は先頭行を見て判断できます。ここで f(相名)は相モル分率です。

T [C]	w(CR)	w(FE)	w(ND)	G [J]	phaseName	f(BCC_A2)	f(FCC_A1)	f(LIQUID)
1240.00	0.150000	0.800000	0.050000	-86942.99	FCC_A1+BCC_A2	0.186670	0.813330	
1250.00	0.150000	0.800000	0.050000	-87830.95	FCC_A1+BCC_A2	0.229696	0.770304	
1260.00	0.150000	0.800000	0.050000	-88721.73	FCC_A1+BCC_A2	0.275326	0.724674	
1270.00	0.150000	0.800000	0.050000	-89615.36	FCC_A1+BCC_A2	0.323652	0.676348	
1280.00	0.150000	0.800000	0.050000	-90511.88	FCC_A1+BCC_A2	0.374767	0.625233	
1290.00	0.150000	0.800000	0.050000	-91411.30	FCC_A1+BCC_A2	0.428759	0.571241	
1300.00	0.150000	0.800000	0.050000	-92313.67	FCC_A1+BCC_A2	0.485711	0.514289	
1310.00	0.150000	0.800000	0.050000	-93219.01	FCC_A1+BCC_A2	0.545700	0.454300	
1320.00	0.150000	0.800000	0.050000	-94127.35	FCC_A1+BCC_A2	0.608797	0.391203	
1330.00	0.150000	0.800000	0.050000	-95038.75	FCC_A1+BCC_A2	0.675061	0.324939	
1340.00	0.150000	0.800000	0.050000	-95953.23	FCC_A1+BCC_A2	0.744542	0.255458	
1350.00	0.150000	0.800000	0.050000	-96870.85	FCC_A1+BCC_A2	0.817277	0.182723	
1360.00	0.150000	0.800000	0.050000	-97791.64	FCC_A1+BCC_A2	0.893290	0.106710	
1370.00	0.150000	0.800000	0.050000	-98715.65	FCC_A1+BCC_A2	0.972589	0.027411	
1373.36	0.150000	0.800000	0.050000	-99027.19	FCC_A1+BCC_A2	1.000000	0.000000	
1380.00	0.150000	0.800000	0.050000	-99642.75	BCC_A2	1.000000		
1390.00	0.150000	0.800000	0.050000	-100572.35	BCC_A2	1.000000		
1400.00	0.150000	0.800000	0.050000	-101504.40	BCC_A2	1.000000		
1410.00	0.150000	0.800000	0.050000	-102438.88	BCC_A2	1.000000		
1420.00	0.150000	0.800000	0.050000	-103375.78	BCC_A2	1.000000		
1430.00	0.150000	0.800000	0.050000	-104315.11	BCC_A2	1.000000		
1440.00	0.150000	0.800000	0.050000	-105256.85	BCC_A2	1.000000		
1450.00	0.150000	0.800000	0.050000	-106201.00	BCC_A2	1.000000		
1460.00	0.150000	0.800000	0.050000	-107147.54	BCC_A2	1.000000		
1470.00	0.150000	0.800000	0.050000	-108096.47	BCC_A2	1.000000		
1480.00	0.150000	0.800000	0.050000	-109047.78	BCC_A2	1.000000		
1487.45	0.150000	0.800000	0.050000	-109758.42	BCC_A2+LIQUID	1.000000		0.000000
1490.00	0.150000	0.800000	0.050000	-110003.41	BCC_A2+LIQUID	0.712640		0.287360
1494.64	0.150000	0.800000	0.050000	-110462.89	BCC_A2+LIQUID	0.000000		1.000000
1500.00	0.150000	0.800000	0.050000	-111005.02	LIQUID			1.000000

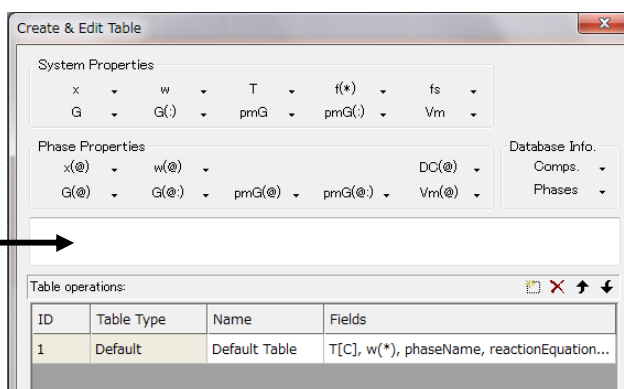
14-7-3 テーブルの編集

重量比率は内部で既に計算されています。画面上に表示されていないだけです。そこで各種情報を表示させるために**テーブル機能**を利用します。



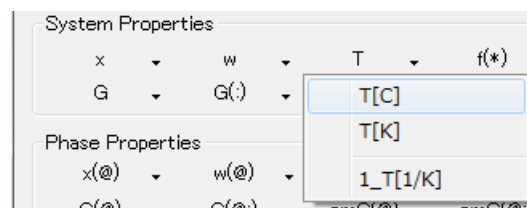
メニューから **Table → Create&Edit** をを選択します。右画面が表示されます。

Edit box

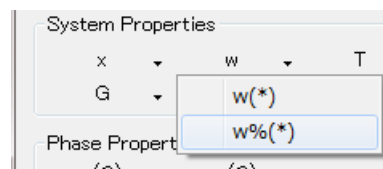


画面から変数名を選択すると、その名前が **Edit box** 欄に追加されます。変数名をタイプ入力する手間が省けます。間違った場合は、テキスト行ですから通常のテキスト削除で消せます。

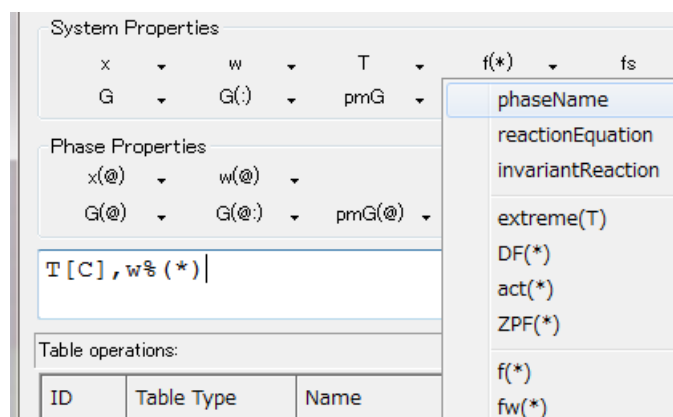
Tの部分をクリックし、プルダウンから
T[C] を選択します。
すると、中央の Edit box に追加されます。



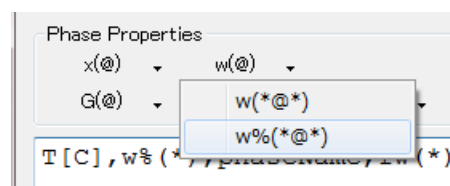
Wの部分をクリックし、プルダウンから
W%(*) を選択します。
すると、中央の Edit box に追加されます。



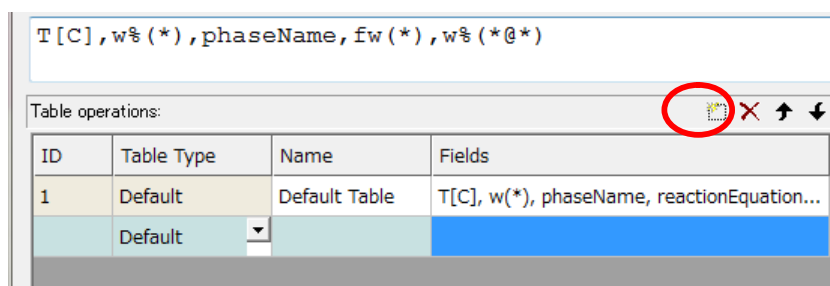
f(*) の部分をクリックし、プルダウンから
phaseName を選択し、
再度 f(*) の部分をクリックし、
fw(*) を選択します。



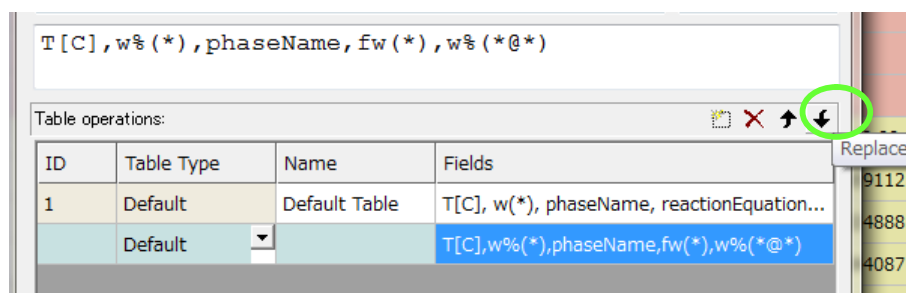
w(*)の部分をクリックし、プルダウンから
w%(*@*) を選択します。



Edit box に5個の変数を用
意できました。
赤丸にある New ボタン
をクリックするとテーブル
が新規に作られます。



緑丸にある Replace ボタン
をクリックすると、
Edit box の値が
Fields 欄にコピーされます。



OK ボタンをクリックすると Table1 の数値表が表示されます。

fw(BCC_A2) と fw(FCC_A1) と fw(Liquid) 欄が相の重量分率値です。

Bcc 相の重量分率値

温度 (°C)

