# 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
	組成ー自由エネルギー曲線	泉						•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	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	Ę						•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	80
14.	3 軸の単位をモル比率から重	〔 量〕	上	率し	こ羽	変)	える	57	与治	去			•	•	•	•	•	•	•	80
14.	4 計算状態図上に印を付ける	5方液	去					•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	84
14.	5 テーブル値をコピーする大	7法						•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	87
14.	6 正三角形の図を表示させる	5方液	去					•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	88
14.	7 相の重量分率値の表示方法	Ę						•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	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びます。

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。

PANDAT 8.2 Setup	
	Welcome to PANDAT 8.2 Setup Wizard
	The Setup Wizard will install PANDAT 8.2 on your computer. Click Next to continue or Cancel to exit the Setup Wizard.
	< Back Next > Cancel

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

2-3 Read me file 画面になります。

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。

Next ボタン
----------

Next   ホタン	Next ボ	タン
------------	--------	----

Next	ボタン
------	-----

2-5 Installation Folder 画面になります。
標準の場所でよければ 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¥ Next 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。

Install ボタン

はい

B PANDAT 8.2 Setup

- 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?」
- 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。
   OK ボタン
- 2-9 Completing 画面になります。 Finish ボタン

Advanced Installer < Dark Bark Concel PANDAT 0.2 Setup Completing the PANDAT 8.2 Setup Wizard Click the Frink button to exit the Setup Ward.

ボタン

Please wait while the Setup Wizard installs PANDAT 8.2. This may take several

Device Driver Installation Utility 🔀



Enish

- 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 フォルダー内にある Binary フォルダーの全てを 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ーにコピーします。

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ーにコピーします。

## 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

- 3-2 DBアイコンを 選択します。



標準インストールした場所

 $C: \cite{Program Files} \cite{ComputermLLC} \cite{Pandat} \cite{Pandat} \cite{Subarrow} \cite{Pandat} \cite{Subarrow} \cite{Pandat} \cite{Subarrow} \cite{Pandat} \cite{Pandat} \cite{Subarrow} \cite{Pandat} \cite{Subarrow} \cite{Pandat} \cite{Pandat} \cite{Subarrow} \cite{Pandat} \cite{Pandat}$ 

に格納されている AgCu.tdb ファイルを選択します。

ァイルを開く				?
ファイルの場所の:	🚞 Binary		🗸 🧿 🖉 🖻	°
🖻 Ag Au.tdb	AgSn.tdb	AlCr.tdb	AlMn.tdb	AlZn.tdb
AgCu.tdb	AlAs.tdb	AlCu.tdb	ALNB.tdb	AsGa.tdb
AgGe.tdb	AIB.tdb	AlFe.tdb	AlNi.tdb	AsGe.tdb
AgPb.tdb	AlBa.tdb	AlGe.tdb	AlRe.tdb	AsIn.tdb
AgSb.tdb	AlBitdb	AlLi.tdb	AlSi.tdb	AuBitdb
AgSitdb	🖻 AlCa.tdb	🗩 AlMg.tdb	📄 AlSn.tdb	AuGe.tdb
<				>
ァイル名(N):	AgCu.tdb			■■ ( ( )
ァイルの種類(工):	Database Files	; (*.pdb;*.tdb)	~	キャンセル

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」  $\rightarrow$ 「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。

	oudit Littes	PanEngine Parameters		
Pres	ssure Atmosphere Pascal Bar	Temperature © Kelvin © Celsius	Oomposition Mole Weight	<ul> <li>Percent</li> <li>Fraction</li> </ul>

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℃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。

Units	Scan Lines PanEngine Parameters	
	Search Level O Level 1 (less search) O Level 2 (extensive search)	

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。

Set up lines to scan for phase boundaries:           dy         0.01           dx         0.01           dy         0.01	-
t         t         t         t         t           dy 0.01         dx 0.01         dx 0.01         dx 0.01         dx 0.01	+
t         t         t         t           dy         0.01         dx         0.01         dx         0.01           dy         0.01         dx         0.01         dx         0.01	1
±         ±         ±           dy         0.01         dx         0.01         dx         0.01           dy         0.01         dx         0.01         dx         0.01	1
dy 0.01 dx 0.01 dx 0.00 dy 0.01 dy 0.0	
dy 0.01 dy 0.0	1
	1
Add Option 1 Add Option 2 Add Option 3 Add	Option 4
Number of steps per scan line 100 Cle	ar List
Horizontal scan line at fraction colleman Maxis	
Vertical scan line at fraction 0.01 from Y axis Horizontal scan line at fraction 0.99 away X axis	
Vertical scan line at fraction 0.99 from Y axis	

- 3-6 Ag-Cu 2元系状態図を計算してみましょう。
  - ツールバーのアイコン M をクリックします。

右図は	Calculate Section	on (2D)		X
温度単位かし、	Y-Axis Point		Options	ОК
組成単位がモル%		Value	Select Phases	Cancel
と指示された	T[C]	2000	Save Condition	Load Condition
場合の表示です。	×%[Ag]	100		Immobile Comps.
	×%[Cu]	0		·
	Total x%	100	T IY	
単位を変更すれば			L.	
この画面の単位表示も				
白動的に亦われます				
日期的に変わります。				
	-Origin Point		X-Axis Point	←
		Value		Value
	T[C]	0	T[C]	0
	×%[Ag]	100	×%[Ag]	0
	x%[Cu]	0	x%[Cu]	100
	Total x%	100	Total ×%	100

- 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。



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。





Calculation Conditions: T = 869.287 K (596.137 C) x(Ag) = 0.1986 wt(Ag) = 0.2961 x(Cu) = 0.8014 wt(Cu) = 0.7039 Phase(s): Fcc (f=0.80241) x(Ag) = 0.01493 wt(Ag) = 0.02507 x(Cu) = 0.9851 wt(Cu) = 0.9749 Fcc (f=0.19759) V(Ag) = 0.9444 wt(Ag) = 0.9665 Cancel OK	Font Size (50 - 400) [180 Position of Text (Top Center): X 80.14 Y [596.137	Rotate (-180 - 180) 0 Font Roman Swiss Symbol	ol
	Calculation Conditi T = 869.287 K x (Ag) = 0.198 x (Cu) = 0.801 Phase(s): Fcc (f=0.80241) x (Ag) = 0.014 x (Cu) = 0.985 Fcc (f=0.19759) x (Bg) = 0.944	$\begin{array}{l} \text{Prime} \\ Pr$	

#### 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
  - DBアイコンを 選択します。



標準インストールした場所

#### $C: \cite{Program Files} \cite{ComputermLLC} \cite{Pandat8.2} \cite{Database} \cite{Binary} \cite{B$

に格納されている

CrFe.tdb ファイルを選択します。

ファイルを開く				? 🛽
ファイルの場所型:	🗀 Binary		🖌 🔾 💋 E	<mark>۶</mark> -
AuSb.tdb AuSi.tdb AuSi.tdb AuSi.tdb AuSi.tdb AuSi.tdb AuTi.tdb BaCu.tdb AuTi.tdb AuTi.tdb AuTi.tdb AuSi.tdb Au	BiGa_MDT.tdb BiSn.tdb BiSn.tdb BiSt.tdb Bit.tdb Bit.tdb CCr.tdb DCF5.tdb BiC55.tdb Bi	CHf.tdb CNItdb COCr.tdb CoCu.tdb CoCu.tdb CoFe.tdb CoFe.	CoNitdb CoSitdb CoTatdb CoTatdb CoWtdb CrCutdb	CrMn.tdb CrMo.tdb CrNi.tdb CRO.tdb CRO.tdb CRC.tdb
≤ </td <td>CrFe.tdb</td> <td></td> <td></td> <td>■ Notestable</td>	CrFe.tdb			■ Notestable
ファイルの種類(工):	Database Files (	*.pdb;*.tdb)	~	キャンセル

② 元素を選択する画面が表示されます。

ここでは  $Cr \ge Fe の 2 元素を選択します。$  **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℃、 Iculate Section (2D) 組成単位がモル% -Axis Poi OK Options Value と指示された Select Phases Cancel T[C] 2000 Save Condition Load Condition 場合の表示です。 xX[Cr] 100 Immobile Comps. xX[Fe] 0 Total x% 100 I 単位を変更すれば この画面の単位表示も 1 Origin х X-Axis Point -自動的に変わります。 Origin Point Value Value T[C] T[C] 0 0 100 x%[Cr] x%[Cr] 0 xX[Fe] x%[Fe] 100 Total x% 100 Total x% 100

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



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、 $\gamma$ ループ、 $\sigma$ 化合物相、 $\alpha$  (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。





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。



BCC_A2 DEMENTITE	OK
FCC_A1	Cancel
GRAPHITE	
M23C6	
M5C2	Sel/Cir All
4703	Jer Oir Mil