BCC 相中の Cr 重量% Ni 重量%

	T	w%(CR)	w%(FE)	w%(NI)	phaseName	fw(Bcc_A2)	fw(Fcc_A1)	fw(Liquid)	w%(CR@Bcc_A2)	w%(FE@Bcc_A2)	w%(NI@Bcc_A2)	w%(C
	C											
69	1160.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1		1.000000					15.0
70	1170.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1		1.000000					15.0
71	1170.34	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.00	1.000000		18.74654	77.91180	3.34166	15.0
72	1180.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.028358	0.971642		18.56146	78.04264	3.39589	14.8
73	1190.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.059734	0.940266		18.36799	78.17769	3.45432	14.7
74	1200.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.093264	0.906736		18.17276	78.31201	3.51523	14.6
75	1210.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.129044	0.870956		17.97597	78.44524	3.57880	14.5
76	1220.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.167173	0.832827		17.77784	78.57698	3.64518	14.4
77	1230.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.207747	0.792253		17.57860	78.70683	3.71457	14.3
78	1240.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.250867	0.749133		17.37847	78.83436	3.78716	14.2
79	1250.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.296630	0.703370		17.17770	78.95914	3.86316	14.0
80	1260.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.345134	0.654866		16.97651	79.08069	3.94280	13.9
81	1270.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.396473	0.603527		16.77518	79.19852	4.02630	13.8
82	1280.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.450739	0.549261		16.57396	79.31211	4.11393	13.7
83	1290.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.508017	0.491983		16.37312	79.42094	4.20594	13.5
84	1300.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.568386	0.431614		16.17295	79.52443	4.30262	13.4
85	1310.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.631917	0.368083		15.97375	79.62200	4.40425	13.3
86	1320.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.698670	0.301330		15.77581	79.71304	4.51115	13.2
87	1330.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.768694	0.231306		15.57946	79.79693	4.62362	13.0
88	1340.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.842025	0.157975		15.38500	79.87301	4.74199	12.9
89	1350.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.918682	0.081318		15.19276	79.94063	4.86661	12.8
90	1360.00	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	0.998667	0.001333		15.00307	79.99913	4.99780	12.6
91	1360.16	15.00000	80.00000	5.00000	Fcc_A1+Bcc_A2	1.000000	0.00		15.00000	80.00000	5.00000	12.6
92	1370.00	15.00000	80.00000	5.00000	Bcc_A2	1.000000			15.00000	80.00000	5.00000	

14-7-4 テーブルの応用利用として

横軸を温度、縦軸に BCC 相中の構成元素重量%の図を描くことができます。

14-7-5 1点計算の場合

合金組成値と温度を指示する場合は、テーブル機能を利用しなくても、相中の構成元素の重量比率値は表示されます。

一方、相分率はモル分率だけが表示されますので、テーブル機能を利用して重量分率値を取り出すことになります。

Point	Value
T[C]	1300
w[CR]	0.15
w[FE]	0.8
w[Ni]	0.05
Total w:	1

Equilibrium found	
Calculated Point	
Temperature = 1573.15 K (1300 C)	
Pressure = 1 [atm]	
System composition and chemical potential:	
CR : x = 0.159722, wt = 0.15, mu = -92718.5	
FE : x = 0.793112, wt = 0.8, mu = -89975.5	
NI : x = 0.0471659, wt = 0.05, mu = -130260	
G = -92313.7	
There are 2 stable phases:	
Phase FCC_A1: fraction = 0.514289	
G = -92583 (J/mol)	
H = 49107.7 (J/mol)	
S = 90.0681 (J/K.mol)	
Cp = 38.0956 (J/K.mol)	
T = 1573.15 K	
x[CR] = 0.145322 (wt[CR] = 0.136286)	
x[FE] = 0.799847 (wt[FE] = 0.805669)	
x[Ni] = 0.054831 (wt[Ni] = 0.0580447)	
Phase BCC_A2: fraction = 0.485711	
G = -92028.5 (J/mol)	
H = 50687 (J/mol)	
S = 90.7196 (J/K.mol)	
Cp = 39.8324 (J/K.mol)	
T = 1573.15 K	
x[CR] = 0.17497 (wt[CR] = 0.164562)	
x[FE] = 0.785981 (wt[FE] = 0.79398)	
x[Ni] = 0.039049 (wt[Ni] = 0.0414574)	

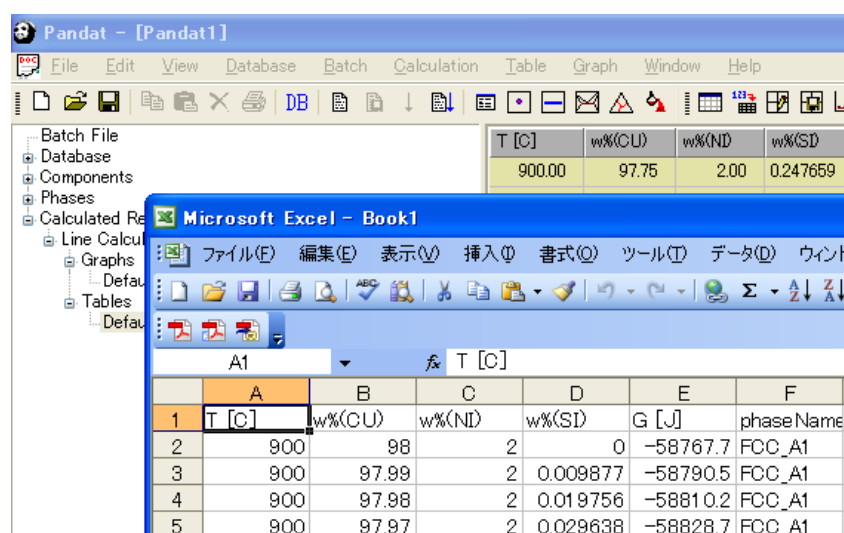
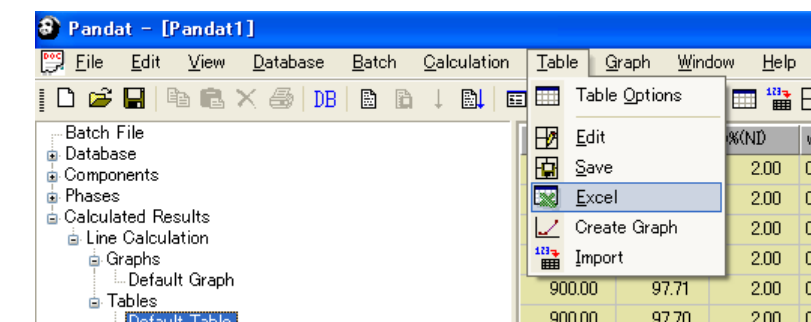
14-7-6 用意されている変数名以外の値が必要な場合
エクセル等を利用します。

Pandat で平衡計算した結果を画面上に Tables として表示させます。

メニュー Table → Excel を選択すると

自動的にエクセルが起動され

Pandat 画面上の数値表が
コピーされ、エクセルの数
値表に書かれます。



例えば

Cu-Ni-Si 3元系で 900°C温度固定、2mass%Ni 濃度固定で Si 濃度を 0 から 1mass%変化させた場合を考えます。(ライン計算)

0.468mass%Si においては FCC 相と γ Ni₅Si₂ 相の 2 相が平衡です。

計算結果から $f_w(\text{FCC})=0.995774$, $w(\text{Ni@FCC})=0.016523$

$$f_w(\text{Ni}_5\text{Si}_2)=0.004226, w(\text{Ni@Ni}_5\text{Si}_2)=0.839342$$

系全体で 2%の Ni が保存されているかどうか、エクセル上であれば簡単な四則演算がすぐにできるので確認しやすいです。

14. 8 Pandat における準安定相の取り扱い方法

14-8-1 Fe-C 二元系におけるグラファイト相 (C) とセメンタイト相 (Fe_3C) の関係の場合

Pandat は最安定相を計算します。したがって、計算対象とする相の中に安定なグラファイト相が含まれていれば、必ずグラファイト相が優先されます。もしセメンタイト相を状態図上に出したい場合は、グラファイト相を計算対象から除外します。

Graphite 基準の場合 :

熱力学データベースファイルに含まれる全ての相を計算対象にします。

Graphite 相が安定 (平衡) になるため、他の相を気にしなくてもよい。

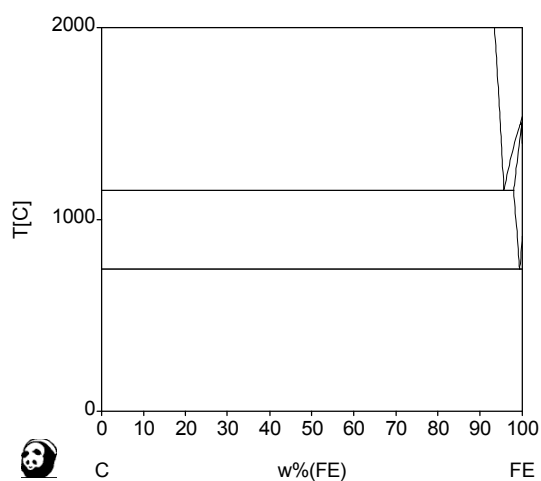
計算指示画面では元素 C の範囲を

0 から 100%とします。

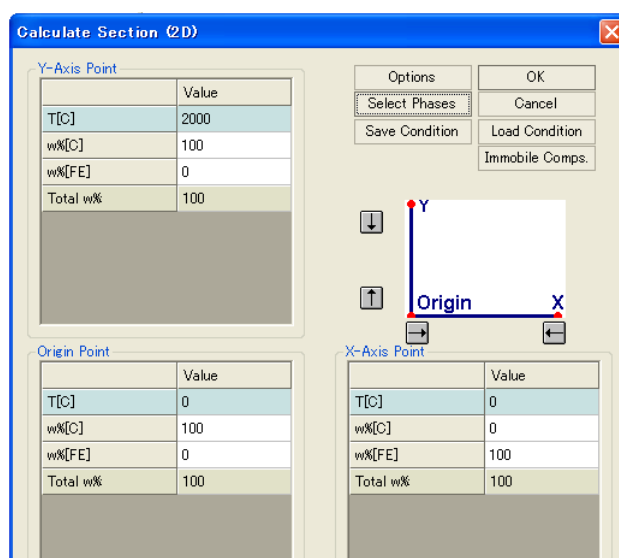
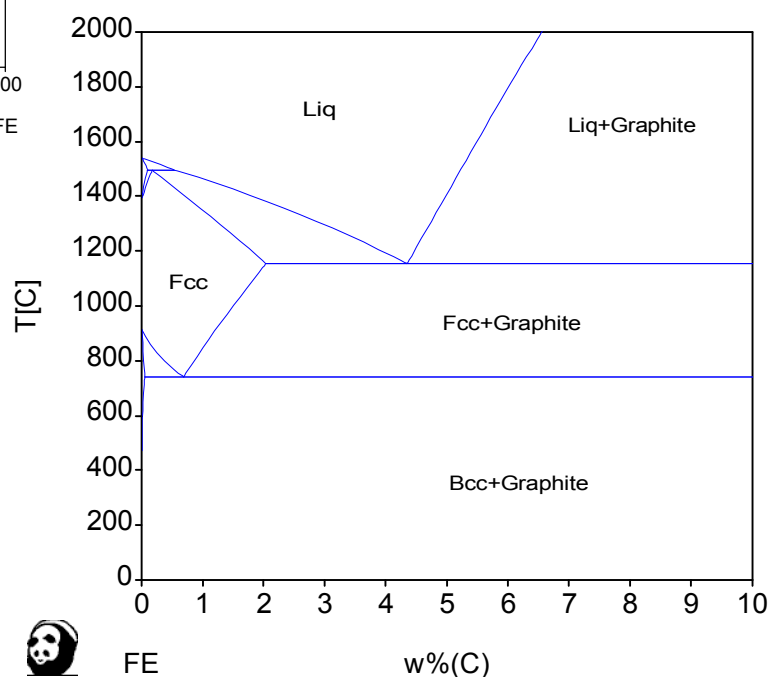
計算指示画面ではアルファベット順に

元素が並びます。

計算結果



横軸を wt%(C) とし、
範囲を 0 から 10wt%C とする。



Cementite 基準の場合：

熱力学データベースファイルには Diamond 相などがあるため、計算対象とする相を Liquid, Fcc, Bcc, Cementite の 4 個にすることを勧めします。

「Select Phases」 ボタンをクリックします。

選択された相の背景色は青色です。

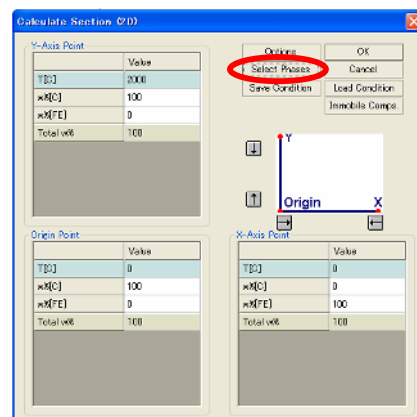
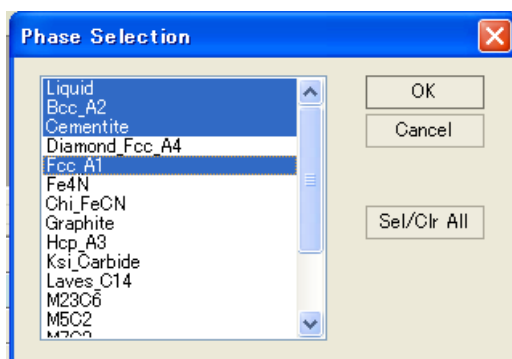
reject された相の背景色は白色です。

先ず「 Sel/Clr all」 ボタンをクリックし全て reject します。

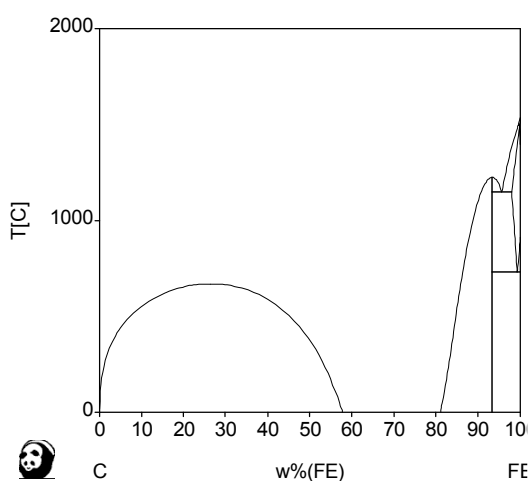
Liquid, Fcc, Bcc, Cementite の 4 個をクリックします。

OK ボタンをクリックし

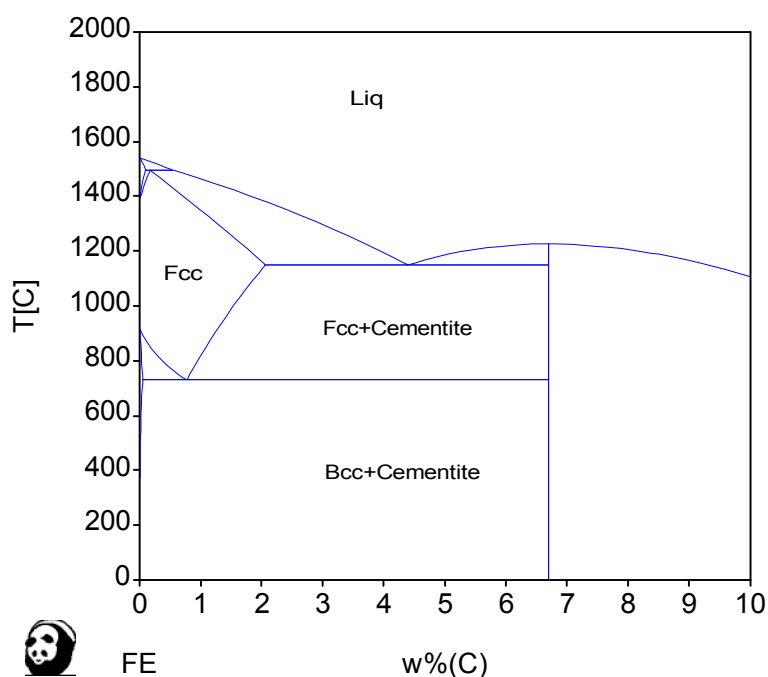
戻ります。



計算結果



横軸を wt%(C) とし、
範囲を 0 から 10wt%C とする。



14-8-2 典型的な準安定相の計算

(Cu-Zn の例で画面説明します)