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。

Start Point	1653	End Point		-
	Value		Value	Cancal
T[C]	1600	T[C]	600	Caliber
w%[C]	0.5	w%[C]	0.5	Options
w%[FE]	99.5	w%[FE]	99.5	Select Phase
Total w%:	100	Total w%:	100	Save Conditio
	15.40			Load Conditio
				Immobile Com
		Calculation Type		
lumber of Steps	20	Stable System		

0.5wt%C 濃度固定

温度を 1600℃から 600℃まで

20 点(50℃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。



先ず、左窓より Default table をクリックし数値表を表示させます。

💭 File Edit View Database Batch Calci D 🎯 🖬 🖹 🆓 🕼 🚳 🛝 🛍 🗙 DB	MS 🚉 🖬 💽	izer Pa	A 4 +	an lable	Graph Window Help Bis 🖂 🛔 🎬 🗗 🛱 🗳
Text File	T		W%(C)	W%6(FE)	phaseName
Dotabase	с				
i - Phases	1	1600.00	0.500000	99.50000	LIQUID
- A Calculated Results	2	1550.00	0.500000	99.50000	LIQUID
	3	1500.00	0.500000	99.50000	LIQUID
Line Calculation_1	4	1435.34	0.500000	99.50000	LIQUID+FCC A1
Graphs	5	1400.00	0.500000	99,50000	FCC A1
E Tables	6	1350.00	0.500000	99,50000	FCC A1
Default Table	7	1300.00	0.500000	99,50000	FCC A1
	8	1250.00	0.500000	99,50000	FCC A1
	9	1200.00	0.500000	99,50000	FOC AL
	10	1150.00	0.500000	99 50000	FCC A1
	11	1100.00	0 500000	90 50000	FOC AL
	12	1050.00	0.500000	00 50000	FOC A1
	17	1000.00	0.500000	00 50000	ECC A1
	1.0	050.00	0.500000	99.30000	FOC_AL
	17	930.00	0.500000	99.50000	FOC AS
	15	900.00	0.500000	99.50000	POC_AL
	10	850.00	0.500000	99,50000	PCC_A1
	17	800.00	0.500000	99.50000	FCC_A1
	18	767.49	0.500000	99.50000	FCC_A1+BCC_A2
	19	750.00	0.500000	99.50000	FCC_A1+BCC_A2
	20	726.61	0.500000	99.50000	FCC_A1+BCC_A2+CEI
	21	726.61	0.500000	99.50000	BCC_A2+CEMENTITE-
	22	700.00	0.500000	99.50000	BCC_A2+CEMENTITE

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。
先ず、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。

ion	Tabl	le Graph Window He	lp
4 4	123-	Import Table	1
	HØ	Create & Edit Table	
W9		Save Selected Table	l
		Export to Excel	
) 9	2	Create Graph	



f(\*)の部分を選択し、 プルダウンから phaseName を選択します。

x	-	w	•	т	-	f(*)	•	fs
G	•	G(:)	•	pmG	•	phase	eNam	ie
Phase Pro	opertie	es				react	ionEq	luatio
×(@)	•	w(@)	•			invar	iantR	eacti
G(@)	•	G(@:)	•	pmG(@)	•	extre	me(T	T)
mrcul				510-	-	DF(*)	)	
I [C]]						act(*	)	
						ZPF(	*)	

pmG(@:) の部分を選択し、 プルダウンから a(\*@\*:ref\_phas) を選択します。

x	-	w	-	т	-	f(*)		fs		
G	•	G(:)	÷	pmG	•	pmG(:)	•	Vm	•	
Phase Pi	ropertie	es								Database Info.
×(@)	-	w(@)						DC(@)	-	Comps. 🗸
G(@)	÷.	G(@:)		pmG(@)		pmG(@:	) .	Vm(@)	•	Phases 🗸
						a(*	@*:r	ef_phase	2)	
able oper-	able operations:						G(*@ H(*@ S(*@	*:phase *:phase	)	° × ≁ 4
1	Defau	t	D	efault Tal	ble	pm	Cp(*	@*:phas	e)	tionEquati

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。

Fable of	perations:		E 3 4	
ID	Table Type	Name	Fields	Replace
1	Default	Default Table	T[C], w%(*), phaseName, reactionEquati	T
	Default	-		В

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。 Create & Edit Table

~	1999 - 1999 -	141	2	т	-	f(*)		fe	020		
Ĝ		G(:)		pmG		pmG(:)	÷	Vm	•		
Phase P	ropertie	BS								Database Info	).
×(@)		w(@)	-					DC(@)	-	Comps.	1
G(@)		G(@:)	÷	pmG(@)		pmG(@:)		Vm(@)	÷	Phases	3
T [C],	phas ations:	eName,	, a ((	C@FCC_	_A1	GRAPH	ITE	.)		🖄 🗙 🕈	
T[C], Table oper	phas ations: Table	eName, Type	, a (0	ame	AI	Fields		.)		≝×≁	
T [C], Fable oper ID 1	phas ations: Table Defau	eName, Type	, a ((	ame efault Tab	_AI	Fields T[C], w	/%(*	), phaseN	lame	X      A  A     A	i.
T [C], Fable oper ID 1	phas ations: Table Defau Defau	eName, Type It	, a ((	ame efault Tab	_AI	Fields T[C], w	/%(* nasel	), phaseN Name,a(C	lame		i
T[C], Table oper ID 1	phas ations: Table Defau Defau	eName, Type It	, a ((	ame efault Tab	_AI	Fields T[C], w	/%(* nase/	), phaseN Name,a(C	lame @FC	い × チ , reactionEquat C_A1:GRAPHIT	i.

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。

🕎 File Edit View Database Batch Calculation	PanOp	ntimizer Pa	nPrecipitation Table Graph V	Vindow Help
D 📽 🖬   b 🏦 b 🎼 🖦 🗮 🗙   DB MS 💩	E (	• = =	🍐 🔦 🛹 레 🥂 🐘 🖂 🛔	🎬 🗗 🕼 🖂 💼 🗔 🛛
Text File		т	phaseName	a(C@FCC_A1:GRAPHITE)
Database     Components		с		
👜 🌍 Phases	1	1600.00	LIQUID	
Calculated Results	2	1550.00	LIQUID	
Section Calculation	3	1500.00	LIQUID	
Line Calculation_1	4	1435.34	LIQUID+FCC_A1	0.079343
Graphs	5	1400.00	FCC A1	0.084726
Default Table	6	1350.00	FCC A1	0.093429
Table 1	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	ECC A1	0 272377
	15	000.00	ECC A1	0 327745
	16	950.00	FCC_A1	0.400021
	17	000.00	FOC_A1	0.400721
	10	267.40		0.499731
	18	767.49	FCC_AI+BCC_AZ	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

 $C: \cite{Program Files} \cite{ComputermLLC} \cite{Program Files} \cite$ 

に格納されている NbSiTi.tdb ファイルを選択します。

ファイルを間く				? 🛛
ファイルの場所の:	C PANDAT 8.2	<b>v O</b>	🔊 🖻 🛄	
Bin Database PANDAT_Exan PanOptimizer_S PanPrecipitatio NbSiTi.tdb	iple_Book iample n_Sample			
ファイル名(N):	NbSiTi.tdb			(@
ファイルの種類(工):	Database Files (*.pdb;*.tdb)		¥ ++	地

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。

OK 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。



Available Components	Selecte	d OK
	Nb Si	Cancel
	>> Ti	
	<<	

# 3-12 ツールバーのアイコン 🖾 をクリックします。

500℃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。



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

## 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。

OK キャンセル 適用(A)

•

ID:Table

1:Default Table

# x%(T) phaseName f(DIAMOND\_A4) f(NbSi2) f(Si2Ti) f(TiSi) <-> Y 2xx%(Si) Add Delete Swap Replace × ID:Y 2:x%(Si) ID:X ID:Calculation 1:x%(Nb) **D**:Section Calculation

Configure Graph

Calculation Results

Section Calculation

Available Tables

Default Table

×%(Nb)

Graph Axes Graph Options Plot Setup

-

-

^

Choose Customized Plot Set

Please Choose a Plot

<-> X 1.5%(Nb)

3-15 タイラインを表示させる手順

x%(NB)

40

60

80

1Ô0

NB

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。

軸変数が変わります。

3

19 (S)

20

0¥ 0

тι

40

20

適用ボタンをクリックします。

80

60

SI

100,

raph Axes	Graph Options	Plot Setup			
Calculation	Results		-		
Section Ci	alculation_2		-		
wailable 1	ables				
Default Ta	ble		•		
x%(NB) x%(SD x%(TD phaseNam reactionEc f(DIAMON f(NBSI2)	e Juation D_A4)		Special Plot Lis Please Choose Pl. Cl. Tie-Lines S-2.0 Add Del	t a Plot a Plot ete Swap	Replace
SIZTD					ID:Table
ID:X	ID.Y	I	):Calculation		to rable
ID:X 1:::%(NB)	ID:Y 2:xWSD	11 2:	DCalculation Section Calculation_2		1:Default Table

2行目が表示されます。 適用ボタンをクリックします。



Section Calculation.2  Available Tables The Lines Twitting WR(NB) phaseName Control Table Tie-Lines Control Tie-Lines Co	Calculation	Results					
Available Tables Tie Lines Special Plot List Tie-Lines XMNB) XMND Ph/seName (> X 1:x/KNB) (> X 2:x/KSD Add Delete Swap Replace IDX IDY IDCalculation IDTable 1:x/KNB) 2:x/KSD	Section Ca	alculation_2		-			
The Lines         Image: Constraint of the lines           Tw(NB)         Special Plot List           XM(TD)         Tie-Lines           phaseName         Image: Constraint of the lines           IDX         IDY         IDCalculation           1:5x(NB)         2xx(SD)         Tie-Lines           IDX         IDY         IDCalculation         IDTable           1:5x(NB)         2xx(SD)         20ection Calculation         1:0efault Table	Available T	ables		0000			
T	Tie Lines			-			
IDX         IDY         IDCalculation           1:x4(NB)         2:x4(SD         Add         Delate         Swap         Replace           IDX         IDY         IDCalculation         IDTable         IDTable           1:x4(NB)         2:x4(SD         2:x4(SD         2:x4(SD         2:x4(SD	T			Special	Plot List		
JMCD         IDX         IDY         IDCalculation         IDTable           IDX         IDY         IDCalculation         IDTable           IDX(RD)         2:xXISD         2:xXISD           IDX         IDY         IDCalculation         IDTable           I:xXIND         2:xXISD         2:xXISD         2:xXISD	XW/SD			Tie-Lin	es		
(→Y)         2:x8/SD           Add         Delete         Swap           IDX         IDY         IDCalculation         IDTable           1:x8(NB)         2:x8(SD         25ection Calculation,2         1:Default Table           1:x8(NB)         2:x8(SD         25ection Calculation,2         2:The Lines	x%(TD phaseNam	×K(TD phaseName			<-> X 1∞#(NB) <-> Y 2∞#(SD		
Add         Delete         Swap         Replace           ID:X         ID:Y         ID:Calculation         ID:Table           1:x4(NB)         2:x4(SD         25ection Calculation.2         1:0efault Table           1:x4(NB)         2:x4(SD         25ection Calculation.2         2:The Lines	84						
IDX         IDY         IDCalculation         IDTable           15:#(NB)         25:#(SD)         25:ection Calculation 2         1-Default Table           15:#(NB)         25:#(SD)         25:ection Calculation 2         2:The Lines				Add	Delete	Swap	Replace
1xx%(NB) 2xx%SD 2Section Calculation_2 1:Default Table Txx%(NB) 2xx%SD 2Section Calculation_2 2:The Lines	ID:X	ID:Y	1	D:Calculation		ID	Table
TxXXXB/ 2xXXSD 2Section Calculation_2 2:Tie Lines	1:x%(NB)	2:x%(SD	2	Section Calcul	ation_2	1:0	efault Tabl
	15:%(NB)	2:04:50	2	Section Galcul	ation_2	2:1	ie Lines

#### 3-16 軸値の調整

Graph Axes タグにて
3箇所の情報を(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。

aph Axes	Graph Options	Plot Setup				
Scale						
	Set Y Axis Limit	s 🔽	Set X Axi	s Limits		àibbs ∐riangle
Y Max	100	X Max	100			
Y Min	0	× Min	0			
- Ticks	10	# Ticks	10		ī	
Title					-	
1	Graph Title	Diagram Title			Size:	160
1	✓Y Axis Label	x94(Si)		1	Size:	160
			Tick	Label Fon	Size:	160
(	🗹 🗙 Axis Label	×\$6(Nb)			Size:	160
	Component Lab	el Top	Si		Size:	160
		Origin	Ti	Right I	b	T

以上の操作で

Nb-Si-Ti 3元系 500℃の等温断面図を得られました。



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。

•



	Galculate	Point (OD)	×	
	Point	1	ОК	
		Value	Gancel	
	T[C]	500		
	P[atm]	1		
	×[C]	0.3	Uptions	
如代収束の合計値は	×[0]	0.6	Select Phases	
組成比率の合計値は	×[SI]	0.2		
目動的に計算され Total 欄に表示されます	Total:	1.1	Pandat	
			Error wit	h composition!

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

Point		ОК
	Value	Gancel
T[C]	500	
P[atm]	1	Ontinue
×[C]	0.3	Options
×[0]	0.6	Select Phases
×[SI]	0.1	
Total:	1	

# 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 温度を入力し 組成値を入	ます。 ます。 力します	計算終了	了点を指示します。 	>
Calculate Line t Start Point T[C] x[NB] x[TT] Total x:	1D) Value 2000 1 0 1		End Point Value T[C] 2000 x(NB] 0 x(TI] 1 Total x: 1 Calculation Type ③ Stable System ③ Separate Phases	OK Cancel Options Select Phases Save Condition Load Condition Immobile Comps.	
	計算回数を指 この例は、維 100 回計算し	示します  成値を( ます	ナ。 0.01 刻みで	必要な場 計算する;	合のみ、 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**℃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	CompuTherm Pandat 8.2 - [Pandat     File Edit View Database Batch	nt2] Ca	loulation	PanOntimizer	PapPrecipit	ation Table Gran	Window Heln			
		×II	DB MS EL		MAA	→ 제 제 B <sub>B</sub> E		: 💼 📼 🗌	R # X	同日丁
できます。	- Text File		T	×(NB)	x(TD)	phaseName	reactionEquation	f(BCC_A2)	f(LIQUID)	G
	🛞 📑 Database		С							J
	Components	47	2000.00	0.540000	0.460000	BCC_A2		1.000000		-164729.86
	E Phases	48	2000.00	0.530000	0.470000	BCC_A2		1.000000		-164729.68
	Calculated Results	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
	Default Graph	51	2000.00	0.505483	0.494517	BCC_A2+LIQUID	LIQUID -> BCC_A2	1.000000	0.00	-164700.31
		52	2000.00	0.500000	0.500000	BCC_A2+LIQUID	LIQUID -> BCC_A2	0.946428	0.053572	-164689.16
	Default Table	53	2000.00	0.490000	0.510000	BCC_A2+LIQUID	LIQUID -> BCC_A2	0.848726	0.151274	-164668.81
	E Int Calculation	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
この部分を		56	2000.00	0.460000	0.540000	BCC_A2+LIQUID	LIQUID -> BCC_A2	0.555620	0.444380	-164607.78
力11.55万		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
します		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
	7	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	มอมก			1 000000	-164203.93
			温度	E 濃	度	平衡相名		相比	率	
100回の計算だけで 相境界点も計算し、 表示します。										

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。

<b>Calculate</b> Line	(1 D)				
Start Point T[C] x[NB] x[T] Total x:	Volue 0 05 05 1	End Point TIC3 X[NB] X[T0] Total x: Calculation Type Ostable System Ostable System Ostable Phase	Value 3000 0.5 0.5 1	OK Cancel Options Select Phases Save Candition Load Condition Load Condition	・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 (aTi)相です。

Graph Options			
Graph Axes Graph Options			f(BCC A2)
Scale			f(UCD A2)
Set Y Axis Limits Set X A	ixis Limits	Gibbs <u>T</u> riangle	$I(HCP_A3)$
Y Max 1.1 X Max 2500			f(LIQUID)
Y Min 0 X Min 0			
# Ticks 11 # Ticks 5		1 1	
Title			
Graph Title Diagram Title		1-	
		0.9-	
		0.8	
	S		
	ion	0.7-	
	ract	0.6-	
	ы Б	0.5	
	has	0.4-	
	с.	0.3-	
		0.2-	
		0.1-	
		0	
		0 500 1000	1500 2000 2500
	6		TICI