状態図を計算する指示画面にて
Select Phases ボタンを選択する。

Phase Selection 画面が出る。

最初は全ての相が計算対象である。

背景色が青色である。

例えば FCC 相を計算から除外する

場合は FCC の行をクリックする。

背景色が白色になる。

この状態でOKボタンをクリック

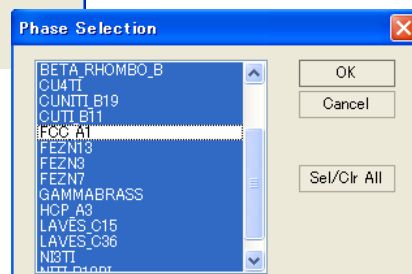
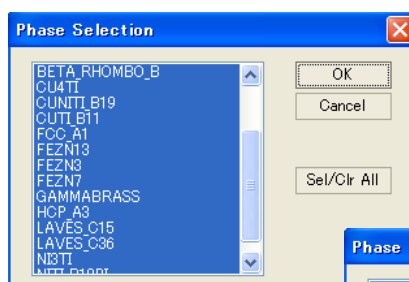
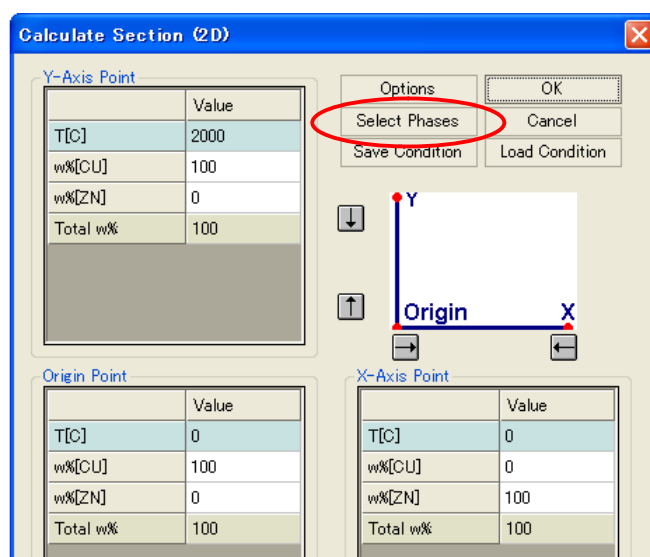
し、右上の画面に戻る。

状態図計算を実施すると、

FCC 相を除外した計算

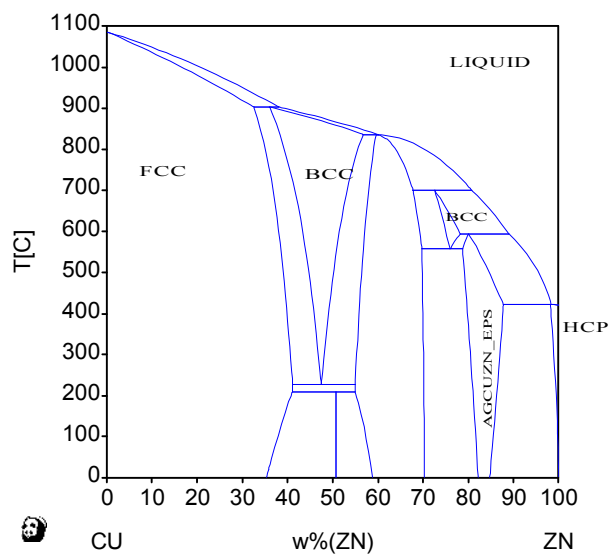
となる。この結果

準安定相が現れる。

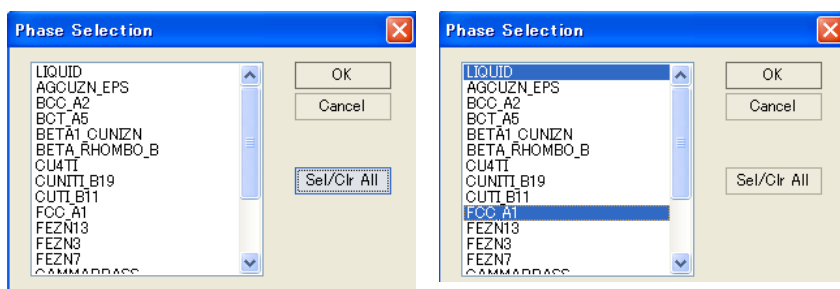


再度計算対象に戻したいときはもう一度 FCC の行をクリックする (背景色が青色になる)。

Cu-Zn 二元系状態図を右に示す。

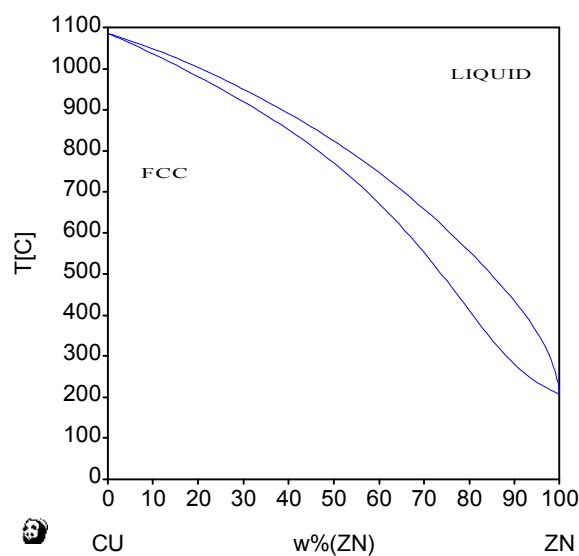
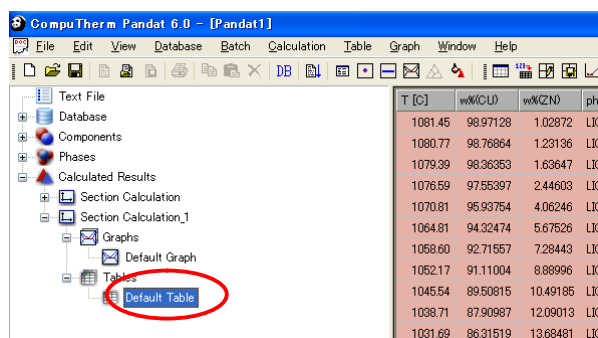


計算対象を2個に絞る。「Sel/Clr All」ボタンをクリックし全ての相を計算対象から除外する。その後、例えば、Liquid相とFCC相をクリックし計算対象とする。(計算対象となる行の背景色は青色)

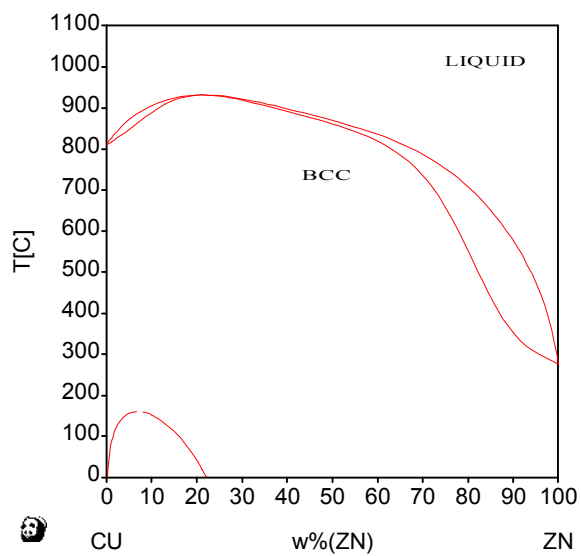


計算結果

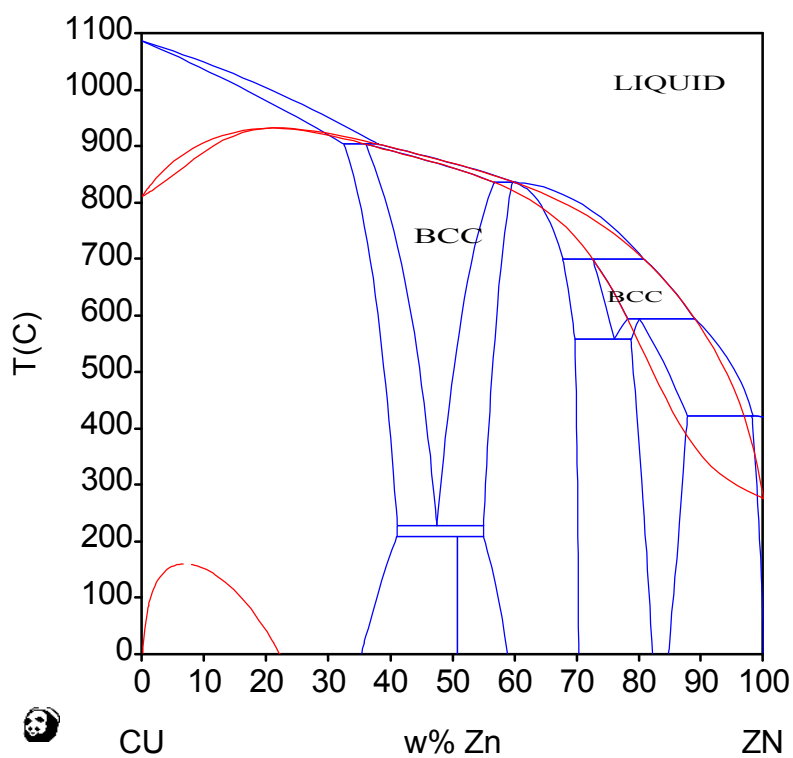
グラフの座標値を知るには、画面左側の Default Table をクリックする。座標値が表形式で表示される。