# 組成ー自由エネルギー曲線 を計算し表示する場合

	Calculate Line (1 D)			
Nb-Si 2元系 温度 1600℃の断面を 計算します。	Value           T(C]         1600           x[NB]         1           x[SI]         0           Total x         1	<b>₽</b>	End Point T[C] 1600 x[NB] 0 x[SI] 1 Total x: 1 Calculation Type O Stable System • Separate Phases	OK Cancel Options Select Phases Save Cordition Load Cordition Immobil: Comps.
	下段の計算タイプ Ser 全ての相 注目した	parate さ を選択す い相だけ	を選びます。 <sup>+</sup> ると図が複雑に けにします。	こなるので
	選択した	相の背景	Phase Selection	
計算タイプ Separate Phas	色は青色 ここでは 4 個の相 ses では平衡計算を行わ	です。 とします ず、	<ul> <li>Liquid BCC A2 FCC A1 HCP A3 DIAMOND A4 TiSi Nb3Si Nb3Si Nb3Si Nb3Si Nb3Si Si2Ti Si3Ti5 BetaNb5Si3</li> </ul>	OK Cancel Sel/Cir All
それぞれの相に対して自由	エネルギー曲線値を求め	うます。		
組成幅を持たたい		, .		
ラインコンパウンド				
小会物担け病い構築				
16日初泊は巫( ) (映脉	Computherm Pandat 8.2 - [Pandat 1]	n PanOptimizer P	anPrecipitation Table Graph Windo	
ご衣されよす。	L Lev Ment Si car La Car La Car Ma 6025 × DB MS → L Text File ⊕ ⊕ Database ⊕ ☆ Components		a 22 <b>*2</b> +** 210 /10 <b>108</b> 123   100	

• [2] Components
 Phases
 Calculated Results
 Line Calculation,1
 Graphs
 Default Graph
 Default Graph
 Tables -50000 -60000--70000 -80000 Gibbs Energy (I/mol) -90000 -100000 -110000 -120000--130000 -140000 -150000--160000 0 Sl NB x(NB)

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。

🕄 CompuTherm Pandat 8.2 - Pandat1]						
📴 Eile Edit View Database Batch 🖸	Calculation PanOptimizer	PanPrecipitation	<u>T</u> able <u>G</u> raph <u>W</u> indo	w <u>H</u> elp		
D 🛎 🖬   B 🖀 B   🍜   A 🖻 ×	DB MS 斗 🗉 🖃	🖾 🗛 😽 🖥	311 🖉 🥦 🖂 🕴 🎬	₿₿⊻∎⊠	$\mathbb{R} \not \cong \mathbb{X} [$	≣ IИТ /
Text File	Т	×(NB) ×	(SD phaseName	G(LIQUID) G(BCC_A	) G(NB5SI3)	G(NBSI2)
œ— 📑 Database	C			JJ	J	J
Components	1 1326	85 1.000000 1	.0000e-020 LIQUID	-82103.46		
Calculated Results	2 1326	85 0.990000 0.	010000 LIQUID	-84328.43		
E Line Calculation 1	3 1326	85 0.980000 0.	020000 LIQUID	-86362.06		
Graphs	4 1326	85 0.970000 0.	030000 LIQUID	-88317.18		
📃 🖂 Default Graph	5 1326	85 0.960000 0.	040000 LIQUID	-90216.25		
🖃 🗂 Tables	6 1326	85 0.950000 0.	050000 LIQUID	-92068.95		
Default Table	7 1326	85 0.940000 0.	060000 LIQUID	-93880.25		
	8 1326	85 0.930000 0.	070000 LIQUID	-95652.85		
	9 1326	85 0.920000 0.	080000 LIQUID	-97388.19		
	10 1326	85 0.910000 0.	090000 LIQUID	-99086.95		
	11 1326	85 0.900000 0.	100000 LIQUID	-100749.30		
	12 1326	85 0.890000 0.	110000 LIQUID	-102375.10		

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。

X

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。

<u>6.1</u> 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。





## 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。

Axis Point		Ontions	OK	Y-Axis Point		Ontions	OK
	Value	Calast Phases	Connel		Value	Salast Phases	Canaal
r[c]	2000	Select Phases	Cancel	T[K]	2000	Select Phases	Cancel
[Nb]	1	Save Condition	Load Condition	×[AG]	0.88	Save Condition	Load Conditio
[Si]	0	The T		×[CU]	0	m tr	
(Ti)	0	L.		×[IN]	0.02	<b>.</b>	
fotal $x$	1			×[SN]	0		
			~	×[ZN]	0.1		v
			<u> </u>	Total x:	1		
inin Dalat			<b>E</b>	Origin Point		V-Avia Paint	E
IGHT FORT	Value		Value	Chentonic	Value		Value
r[c]	2000	T[C]	2000	T[K]	2000	T[K]	2000
(Nb)	0	×[Nb]	0	×[AG]	0	×[AG]	0
(Si]	1	×[Si]	0	×[CU]	0.88	×[CU]	0
(Ti)	0	×[Tī]	1	×[IN]	0.02	×[IN]	0.02
Fotal x:	1	Total x:	1	×[SN]	0	×[SN]	0.88
				×[ZN]	0.1	×[ZN]	0.1
				Total x:	1	Total x	1
		<u> </u>					
計算統	皆果例						
		Nb-Si	·Ti の 2000℃				
			NB				
	6		1 <sub>X Bcc</sub>				
	6-N		A \ Loo				



#### 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。

	Value	Options	UK
TICI	2600	Select Phases	s Cancel
-Dup1	2000	Save Conditio	n Load Condition
(INB)	0.9	J	Immobile Comps
(3) (3)	0		
	0.1	· m Y	
igin Point		X-Axis Point	Ē
igin Point	Value	X-Axis Point	Value
igin Point	Value 600	X-Axis Point	Value 600
igin Point [[C] <[NB]	Value 600 0.9	X-Axis Point T[C] x[NB]	Value 600 0
igin Point [[C] ([NB] ([S1])	Value 600 0.9 0	X-Axis Point T[C] x[NB] x[S1]	Value 600 0 0.9
igin Point [[C] ([NB] ([SI] ([TI]	Value 600 0.9 0 0.1	X-Axis Point T[C] x[NB] x[SI] x[TI]	Value 600 0 0.9 0.1
rigin Point T[C] (NB] (SI] (TT] Fotal x:	Value 600 0.9 0 0.1 1	X-Axis Point T[C] x[NB] x[SI] x[TI] Total x:	Value 600 0 0.9 0.1 1
(NB) (C) (SI) (CTI) Fotal x:	Value 600 0.9 0 0.1 1	X-Axis Point T[C] x[NB] x[SI] x[TI] Total x:	Value 600 0 09 0.1 1

計算結果例

Nb-10at%Ti-Si の縦断面図





指示画面は

-Axis	Point		Option	ns	OK
	Value		Salact Pl	10000	Cancel
T[C]	2600	-	Jelect H	10505	Cancer
×[Nb]	1		n 🚺	1	
x[Si]	0		5		
x[Ti]	0				
Total:	]1				
Total:	]1			) ]	×
Total: rigin P	] 1 oint		X-Axis I	Drigin   Point   Value	×
Total: rigin P	0		X-Axis I	Point Value	× E
Total: rigin P T[C] ×[Nb]	oint Value 0 1		X-Axis I	Point Value 0	×
Total: rigin P T[C] ×[Nb] ×[Si]	1 Value 0 1 0		X-Axis I T[C] x[Nb] x[Si]	Point Value 0 0 0.5	×
Total: rigin P T[C] ×[Nb] ×[Si] ×[Ti]	1 Value 0 1 0 0		X-Axis T[C] ×[Nb] ×[Si] ×[Ti]	Point Value 0 0.5 0.5	Ě

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℃ ~ 1600℃、 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。



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。

軸範囲をフラクション(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℃を0とし 500℃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。



#### <u>Ionic Liquid Model 計算例</u>

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.



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。





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 Valiables ボタンをクリック します。

Set Valiables 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。

Axis Point		Options	OK
	Value	Select Phases	Cancel
T[C]	500	Save Condition	Condition
P[Pa]	101325	ouve continuen	
ck[CR]	100		Stability
ck(FE)	0	m Y	
c%[0]	0		
Total x%	100		
		1 Origin	
rigin Point		X-Axis Point	n X
igin Point	Value	X-Axis Point	Value
iein Point	Value 500	X-Axis Point T[C]	Value 500
rigin Point T[C] P[Pa]	Value 500 101325	X-Axis Point T[0] P[Pa]	Value 500 101325
tigin Point T[C] P[Pa] ck(CR]	Value 500 101325 0	X-Axis Point T[0] P[Pa] x#[CR]	Value 500 101325 0
igin Point T[C] P[Pa] K(CR] K(FE]	Value 500 101325 0 100	-X-Axis Point  T(C) P(Pa] x%(CR) x%(FE)	Value 500 101325 0 0
igin Point T[C] ?[Pa] (X[CR] (X[CE] (X[C]	Value 500 101325 0 100 0	Crigin     Crigin     Crigin     Contemporation     Contemporation     Contemporation     X≪ICPI     X≪ICPI     X≪ICO1	Value 500 101325 0 0 100



系の温度を 1200 ℃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。

	Value	Uptions	UK
TÍCI	1200	Select Phases	Cancel
P[Pa]	101325	Save Condition	Load Condition
nc(CR)[moles]	0	Set Variables	Stability
nc(FE)[moles]	1	- <b>†</b> Y	
	0	1	
iog10P(02)[atm] rigin Point		Crigin Origin	n X
iog10P(02)[atm] rigin Point	Value	T Origi	n X
iog10P(02)[atm] rigin Point T[C]	Value 1200	X-Axis Point	N Xalue 1200
rigin Point T[C] P[Pa]	Value 1200 101325	X-Axis Point TC: P[Pa]	n X Value 1200 101325
rigin Point T[C] P[Pa] nc(CR)[moles]	Value 1200 101325 0	X-Axis Point TC] P[Pa] nc(CR)[moles]	N X Value 1200 101325 1
rigin Point T[C] P[Pa] nc(CR)[moles] nc(FE)[moles]	Value 1200 101325 0 1	X-Axis Point TCJ P(Pa] nc(CR)[moles] nc(FE)[moles]	n X Value 1200 101325 1 0





Fe-Cr-O 3元系 1200°C stability diagram



Fe-Cr-O 3元系 1700℃ 等温断面図

#### <u>Associate Model 計算例</u>

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 activity of Cu at 1200 K

the heat capacity of  $\mathrm{Cu}2\mathrm{Mg}$ 

## 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℃、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。

ここには

されます。

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



OK

キャンセル

適用(A)



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
$\lceil \text{Available Tables}  floor$
「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。

Calculation Re	sults				
Liquidus Proje	ction_2	•			
Available Tabl	es	_			
Default Table		•			
T (NP)			Special Plot List		
×%(SD			Please Choose a Plo	t	-
x%(TD			(-> X		
reactionEquat	ion				_
G			<-> Y		
			Add Delete	Swap Repla	e
ID:X	ID:Y	ID:Ca	lculation	ID:Table	Ĩ
3:x%(TI)	1:x%(NB)	5:Liqu	idus Projection_2	1:Default Ta	ble
3:x%(TD	1:×%(NB)	5:Liqu	idus Projection_2	2:Isothermal	Li

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。

	Т	invariantReaction	and a start and a start and a start a		
			XXXINB)	x%(SD	×%(TD)
1	C				
1	1973.85	LIQUID + NB5SI3 + BNB5SI3 -> NB3SI	78.88136	20.47809	0.640552
2	1813.74	LIQUID + BNB5SI3 -> NB5SI3 + NBSI2	37.10191	57.07000	5.82809
3	1757.47	LIQUID + SI3TI5 -> TI5SI4 + NB5SI3	18.73855	52.92280	28.33865
4	1629.56	LIQUID + NB5SI3 -> NBSI2 + TI5SI4	20.02617	57.17120	22.80263
5	1599.23	LIQUID + NB5SI3 -> SI3TI5 + NB3SI	23.19625	18.15362	58.65013
6	1469.49	LIQUID + TI5SI4 -> NBSI2 + TISI	7.12838	63.23153	29.64009
7	1459.19	LIQUID -> SI2TI + NBSI2 + TISI	6.64458	63.79938	29.55604
8	1358.48	LIQUID + NB3SI -> SI3TI5 + BCC_A2	8.02570	14.61871	77.35558
9	1317.76	LIQUID -> DIAMOND_A4 + SI2TI + NBSI2	3.72095	83.39597	12.88308
	2 3 4 5 6 7 8 9	2 1813.74 3 1757.47 4 1629.56 5 1599.23 6 1469.49 7 1459.19 8 1358.48 9 1317.76	2         1813.74         LIQUID + BNB5SI3 -> NB5SI3 + NB5SI2           3         1757.47         LIQUID + SI3TI5 -> TI5SI4 + NB5SI3           4         1629.56         LIQUID + NB5SI3 -> NB5SI2 + TI5SI4           5         1599.23         LIQUID + NB5SI3 -> SI3TI5 + NB3SI           6         1469.49         LIQUID + TI5SI4 -> NB5I2 + TI5I           7         1459.19         LIQUID -> SI2TI + NB5I2 + TISI           8         1358.48         LIQUID + NB3SI -> SI3TI5 + BCC_A2           9         1317.76         LIQUID -> DIAMOND_A4 + SI2TI + NBSI2	2         1813.74         LIQUID + BNB5SI3 → NB5SI3 + NB5SI2         37.10191           3         1757.47         LIQUID + SI3TI5 → TI5SI4 + NB5SI3         18.73855           4         1629.56         LIQUID + NB5SI3 → NB5I2 + TI5SI4         20.02617           5         1599.23         LIQUID + NB5SI3 → SI3TI5 + NB3SI         23.19625           6         1469.49         LIQUID + NB5SI3 → NBSI2 + TISI         7.12838           7         1459.19         LIQUID → SI2TI + NBSI2 + TISI         6.64458           8         1358.48         LIQUID → SI2TI + NBSI2 + TISI         6.64458           9         1317.76         LIQUID → DIAMOND_A4 + SI2TI + NBSI2         3.72095	2         1813.74         LIQUID + BNB5SI3 → NB5SI3 + NB5SI2         37.10191         57.07000           3         1757.47         LIQUID + SI3TE → TI5SI4 + NB5SI3         18.73855         52.92280           4         1629.56         LIQUID + NB5SI3 → NB5SI2 + TI5SI4         20.02617         57.17120           5         1599.23         LIQUID + NB5SI3 → SI3TE + NB3SI         23.19625         18.15362           6         1469.49         LIQUID + TI5SI4 → NBSI2 + TISI         7.12838         63.23153           7         1459.19         LIQUID → SI2TI + NBSI2 + TISI         6.64458         63.79938           8         1358.48         LIQUID → SI3TE + BCC_A2         8.02570         14.61871           9         1317.76         LIQUID → DIAMOND_A4 + SI2TI + NBSI2         3.72095         83.39597



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

SISTI	2						
		principal			-		
Font Size Ø	50 - 400)	100	Rotate (-180	- 180	) 0		
Position of	Text (Top (	Center):	Font				
X 29.42	Y	19.3232	ORoman	(	<ul> <li>Swiss</li> </ul>	OSymbol	
Calcu.	lation	Condition	ns:				1
	T = 2	101.42 K	(1828.27	C)			
	(8.17) \			1 - 1 - 1 - La			
	X(NB)	= 0.1932	wt (NB)	= 0	.3866		
	x(NB) x(SI)	= 0.1932	wt (NB) wt (SI)	= 0 = 0	).3866 ).3101		
	x(NB) x(SI) x(TI)	= 0.1932 = 0.5126 = 0.2942	wt (NB) wt (SI) wt (TI)	= 0 = 0 = 0	0.3866 0.3101 0.3033		
Phase	x(NB) x(SI) x(TI) (s):	= 0.1932 = 0.5126 = 0.2942	wt (NB) wt (SI) wt (TI)	= 0 = 0 = 0	0.3866 0.3101 0.3033		(br 11111)
Phase	x(NB) x(SI) x(TI) (s):	= 0.1932 = 0.5126 = 0.2942	wt (NB) wt (SI) wt (TI)	= 0 = 0 = 0	0.3866 0.3101 0.3033		100
Phase	x(NB) x(SI) x(TI) (s): D x(NB)	= 0.1932 = 0.5126 = 0.2942 = 0.1932	wt (NB) wt (SI) wt (TI) wt (NB)	= () = () = ()	0.3866 0.3101 0.3033		100
Phase LIQUI	x(NB) x(SI) x(TI) (s): D x(NB) x(SI)	= 0.1932 = 0.5126 = 0.2942 = 0.1932 = 0.5126	wt (NB) wt (SI) wt (TI) wt (NB) wt (SI)	= 0 = 0 = 0 = 0 = 0	0.3866 0.3101 0.3033 0.3866 0.3101		100 0000
Phase LIQUII	x(NB) x(SI) x(TI) (s): D x(NB) x(SI)	= 0.1932 = 0.5126 = 0.2942 = 0.1932 = 0.5126 - 0.2942	wt (NB) wt (SI) wt (TI) wt (NB) wt (SI)	= 0 = 0 = 0 = 0 = 0	0.3866 0.3101 0.3033 0.3866 0.3101		1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1

温度は約 1828℃ 初晶は Si3Ti5

したがって③の方が温度が高い。

③の点では

	100	Rotate (-180	) - 18	0) 0	
Position of Text (Top C	enter):	Font			
X 34.85 Y	24.8052	O Roma	n	<ul> <li>Swiss</li> </ul>	OSymbol
Calculation	Condition	ns:			2
T = 23	74.65 K (	(2101.5	C)		
x(NB)	= 0.2481	wt (NB)	=	0.4513	
X(SI)	= 0.4034	wt(SI)	=	0.2219	
x(TI)	= 0.3485	wt (TI)	=	0.3268	
Phase (s) :					
LIQUID					
x(NB)	= 0.2481	wt (NB)	=	0.4513	
x(SI)	= 0.4034	wt (SI)	=	0.2219	
TT (MT)	- 0 2495	·+ / TT	-	0 2268	
x(SI)	= 0.4034	wt (SI)	=	0.2219	