例えば、Liquid 相と BCC 相のみを計算対象とした場合の計算結果を次に示す。



Cu-Zn 二元系状態図に重ね合わせた結果を次に示す。



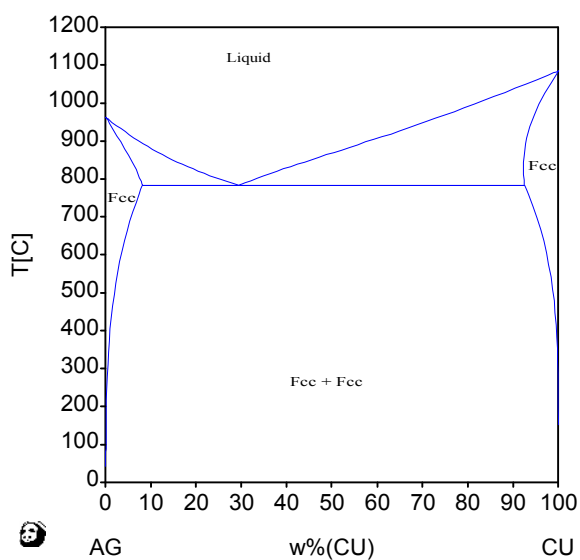
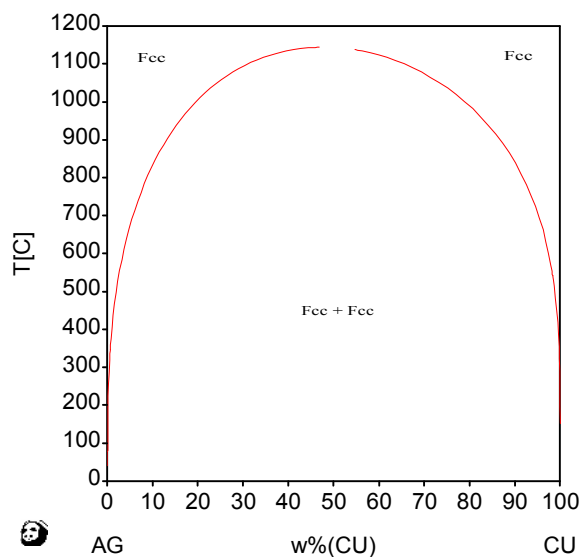
14-8-3 二相分離が生じる系

ここでは Ag-Cu 二元系状態図を計算する。計算結果を次に示す。

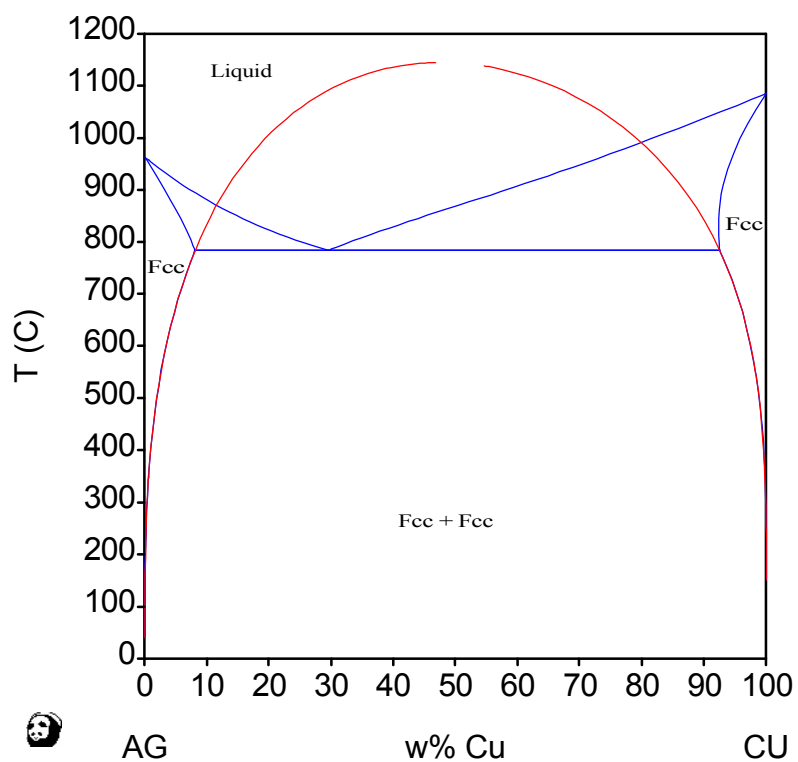
平衡相は Liquid 相と Fcc 相のみである。

典型的な共晶型である。

Fcc 相のみを計算対象とすると



を得る。二元系状態図に重ね合わせた結果を次に示す。二相分離のピーク温度が融点よりも高いために二相分離の存在を気付きにくい。Ag リッチ側の固溶限も Cu リッチ側の固溶限も二相分離線と関係する。



14-9 バージョン 8 では英文 example-book が用意されました。



内容：

- 2.1 T-X PHASE DIAGRAM OF A BINARY SYSTEM.
- 2.2 Isothermal, Isoplethal Sections AND LIQUIDUS PROJECTION OF A TERNARY SYSTEM
- 2.3 Two-Dimensional Section of Liquidus SURFACE in a Multi-component ($N \geq 4$) SYSTEM
- 2.4 THERMODYNAMIC PROPERTIES...
- 2.5 PHASE PROPERTIES....
- 2.6 SPECIAL PROPERTIES.....
- 2.7 Solidification path AND heat evolution simulation using the SCHEIL and Lever-rule model
- 2.8 PHASE DIAGRAM OF A SYSTEM INVOLVING GAS SPECIES...
- 2.9 PARA-EQUILIBRIUM.....
- 2.10 APPLICATION OF BATCH CALCULATION...
- 2.11 MERGE PLOTS BY TABLE AND GRAPH FUNCTIONS.....
- 2.12 THERMOPHYSICAL AND KINETIC PROPERTIES.....
- 3. PANOPTIMIZER EXAMPLES....
- 3.1 ROUGH SEARCH....
- 3.2 NORMAL OPTIMIZATION....
- 4. PANPRECIPITATION EXAMPLES.....
- 4.1 PRECIPITATION SIMULATION WITH THE FAST-ACTING MODEL.....
- 4.2 PRECIPITATION SIMULATION WITH THE KWN MODEL...

15. データベースの例

公表されている文献から TDB 形式のファイルを作ることによって、平衡計算に利用できます。

NbSiTi.tdb ファイルの例

```

Element /-          ELECTRON_GAS          0          0          0 !
Element Nb          BCC_A2          92.906          5220          36.27 !
Element Si          DIAMOND_A4          28.085          3217.5          18.82 !
Element Ti          HCP_A3          47.88          4810          30.648 !
Element VA          VACUUM          0          0          0 !

Function GHSERNB 298.15 -8519.35+142.045*T-26.4711*T*ln(T)+0.000203475*T**2
-3.5012e-007*T**3+93399*T**(-1); 2750 Y
-37669.3+271.721*T-41.77*T*ln(T)+1.52824e+032*T**(-9); 6000 N !
Function GHSERSI 298.15 -8162.61+137.227*T-22.8318*T*ln(T)-0.0019129*T**2
-3.552e-009*T**3+176667*T**(-1); 1687 Y
-9457.64+167.272*T-27.196*T*ln(T)-4.20369e+030*T**(-9); 3600 N !
Function GHSERTI 298.15 -8059.92+133.687*T-23.9933*T*ln(T)-0.00477798*T**2
+1.06716e-007*T**3+72636*T**(-1); 900 Y
...
Function GSIBCC 298.15 47000-22.5*T+GHSERSI; 6000 N !
Function GHEXTNB 298.15 -8519.35+142.045*T-26.4711*T*ln(T)+0.000203475*T**2
-3.5012e-007*T**3+93399*T**(-1); 6000 N !
Type_Definition % SEQ *!
Type_Definition ( GES A_P_D BCC_A2 Magnetic -1 0.4!
Type_Definition * GES A_P_D FCC_A1 Magnetic -3 0.28!
Type_Definition ) GES A_P_D HCP_A3 Magnetic -3 0.28!

Phase Liquid % 1 1 !
Constituent Liquid :Nb,Si,Ti;!
Parameter G(Liquid,Nb;0) 298.15 29781.6-10.8164*T+GHSERNB-3.06098e-023*T**7; 2750 Y
-7499.4+260.756*T-41.77*T*ln(T); 6000 N !
Parameter G(Liquid,Si;0) 298.15 50696.4-30.0994*T+2.09307e-021*T**7+GHSERSI; 1687 Y
49828.2-29.5591*T+4.20369e+030*T**(-9)+GHSERSI; 3600 N !
Parameter G(Liquid,Ti;0) 298.15 4134.49+126.706*T-23.9933*T*ln(T)-0.00477798*T**2
+1.06716e-007*T**3+72636*T**(-1); 900 Y
...
Parameter G(Liquid,Nb,Si;0) 298.15 -198883; 6000 N !
Parameter G(Liquid,Nb,Si;1) 298.15 -18340.5; 6000 N !
Parameter G(Liquid,Nb,Si;2) 298.15 47235.4; 6000 N !
Parameter G(Liquid,Si,Ti;0) 298.15 -236700+15.8192*T; 6000 N !
Parameter G(Liquid,Si,Ti;1) 298.15 61500.6-4.92006*T; 6000 N !
Parameter G(Liquid,Si,Ti;2) 298.15 71711.8-5.73696*T; 6000 N !
Parameter G(Liquid,Si,Ti;3) 298.15 -48695+3.8956*T; 6000 N !
Parameter G(Liquid,Nb,Si,Ti;0) 298.15 129990; 6000 N !
Parameter G(Liquid,Nb,Si,Ti;1) 298.15 -413123; 6000 N !
Parameter G(Liquid,Nb,Si,Ti;2) 298.15 129990; 6000 N !

Phase BCC_A2 % ( 1 1 !
Constituent BCC_A2 :Nb,Si,Ti;!
...