温度は約 2101℃ 初晶は Si3Ti5

# 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。 温度一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。

Non-Equilibrium	rium (Scheil) (Lever Rule)	Cancel
iquid Composi	tion Value	Options
T[C]	3000	Select Phases
×[NB]	0.8	Save Condition
×[SI]	0.1	Load Condition
×[TI]	0.1	
Total x:	1	

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。



MDT

	🗿 CompuTherm Pandat 8.2 - [P	andat	1]												6
	💬 Eile Edit View Database	Batch	Galculati	ion Pan	Optimizer	PanPrec	ipitation <u>T</u> able <u>G</u> raph	<u>₩</u> indow <u>H</u> elp				1			_ @ ×
	D 📽 🖬   B 🎥 B 🎒 🦄	8×	DB MS	EL E		MA.	🗛 🗰 📶 📶 🏪 🖾 🗋			▲ 図 団	ĽТ/	医原因	団 I/ T	/ / 四	?
( )	Text File		т	×(NB)	שD	x(TD)	phaseName	reactionEquation	fl	fs	ftot(LIQUID)	Htot	H_Latent	G	~
な	🖻 📑 Database	j	с									J	J	J	
	Components	105	1873.76	0.694351	0.171509	0.134140	LIQUID+BCC_A2	LIQUID -> BCC	0.524325	0.475675	0.524325	55618.64	13225.37	-174105.51	
クリック	🕞 🍟 Phases	106	1873.71	0.694337	0.171518	0.134145	LIQUID+BCC_A2	LIQUID -> BCC	0.524292	0.475708	0.524292	55616.02	13226.28	-174103.08	
します	Calculated Results	107	1873.68	0.694330	0.171523	0.134147	LIQUID+BCC_A2	LIQUID -> BCC	0.524275	0.475725	0.524275	55614.70	13226.74	-174101.87	
	Graphs	108	1873.67	0.694326	0.171525	0.134148	LIQUID+BCC_A2	LIQUID -> BCC	0.524267	0.475733	0.524267	55614.04	13226.97	-174101.26	
	Default Graph	109	1873.66	0.694325	0.171526	0.134149	LIQUID+BCC_A2	LIQUID -> BCC	0.524263	0.475737	0.524263	55613.72	13227.08	-174100.96	
$\square$	Tables	110	1873.66	0.694324	0.171527	0.134149	LIQUID+BCC_A2+NB3SI	LIQUID -> BCC	0.524131	0.475869	0.524131	55612.83	13230.67	-174095.05	
	Default Table	111	1873.66	0.694322	0.171527	0.134151	LIQUID+BCC_A2+NB3SI	LIQUID -> BCC	0.524111	0.475889	0.524111	55612.14	13231.35	-174100.81	
		112	1873.66	0.694318	0.171527	0.134155	LIQUID+BCC_A2+NB3SI	LIQUID -> BCC	0.524071	0.475929	0.524071	55610.78	13232.70	-174100.65	
		113	1873.65	0.694311	0.171526	0.134163	LIQUID+BCC_A2+NB3SI	LIQUID -> BOC	0.523992	0.476008	0.523992	55608.04	13235.41	-174100.32	
		114	1873.64	0.694296	0.171525	0.134178	LIQUID+BCC_A2+NB3SI	LIQUID -> BOO	0.523832	0.476168	0.523832	55602.57	13240.82	-174099.67	
		115	1873.63	0.694267	0.171523	0.134210	LIQUID+BCC_A2+NB3SI	LIQUID -> BCC	0.523513	0.476487	0.523513	55591.63	13251.63	-174098.38	
		116	1873.60	0.694209	0.171520	0.134272	LIQUID+BCC_A2+NB3SI	LIQUID -> BCC	0.522875	0.477125	0.522875	55569.78	13273.23	-174095.78	
		117	1873.53	0.694091	0.171512	0.134397	LIQUID+BCC_A2+NB3SI	LIQUID -> BCC	0.521603	0.478397	0.521603	55526.18	13316.32	-174090.59	
			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(℃)、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

1	A	В	C	D	E	F	G	н	I	J	K	L	м	N	0	P	Q	R
1	T(K)	T(O)	fs	Hm	f(Liquid)	x(Nb@Liqui	x(Si@Liquid	x(Ti@Liquid	(ECC_A2)	x(Nb@BCC	x(Si@BCC_	x(Ti@BCC_	f(Nb3Si)	x(Nb@Nb39	x(Si@Nb3S	XT KONLOS	R(TESB)	x Nb@T
2					14	19		- 12	12									
145	2153.58	1880.43	0.343557	58707.7	0.656443	0.739856	0.140986	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	0.901 794	0.027889	0.070316						
147	2152.38	1879.23	0.344674	58712.1	0.655326	0.73958	0.141179	0.119242	0.344674	0.901 755	0.027909	0.070336						
148	2152.18	1879.03	0.34486	58712.8	0.65514	0.739534	0.141211	0119256	0.34486	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	0.640674	0.25	0.109326		
151	2151.86	1878.71	0.358387	57555.4	0.641613	0.738953	0.141191	0119856	0.351428	0.901 402	0.027928	0.070669	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	0.363887	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	0.427568	0.896967	0.027981	0.075052	0.088585	0.633673	0.25	0116327		
155	2147.46	1874.31	0.583423	47905.1	0.416577	0.726947	0.140359	0.132694	0.460155	0.894483	0.028007	0.07751	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	0.028031	0.079935	0.151413	0.626503	0.25	0.123497		
157	2144.26	1871.11	0.68311	45861.2	0.31 689	0.718366	0.139805	0141829	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	0.751 759	44366.8	0.248241	0.709906	0.139291	0.150804	0.542119	0.88488	0.028086	0.087034	0.20964	0.61 6283	0.25	0.133717		

## 9. 単位の設定

#### メニュー「Calculation」 $\rightarrow$ 「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℃、組成はモル組成か重量組成か、比率値は%値かフラクション値か、 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、	Colouistics Options
「必ずスキャンして欲しい場所」	Units Scan Lines PanEngine Parameters
を手動で指示できます。	Set up lines to scan for phase boundaries:
dx=0.01, dy=0.99 とは	dy 0.01 dx 0.01 dx 0.01 dx 0.01
単位設定において	dy 0.01 dy 0.01
Weight-Percent を指示した場合、	Add Option 1 Add Option 2 Add Option 3 Add Option 4
(等温断面図を計算させる際)	Number of steps per scan line         100         Clear List           Horizontal scan line at fraction 0.01 away X axis         100         100         100
この意味は	Vertical scan line at fraction 0.01 from Yaxis Horizontal scan line at fraction 0.99 away Xaxis Vertical scan line at fraction 0.99 from Yaxis
dx=1wt%	
dv=99wt%	OK キャンセル 適用(A) ヘルプ

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ョ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とで図を印刷できます。

フリンタ名(N) OKI MICROLINE 12n	ブロパティ( <u>P</u> )
伏態: 通常使うプリンタ:オンライン 重類: OKI MICROLINE 12n 場所: C+¥OKISPOOL¥OKILPR00 コメント:	Г ファイルヘ出カϢ
刷範囲	印刷語時数
<ul> <li>すべて(A)</li> </ul>	部数(C): 1 🚍
ページ指定(2) ページから(5) パージまで(7)	11 22 33
ご 選択した部分(6)	

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。

<u>何ができるのか:</u>

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出来ます。 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 出来ます。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。

alculate Se	ction (2D)		
Y-Axis Point		- Ontions	ОК
	Value	options	
T[C]	500	Select mases	Cancel
×[Nb]	1	Save Condition	Load Condition
×[Si]	0	ŢY	
v[Ti]	0	↓ I	

名前を付けて保存 ? 🗙 11-3 名前を付けて保存します。 保存する場所 Ø: 🗁 PANDAT 8.2 🗸 🔾 ⊅ 🕐 🛄-たとえば NbSiTi500.pbf Bin example\_MS.pbf 🛅 Database PANDAT\_Example\_Book PanOptimizer\_Sample PanPrecipitation\_Sample example.pbf NbSiTi500 ファイル名(N): 保存⑤ ファイルの種類(D: Batch Files (\*.pbf) キャンセル ~ 🚺 NbSiTi500.pbf - メモ帳 ファイル(E) 編集(E) 書式(Q) 表示(V) ヘルプ(H) 11-4 メモ帳などを利用して // CALCULATION -- {Section Calculation} このテキストファイル [DATABASE] {"NbSiTi.tdb"} [BEGIN] {Section Calculation} [COMPONENT] {NB SI TI} を開きます。 [CALCULATIONTYPE] {section} [POINT] {T=500C; x(NB)=1; x(SI)=0; x(TI)=0} [POINT] {T=500C; x(NB)=0; x(SI)=1; x(TI)=0} [POINT] {T=500C; x(NB)=0; x(SI)=0; x(TI)=1} [SCANLINE] [dy=0.01;dx=0.01;dy=0.99;dx=0.99] [STEPS] [50] [END] [EXIT]

これがバッチ・ファイルの中身です。 500℃を 800℃に変えてみましょう。 500℃ が3箇所ありますので、800℃ 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





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

ファイルを聞く							? 🔀
ファイルの場所の:	C PANDAT 8.2	*	0	1	P		
Bin Database PANDAT_Exan PanOptimizer_S PanPrecipitatio example.pbf	example_MSpbf     NbSiTi500.pbf     NbSiTi500.pbf     sample     n_Sample						
ファイル名(11):	NbSiTi500.pbf				] [	闎	2
ファイルの種類(工):	Pandat Batch File (*.pbf)			~		キャンセ	216

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、 pbf とします。(パンダ・バッチ・ファイル)
   ばのたらな計算を行らのか (ホーロービ)で記述し、使いて見な的な数
- 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]
 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

0	0	
[キーワード]	{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。
		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
[CalculationType]	{Line}	ライン計算
	{Section}	状態図計算
	{Projection}	液相面図計算
	{Solidification}	凝固計算

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℃単位に なります。 x: mole fraction x%: mole percent w: weight fraction w%: weight percen 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
[ Steps ]	{ 50 }	の濃度値は残量とされます。 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。 100℃ と入力した場合、 100℃, 200℃, 300℃, … 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]	<pre>{ fileName="hashi01.dat", format = "T, phaseName,   fs, fl, H_Latent" }</pre>	<ul> <li>必要な場合、</li> <li>利用者が独自に定義する計算結果ファイルを作れます。</li> <li>作成するファイル名を記述します。もし</li> <li>既に同じ名前のファイルが在れば、上書</li> <li>きされます。</li> <li>一方、 ファイル名に ## を含めれば、</li> <li>例えば、hashi##.dat とすれば、##の部</li> <li>分は自動的に2桁の番号が付けられ、</li> <li>上書きを防止します。</li> <li>hashi00.dat</li> <li>hashi01.dat</li> <li>hashi02.dat</li> <li></li></ul>
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_ <b>T</b>	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)
phaseName	平衡相の名前	T[C] 温度(℃)
reactionEquation		
invariantEquation		
ZPF ( PhaseName ) extreme ( T )		
f(*), fw(*), fv(*)	各相のモル分率、重量分率 体積分率	平衡状態の全ての相に対して 勢力学データを抽出します。
f%(*), fw%(*), fv%(*)	各相のモル%、重量%、 体積%	
x(*), x%(*)	各コンポーネント(元素) の濃度、モル比率とモル%	全てのコンポーネント(元素)に 対して値を抽出します。
w(*), w%(*)	各コンポーネント(元素) の濃度、重量比率と重量%	
x(*@*), x%(*@*)	相中の各元素の濃度、 モル比率とモル%	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。 <b>x</b> (元素名の相名)
w(*@*), w%(*@*)	相中の各元素の濃度、 重量比率と重量%	
y(*@*)	相中での、各副格子中の濃 度サイトファラクション	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)	基準相 Liquid に対する指 定相 fcc の	Activity
a(*@*:liquid) a(*@*:liquid<*T>)	Cu の活量	基準相の化学ポテンシャル値 mu(nuro Cu@liquid) を計算でき
	a(Cu@fcc:liquid) = exp{ ( mu(Cu@fcc) - mu(pure Cu@liquid))/RT}	ない場合、活量 -1 がセットされます。
G, H, S, Cp	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	
G(:phase<*>), H(:phase<*>), S(:phase<*>)	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	
DF (*)	駆動力	

## 表 11-2 テーブル入力形式

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

(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(*)	<b>{Solidification}</b> 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 <u>記述の注意点:</u>

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

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}

[end]

Select	Components				
Availab Ti	le Components	>>>	ielected No Si		OK Cancel
Y-Axis Pr T[K] x[Nb] x[Si]	Section (2D) pint Value 3000 1 0			Options	OK Cancel
Drigin Po	nt		<b>1</b>		> E
5 ng nr r O	Value		Ê	Value	
T[K]	300		Т	[K] 300	
x[Nb]	1		×	Nb] 0	
x[Si]	0		×	[Si] 1	
-			T	and a	

#### 11-9 <u>操作の流れ:</u>



## 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することが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 が選択された時にのみ有効となります。

🕄 CompuTherm Pandat 8.2 - [Pandat1]						
🕎 Eile Edit View Database Batch Calculation	PanOptimizer	PanPrecipitation	Table <u>G</u> ra	aph y	Window Help	
📔 🗅 📽 🔚 🖪 🖻 🙆 👘 🛍 🗡 📴 MS 🛍		🚧 💊 🗠 🖂	31 / <b>B</b> B	1 0 0 1 0 0 1 0 0	📸 🕑 🗔 🖂 💼 🗔 🛛	
Text File	Т	×(NB) ×	(SD ×	(TT)	phaseCreate or Edit Table	

#### 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。

	Create	& Edit Table				
	Syst	em roperties × w G G G G	• T • ) • pmG •	f(*) - fs - pmG() - Vm -		
	Phas of	(@)	9) - 9) - 9(@*) pmG(@) -	DC@) - pmG@:)- Vm@)-	Comps. + Phases +	New
作苿領域	Table	operations:			( ) × + +	新しいテーブルを作る
	ID 1	Table Type	Name Default Table	Fields	- Founting (M) C	Replace
	2	Tieline	Tie Lines	T[C], x(*), phaseName, reactio	nEquation, T(*), G	作業領域の値を Fields 欄に移す
変数説明	Weigh w(Cu@	t fraction of com Hiquid).	ponent(s) in phase(s)	). Example:	Cancel OK	

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

Table o	perations:		
ID	Table Type	Name	Fields
1	Default	Default Table	T[C], x(*), phaseName, reactionEquation, f(*), G
2	Tieline	Tie Lines	T[C], ×(*), 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。

T[C]	, w% (*), w% (	*@*)		I I
Fable o	perations:		🖱 🗙 🕈 -	¢ (
ID	Table Type	Name	Fields	Repla
1	Default	Default Table	T[C], x(*), phaseName, reactionEquation, f(*), G	T
2	Tieline	Tie Lines	T[C], ×(*), phaseName	1
	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。

🕹 CompuTherm Pandat 8.2 - [Pandat1]								
Eile Edit View Database Batch Calculation	PanO	ptimizer	PanPrecipita	ation <u>T</u> able	<u>G</u> raph	<u>M</u> indow <u>H</u> elp		
D 📽 🖬   B 🔉 B 🚳 🕒 🖻 🗙 🛛 08 MS B			9 4 4	<mark>→</mark> ? 3]  2	PB 😳	🛗 🖻 🗟 🗠 💼 !		∐°Т∕
Text File		Т	w%(NB)	w%(SI)	w%(TD	w%(NB@DIAMOND_A4)	w%(SI@DIAMOND_A4)	w%(TI@DIAM
😥 📑 Database		С						
Components	1	500.00	8.80375	51.68121	39.51504		100.00000	5.4941e-015
Phases     Only Indian Provide	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
Granhs	4	500.00	8.72870	52.09308	39.17822		100.00000	5.4941e-015
Tables	5	500.00	8.63728	52.59487	38.76785		100.00000	5.4941e-015
Default Table	6	500.00	8.26600	54.63258	37.10142		100.00000	5.4941e-015
📰 Tie Lines 🖌	7	500.00	7.88559	56.72045	35.39396		100.00000	5.4941e-015
Table 2	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。

	System Propertie	es
	x(*)	Molar fraction of component in system. Example: x(Cu).
x	x%(*)	Molar percentage of component in system. Example: x%(Cu).
	W(*)	Overall weight fraction. Example: w(Cu)
w	w%(*)	Overall weight percentage. Example: w%(Cu).
	T[C]	Temperature [C]
Т	T[K]	Temperature [K]
	1_T	1/Temperature [K^-1]
	phaseName	Names of phases in equilibrium
f(*)	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).
	Hm	Total enthalpy of system during solidification.
$\mathbf{fs}$	H_Latent	Latent heat during solidification with Scheil model.
	H_tot	Total enthalpy of system during solidification.
	fs	Total phase fraction of solid phass (accumulated) during solidification
	fl	Phase fraction of liquid phase during solidification.
	G	Gibbs energy of system.
G	Н	Enthalpy of system.
	S	Entropy of system.
	Ср	Heat capacity of system.
	G(:phase<*>)	Gibbs energy of system with given reference state.
G(:)		Example: G(:liquid <cu>,liquid<al>).</al></cu>
	H(:phase<*>)	Enthalpy of system with given reference state.
		Example: H(:liquid <cu>,liquid<al>).</al></cu>
	S(:phase<*>)	Entropy of system with given reference state.
		Example: S(:liquid <cu>,liquid<al>).</al></cu>
	a(*)	Activity of component in system. Example: a(Cu).
pmG	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