```

熱力学データベース作成例

hashiABC.tdb

```

$ 先頭のドル印はコメント行です。
$
$ このファイルは自由エネルギー及び
$   相互作用パラメータ値を定義します。
$
$                                     株式会社 材料設計技術研究所
$                                     平成17年10月12日作成
$
$ 3つの元素を定義します。仮想の元素です。
$ リチャードの法則を適用し融点を決めます。
$ Tm(A)= 600C   , (600+273.15)*8.314= 7259
$ Tm(B)=1000C   , (1000+273.15)*8.314=10585
$ Tm(C)= 800C   , (800+273.15)*8.314= 8922
$
$ 固相の状態を基準にします。
$ 2つの相を定義します。
$ LIQUID 相と SOLID 相です。
$
$ A-B 2元系は液相2相分離型
$ A-C 2元系は全率固溶型
$ B-C 2元系は共晶型
$
Type_Definition % SEQ * !

Element  A  SOLID   10  1  1!
Element  B  SOLID   20  2  2!
Element  C  SOLID   30  3  3!

Phase  LIQUID  %  1  1.0  !
Constituent  LIQUID :A, B, C: !

Parameter  G(LIQUID,A;0)    298.15    7259-8.314*T;    6000 N!
Parameter  G(LIQUID,B;0)    298.15    10585-8.314*T;    6000 N!
Parameter  G(LIQUID,C;0)    298.15    8922-8.314*T;    6000 N!
$
Parameter  G(LIQUID,A,B;0)  298.15    +30000;          6000 N!
Parameter  G(LIQUID,A,C;0)  298.15    +0;              6000 N!
Parameter  G(LIQUID,B,C;0)  298.15    -10000;          6000 N!
Parameter  G(LIQUID,A,B,C;0) 298.15    +0;              6000 N!
$

Phase  SOLID   %  1  1.0  !
Constituent  SOLID  :A,B,C: !

Parameter  G(SOLID,A;0)    298.15    0;              6000 N!
Parameter  G(SOLID,B;0)    298.15    0;              6000 N!
Parameter  G(SOLID,C;0)    298.15    0;              6000 N!
$
Parameter  G(SOLID,A,B;0)  298.15    +30000;          6000 N!
Parameter  G(SOLID,A,C;0)  298.15    +0;              6000 N!
Parameter  G(SOLID,B,C;0)  298.15    +15000;          6000 N!
Parameter  G(SOLID,A,B,C;0) 298.15    +0;              6000 N!
$
$end MDT

```

合金液相の表面張力と粘性を計算させるためには、データベース・ファイルに4種類の定義が必要となります。ここでは純金属元素の物理データを定義します。合金の計算には熱力学相互作用パラメータが利用されます。計算式に関しては文献を参照ください。

合金の Density は Volume fraction から計算されます。

ライン計算にて、合金液相の表面張力と粘性が計算されます。計算値はテーブル機能を利用して取り出します。

必要とされる定義の例 Volume fraction

```
Parameter Vm (Liquid, Al; 0) 298.15
          9.718565E-06 +1.695E-09*T; 3000 N !
```

必要とされる定義の例 Surface Tension

```
Parameter SurfaceTension (Liquid, Al; 0) 298.15
          1.24055-3.5e-4*T; 3000 N !
```

必要とされる定義の例 計算で用いる関数 β

```
Parameter beta (Liquid, Al; 0) 298.15 0.83; 3000 N !
```

必要とされる定義の例 Viscosity

```
Parameter ActivationEnergy (Liquid, Al; 0) 298.15
          15051+13.519*T; 3000 N !
```

表面張力の単位 : N/m

粘性の単位 : Ns/(m²)

Reference

- [1932But] J.A.V. Butler : Proc. Roy. Soc., A135(1932), 348.
- [1994Tan] T. Tanaka and I. Iida : Steel Research, 65(1994),21-28.
- [1994See] S. Seetharaman and D. Sichen : Metall. Mater. Trans. B, 25B(1994), 589-595.

Append Database

熱力学データベース (*.TDB もしくは *.PDB) を Load (読み込み) した後でのみ、この Append Database 機能が使えるようになります。 TDB フォーマットのファイルを Append (付加) することができます。 PCメモリ上でデータを付加し計算に用います。元の熱力学データベースファイルを書き換えることはありません。

新しい相を付加できます。相互作用パラメータ値を付加・変更することができます。新しく元素を付加 (登録) することはできません。

実行例

まず Ag-Cu 2元系状態図を計算します。

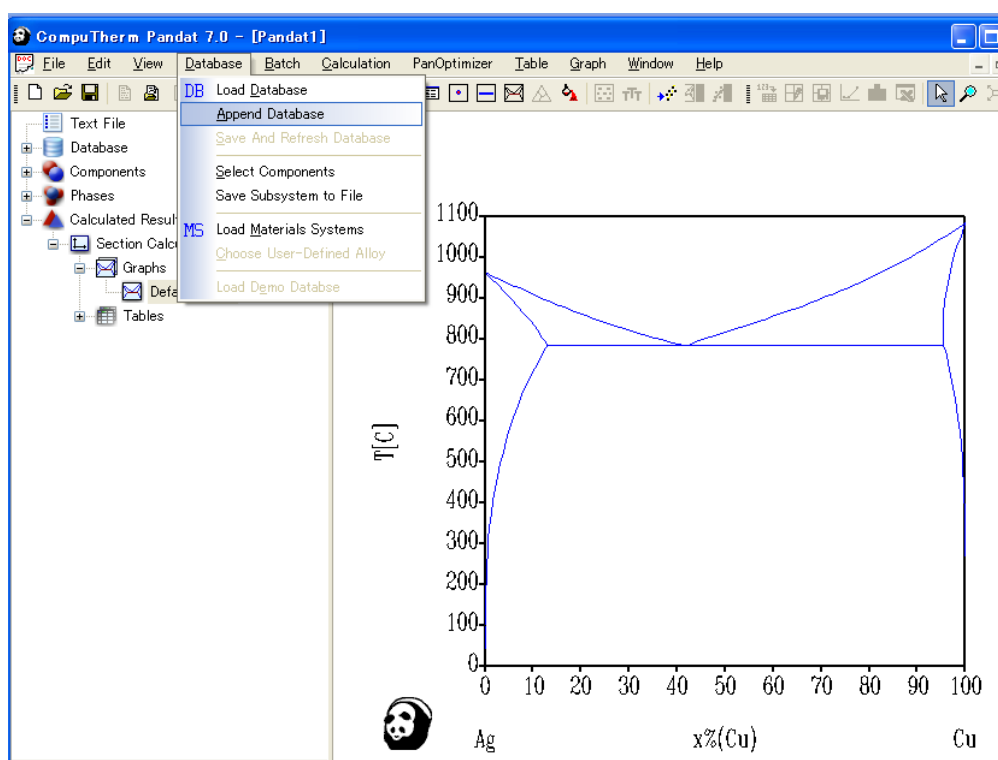
Append ファイルを準備します。メモ帳を利用して下記テキストファイルを作る。

ファイル名を agcu_append1.tdb とします。

```
$ change G0, or interaction parameter values.

PARAMETER G(Liquid,AG,CU;0) 298.15 +30000; 6000 N !$ MDT
PARAMETER G(Liquid,AG,CU;1) 298.15 0; 6000 N !$ MDT
PARAMETER G(Liquid,AG,CU;2) 298.15 0; 6000 N !$ MDT
$
PARAMETER G(Fcc,AG,CU;0) 298.15 +30000; 6000 N !$ MDT
PARAMETER G(Fcc,AG,CU;1) 298.15 0; 6000 N !$ MDT
$
```

メニュー → Database → Append Database を選択します。

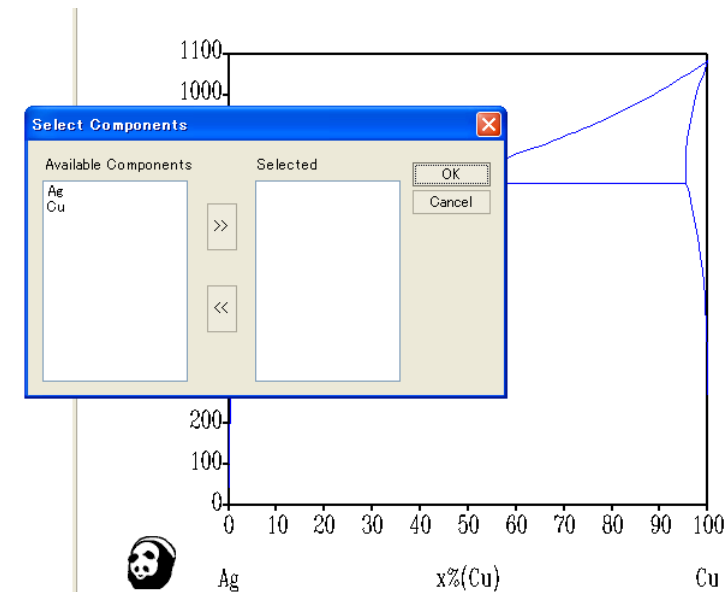


作成した agcu_append1.tdb ファイルを開きます。

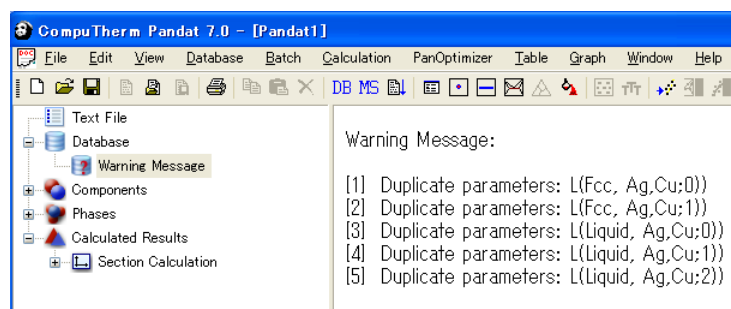
元素選択画面が表示されます。

Ag と Cu を選択し、

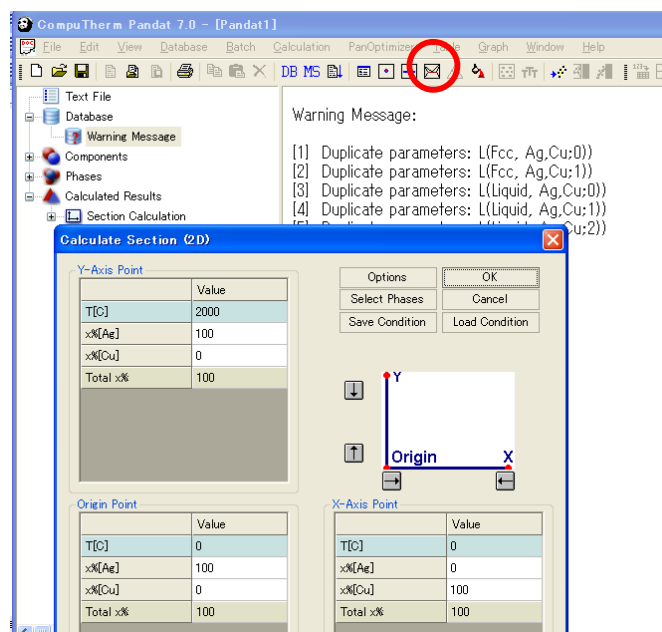
OK ボタンをクリックします。



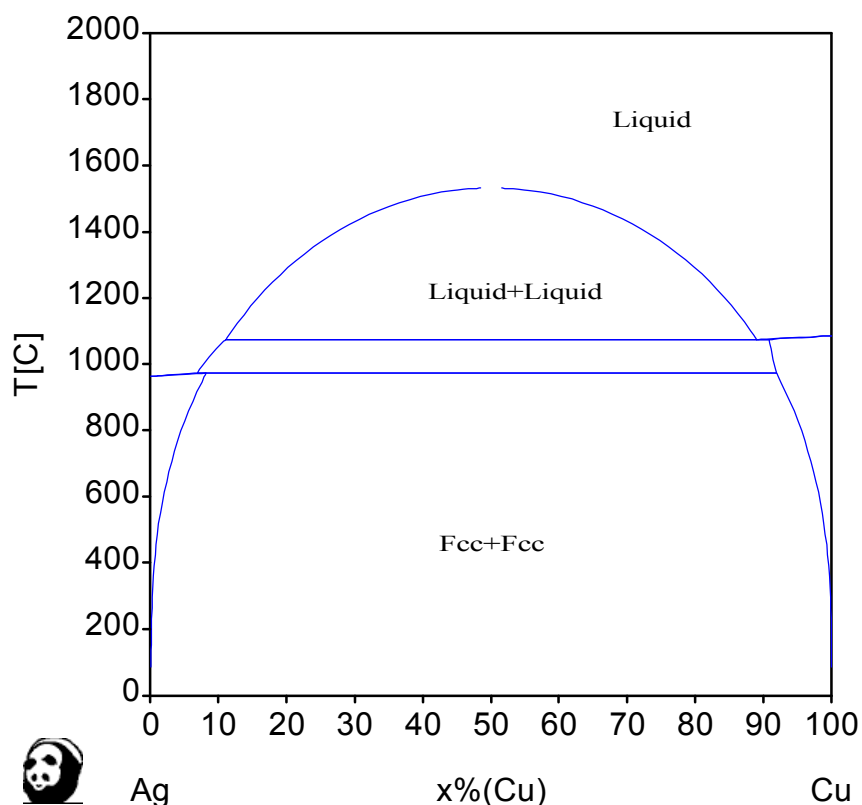
警告表示が表示されますが
そのまま 2 元系状態図計算
に進みます。



Ag-Cu 2 元系状態図を
計算します。



Append 後の計算結果



このように相互作用パラメータ値を上書きすることにより、典型的な状態図を得ることができます。この計算結果は Ag-Cu 2元系に関する架空の相互作用パラメータですが、このように公表論文の相互作用パラメータ値を試したい時や相互作用パラメータ値（式）を評価したい場合に Append Database 機能を使います。

相を追加する例

ファイル名を `agcu_append2.tdb` とします。なお、この AGCU 相は架空の相です。

```
$ add the new phase.

PHASE AGCU % 2 0.4 0.6 !
CONSTITUENT AGCU :AG:CU: !
PARAMETER G(AGCU,AG:CU;0) 298.15
-60000+50*T+0.4*GHSERAG+0.6*GHSERCU; 6000 N !

$
```

16. メニュー一覧

File	Edit	View	Database
New	Font	Toolbar	Load Database
Open Text	Undo	Status Bar	Append Database
Save	Select All		Save and Refresh
Save As	Find		Select Components
New Workspace	Find Next		Save Subsystem to File
Open Workspace	Replace		Load Materials System
Close Workspace	Comment Block		
Save Workspace	Uncomment Block		
Save Workspace As	Change Case		
Print	Cut		
Print Preview	Copy		
Print Setup	Paste		
Exit	Delete		

Batch	Calculation	Table
Import & Run	Options	Import Table
Export All	Point (0D)	Create & Edit Table
Export Batch	Line (1D)	Save Selected Table
	Section (2D)	Export to Excel
	Liquidus	Create Graph
	Solidification Simulation	

Graph	Window	Help	PanOptimizer
Configure Graph	Expand Nodes	Pandat Help	Rough Search
Save Graph	Collapse Nodes	Example Book	Optimiz Control Panel
Copy WMF Format	Selected Nodes	Dongle Infomation	View Optimization
Select		About Pandat ...	Parameters
Zoom Mode	Cascade		Create
Display Full Range	Tile		Load Experimental file
Legend	Arrange Icons		Append
Label Mode	Split		Open Optimiz Results
Text	Pandat 1,2,...		Save
Line			Miedma-model
Arrow			
Save As Default			

17. 平衡計算モデル

状態図計算は自由エネルギーを用いた正則溶体モデル、副格子モデルを使用しています。
associate モデル、ionic liquid モデルを計算できます。

多元系状態図計算ソフトウェア Pandat

引用リファレンス

"The PANDAT Software Package and its Applications"

S.-L. Chen, S. Daniel, F. Zhang, Y.A. Chang, X.-Y. Yan, F.-Y. Xie, R. Schmid-Fetzer and W.A. Oates:
CALPHAD 26 (2002) pp175-188.

その他の発表論文

"On A New Strategy For Phase Diagram Calculation"

S.-L. Chen, K.-C. Chou and Y.A. Chang: CALPHAD 17 (1993) pp237-250, pp287-302.

"Summary of the proceedings of the CALPHAD XXVII meeting : May 1998 Beijing, China"

(S. Chen, F. Zhang, W. Oates, K-C. Chou and Y.A. Chang: "PANDA", pp275-276),
CALPHAD 23 (1999) pp265-303

"On The Calculation of Multicomponent Stable Phase Diagrams"

S.-L. Chen, S. Daniel, F. Zhang, Y.A. Chang, W.A. Oates and R. Schmid-Fetzer:
J. Phase Equilibria 22 (2001) pp373-378.

"Phase diagram calculation: past, present and future"

Y.A. Chang, S. Chen, F. Zhang, X. Yan, F. Xie, R. Schmid-Fetzer and W.A. Oates:
Prog. Mater. Sci. 49 (2004) pp313-345.

18. バッチファイルPBFの例

```

////////////////////////////////////
// Pandat Batch File Example //
// //
// Copyright 2007 CompuTherm LLC // example.pbf
// //
// September 08, 2007 //
////////////////////////////////////

// Refer Pandat 7.0 manual on the batch command keywords for detail
// Any line beginning with "/" is a comment line and will be ignored
// General format: [keyword] {value list}
// All keywords are case insensitive
// [Begin], [begin], [BEGIN], etc are all equivalent

// [DATABASE] define a database file with extension name as "tdb" or "pdb"
// [DATABASE] is usually put at the beginning of the batch file.
// It can be anywhere in a batch file, but at least before the first [end].
// Different calculations may use different databases.
// A calculation uses the most recently defined database.
[DATABASE] {"NbSiTi.tdb"}

// Desine a point calculation 1点計算

// [begin]{title} starts a calculation
// The title will be shown on the explorer window in PANDAT workspace
[begin] {Nb-Si point}

// Define a calculation type
[CalculationType] {point}

// select subsystem components
[COMPONENT] {Nb Si}

// define the condition of the point to be calculated
[POINT] {T = 1000, x(Nb) = 0.2, x(Si) = 0.8}

// Other example points:
// Set units:
// Temperature: use C or K(default)
// Composition: use x, x%, w (or wt), w% (or wt%)
// [POINT] {T = 1000c, x%(Nb) = 30, x%(Si) = 70}
// [POINT] {T = 1000C, w(Nb) = 0.2, w(Si) = 0.8}
// [POINT] {T = 1000K, w%(Nb) = 20, w%(Si) = 80}
// [POINT] {T = 1000K, wt(Nb) = 0.23, wt(Si) = 0.77}

// If composition is not defined for all components,
// the balance will be equally distributed to the remaining components:
// [POINT] {T = 1000c, x(Nb) = 0.24}
// in this case, x(Si) = 0.76
// end of the definition of calculation
[end]

// Define a line calculation with output files ライン計算

[begin] {Nb-Si-Ti line}
// line calculation type
[CalculationType] {line}

// select components
[COMPONENT] {Nb Si Ti}

```

```

// set two endpoints of the line
[POINT] {T = 1000C, x(Nb) = 0.2, x(Si) = 0}
[POINT] {T = 1000C, x(Nb) = 0.2, x(Si) = 0.8}

// set number of calculation steps
[steps] {80}

// This line is Optional.
// Set output file for this calculation
[output] {FileName = "line_1.dat", format = "T, x(Nb), x(Si), mu(Nb), f(Liquid)}
// FileName and format are required. In format, fields are separated by ","
[output] {FileName = "line_2.dat", format = "T, x(Nb), x(Si), mu(Nb), f(*)"}
// x(component) means overall mole fraction
// f(*) means phase fractions of all related phases
// Separator in output file = TAB
[output] {FileName = "line_3.dat", format = "T, phaseName, x(Nb), x(Si), mu(Nb),
act(*@*:liquid)}
// phaseName: names of phases in the system in equilibrium
// act(*@*:liquid) outputs activities of all components in any phase in
// equilibrium, with liquid as reference
// act(componentName@phaseName:referencePhaseName) is also acceptable

```

[end]

// Define a line calculation with liquid phase suspended 液相を除外した場合のライン計算

```

[begin] {Nb-Si-Ti line (liquid phase suspended)}
[CalculationType] {line}
[COMPONENT] {Nb Si Ti}

// set the liquid phase to be suspended
[suspend] {liquid}

[POINT] {T = 3000C, x(Nb) = 0.2, x(Si) = 0.5, x(Ti) = 0.3}
[POINT] {T = 1000C, x(Nb) = 0.2, x(Si) = 0.5, x(Ti) = 0.3}
[steps] {50}

```

[end]

// Define a line calculation with specific phases selected 指定した相だけの場合のライン計算

```

[begin] {Nb-Si-Ti line (only liquid, bcc, and Nb3Si phases)}
[CalculationType] {line}
[COMPONENT] {Nb Si Ti}

// suspend all phases
[suspend] {*}

[restore] {liquid, bcc_a2, NB3SI}
// restore these phases
// Note: all phases are selected as a default setup

[POINT] {T = 3000C, x(Nb) = 0.2, x(Si) = 0.5, x(Ti) = 0.3}
[POINT] {T = 1000C, x(Nb) = 0.2, x(Si) = 0.5, x(Ti) = 0.3}
[steps] {50}

```

[end]

// Define a section calculation
// calculate a binary phase diagram

2元系状態図計算

```

[begin] {Nb-Si binary phase diagram}
[CalculationType] {SECTION}
[COMPONENT] {Nb Si}

```

```

// Specify three points that define the section to be calculated
// Y
// |
// |
// |
// O-----X
[POINT] {T = 3000, x(Nb) = 1}
[POINT] {T = 300, x(Nb) = 1}
[POINT] {T = 300, x(Si) = 1}

// scanline definition, Refer Pandat 7.0 manual for details
// if this is not given, PANDAT will use internal default value:
// 1% from the four borders of the section
[scanline] {dx = 0.01, dy = 0.01, dx = 0.99, dy = 0.99}

[output] {FileName = "binary_##.dat", format = "phaseName, T, x(Nb), x(Si), f(*)"}
// "binary_##.dat" means file name will be automatically numbered as "binary_00.dat",
// "binary_01.dat", "binary_02.dat", ...
// existing files in the current working folder will not be overwritten.
[end]

[begin] {Nb-Ti binary phase diagram}
[CalculationType] {SECTION}
[COMPONENT] {Nb Ti}
[POINT] {T = 3000, x(Nb) = 1}
[POINT] {T = 300, x(Nb) = 1}
[POINT] {T = 300, x(Ti) = 1}
[output] {FileName = "binary_##.dat", format = "phaseName, T(C), x(Nb), x(Ti), f(*)"}
// in format, the unit of T can be defined as T(C) or T(K), default is in K
[end]

[begin] {Si-Ti binary phase diagram}
[CalculationType] {SECTION}
[COMPONENT] {Si Ti}
[POINT] {T = 3000, x(Si) = 1}
[POINT] {T = 300, x(Si) = 1}
[POINT] {T = 300, x(Ti) = 1}
[output] {FileName = "binary_##.dat", format = "phaseName, T(K), x(Si), x(Ti), f(*)"}
[end]

// calculate a ternary phase diagram: Nb-Si-Ti Isotherm at 1500K 3元系等温断面图计算

// Phase diagram: Nb-Si-Ti Isotherm at 1500K
[begin] {Nb-Si-Ti isotherm at 1500K}
[CalculationType] {SECTION}
[COMPONENT] {Nb Si Ti}
[POINT] {T = 1500, x(Nb) = 1}
[POINT] {T = 1500, x(Si) = 1}
[POINT] {T = 1500, x(Ti) = 1}
[end]

// Phase diagram: Nb-Si-Ti Isopleth
// calculate a ternary phase diagram: Nb-Ti0.5Si0.5 Isopleth
[begin] {Nb-Si-Ti Isopleth}
[CalculationType] {SECTION}
[COMPONENT] {Nb Si Ti}
[POINT] {T = 3000, x(Nb) = 1}
[POINT] {T = 300, x(Nb) = 1}
[POINT] {T = 300, x(Si) = 0.5, x(Ti) = 0.5}
[end]

```

3元系縦断面图计算

// calculate a ternary phase diagram: Nb-Ti-Si liquidus projection 3 元系液相面図計算

```
[begin] {Nb-Si-Ti liquidus projection}
  [CalculationType] {Projection}
  [COMPONENT] {Nb Si Ti}
  [Interval] {T = 200C}
//   [Interval] {T = 200K}
//   // isothermal lines with given interval value will be calculated
//   // without interval value, only liquidus projection will be calculated
//   // interval value of T can be defined in unit K or C, default is in K
//   // 200C calculates isothermal lines at T = 1800C, 2000C, 2200C,
//   // 200K calculates isothermal lines at T = 2200K, 2400K, 2600K,
[end]
```

// calculate solidification sequence of a ternary alloy 3 元系凝固計算

```
[begin] {Nb-Si-Ti solidification}
  [CalculationType] {solidification}
  [COMPONENT] {Nb Si Ti}
  [POINT] {T = 3000, x(Si) = 0.8, x(Ti) = 0.1, x(Nb) = 0.1}
  [model] {Scheil}
//   [model] {Lever}
//   // two options for solidification model: scheil or lever

  [output] {FileName = "Scheil_###.dat", format = "phaseName, T, fs, fl, Hm, ftot(*),
f_tot(*)"}
//   // for solidification simulation, fs is total accumulated fraction of solid, fl is fraction of liquid,
//   // ftot(*) is accumulated fraction of individual solid phase given in the
//   // same sequence as "phaseName"
//   // accumulated only for Scheil, otherwise f(*)=equilibrium fraction.
//   // f_tot is same as ftot, except that only the phases that solidified
//   // at the temperature are shown.
[end]

// exit: end of batch calculation
[exit]
```

お問合せ先

株式会社 材料設計技術研究所

材料科学研究部

電話 : 03-6717-4096

FAX : 03-6717-4097

電子メール : info@materials-design.co.jp

住所 : 〒108-6028

東京都港区港南 2-15-1

品川インターシティA棟 28階

平成 21 年 6 月 10 日

改平成 23 年 11 月 21 日