## 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 Proper	ties
	a(*:phase)	Activity of component in system with given reference state.
pmG(:)	_	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	molar volume of system
Vm	density	density of system
	MW	Molecular weight of system
	Dhaas Duonant	
	Fnase Propert	
	x(*@*)	Molar fraction of component(s) in phase(s). Example: x(Cu@liquid).
x (@)	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(*@*)	Weight fraction of component(s) in phase(s). Example: w(Cu@liquid).
w(@)	w%(*@*)	Weight percentage of component(s) in phase(s). Example: w%(Cu@liquid).
	M(*@*)	Mobility of species in a phase
DC(@)	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(*)	Gibbs energy of phase(s). Example: G(liquid).
G(@)	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(*:phase<*>)	Gibbs energy of phase(s) with reference state.
G(@:)		Example: G(liquid:FCC_A1 <al>,FCC_A1<cu>).</cu></al>
	H(*:phase<*>)	Enthalpy of phase(s) with reference state.
		Example: H(liquid:FCC_A1 <al>,FCC_A1<cu>).</cu></al>
	S(*:phase<*>)	Entropy of phase(s) with reference state.
	· · · · · · · · /	Example: S(liquid:FCC A1 <al>,FCC A1<cu>).</cu></al>
	Cp(*:phase<*>)	Heat capacity of phase(s) with reference state.
		Example: Cp(liquid:FCC_A1 <al>,FCC_A1<cu>).</cu></al>

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

名前を付けて保存		? 🛛
保存する場所(1):	🚞 Pandat 6.0	O Ø D III
<ul> <li>diagram.dat</li> <li>Line_Property.d.</li> <li>option.dat</li> <li>warning.dat</li> </ul>	at	
ファイル名(N): ファイルの種類(T):	 Data Files (*:dat)	保存⑤)

画面表示中の値を コピーできます。 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。

\delta Pandat - [Pandat1]					
🕎 <u>File E</u> dit <u>V</u> iew <u>D</u> atabase	<u>B</u> atch	<u>Calculation</u>	Table	Graph	Wir
D 📽 🖬 🐚 🛍 🗙 🎒 🚺	B 🗈 🗈	1 🔛 🖽	• =		4
Batch File	w(ti)	t [c]			
Components	0.137587	1909.66			
■ Phases	0.137599	1909.56			
Galculated Results	0.137622	1909.36			
Graphs	0.137668	1908.96			
Tables     Default Table	0.137759	1908.16			
tabl	0.137938	1906.56			
	0.138281	1903.36			
	0.138609	1900.16			
	0.138923	1896.96			
	0.139223	1893.76			
	0.139510	1890.56			
	0400705	100300			

### 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 せることが出来ます。

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。

😂 Pandat – [Pandat1]								
Eile Edit View Database	<u>B</u> atch	$\underline{\mathbf{C}}$ alculation	Table	<u>G</u> raph <u>₩</u> i	indow <u>H</u> elp			
D 📽 🖬 🐚 🛍 🗙 🎒 🔘	8 8 6					88 🕼 🖂 🖾 🗌	≥ ≫ X 🗄 🛛 T	170
Batch File	T [C]	×(Nb)	x(Si)	×(Ti)	G [J]	phaseName	fl	fs
Gomponents	1009.06	0.630000	0.160000	0.210000	-114816.70	Liquid+Nb3Si	1.000000	0.000000
🗊 Phases	1909.56	0.630016	0.159962	0.210022	-114820.78	Liquid+Nb3Si	0.999577	0.000423
Galculated Results	1909.36	0.630048	0.159886	0.210066	-114821.30	Liquid+Nb3Si	0.998734	0.001266
Graphs	1908.96	0.630113	0.159734	0.210153	-114822.31	Liquid+Nb3Si	0.997052	0.002948
Tables     Default Table	1908.16	0.630243	0.159431	0.210326	-114824.19	Liquid+Nb3Si	0.993712	0.006288
tabl	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	0.961890	0.038110
	1896.96	0.632153	0.155255	0.212592	-114597.58	Liquid+Nb3Si	0.949920	0.050080
	1000 76	0 600700	0154007	0.010100	114400.74	Line of KILDCI	0.000050	0.061650



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。

ノエートナンドナ・田ハイ			e xp NbS	iiTi.txt -	・メモ帳			
		フ	ァイル(E)	編集( <u>E</u> )	(①) た書	表示(⊻) ^	ルプ(日)	
まずデータファイル	を作ります。	w	ti1	wnb1	wti2	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	0.30
		0.	40	0.075			0.30	0.20
		•						0.21
		ファイルを	周く					?
		ファイルの	場所①: [	🚞 Pandat 8	i.0	~	ODP	<b></b>
計算後、Import を筆	実行します。	💌 diagr	am.dat	est.dat				
		Line.	amil.dat dat	warning	dat			
		) optio	n.dat .dat					
		💌 solid	ification.dat					
Pandat にデータを	取り込む	77/11/2	0.0	1				88/(0)
ことが出来ます。		771140	和類(T): [	Data Eilee (	etut edat)			1171 (U) /III
			- 1		toring tangent			inser j
	🚳 Pandat - [Pandat1]							
	<u>File Edit View Dat</u>	tabase <u>B</u> ati	ch <u>C</u> alcu	ulation <u>T</u>	able <u>G</u> rap	h <u>W</u> indow	Help	
	D 🖻 🖥   🖻 🖻 X á	5   DB   🗈				🛆 🐴 🛛 🗖		3 🗆 🖾
	Batch File	wti1	wnb1	wti2	wnb2	wti3	wnb3	
	Components	0.100000	0.016000	0.420000	0.055000	0.150000	0.420000	
	<ul> <li>Calculated Results</li> </ul>	0.200000	0.052000	0.450000	0.012000	0.200000	0.350000	
	<ul> <li>Solidification</li> <li>Graphs</li> </ul>	0.400000	0.075000			0.300000	0.200000	
	- Tables							
	- tab1							
	C:¥temp¥hashi¥							
			Sele	ct Colui	nns for P	lotting		
			Calo	ulation R	lesults	-	F	ок
			Sol	idification	•	•		Gancel
			Avai	ilable Tab	es			
このデータファイ	ル名がテーブル名と	なり、		temp¥nas 1				
図を作成する際に A	wailable Tables 項[	こて	wnt	51		<-> X		
選択できます。ファ	イルの1行目に定義	した	what	2		<-> Y		
	==+++++	ene	wti	3 53				
「列の名削」一覧か	衣示されます。					Add	Delete F	Replace
図のX変数とY変数	を選択出来るように	なり	ID	X	D:Y	ID:Galculat	ion 1	D: Table

ます。

69

7:fs

0:T

0:Solidification

1:Defa...

# 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。

1

Graph Axes	Graph Options	Plot Setup				
Scale						1
	Set Y Axis Limit	s 🗌	Set X Ax	is Limits	0 G	iibbs <u>T</u> riangle
Y Max	1100	X Max	100		]	
Y Min	0	X Min	0		1	
# Ticks	11	# Ticks	10		1	
Title					1	
E	Graph Title	Diagram Title			Size:	160
6	Y Axis Label	T[C]			Size:	160
			Tick	Label Font S	Size:	140
5	🛛 X Axis Label	x%(Cu)			Size:	160
[	Component Lat	bel Top			Size:	160
		Origin	Ae	Right Cu	J	1

- 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。
  - 転値のサイズを変更できます。
     推奨値: 160

## Options 画面

Graph Axe	Graph Op	ptions Plot Setup						''
Plot De	ails			Line		$\sim$		迂
×	Y	Calculation	Table	Sette		Line Style		
x%(Cu	) T	Section Calculat	ti Defaul	Black	-	Line Color	•	
				1	-	Line Width		
				Symbol		-	311	
					-	Symbol Type		
				Black	-	Symbol Color		
				5	~	Symbol Size		
Plot Sty	le			×			21	
	Line	0.50	mbol	016	no + Si	umbol		
Tie Line	s Frequency (	(1-10) 7						
Tie Line	s Frequency (	(1-10) 7 ОК	 	こル 道	<b>∄(<u>A</u>)</b> (	<b>〕</b> ②それぞお	う 」 いの紡	泉の色、
#### 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。

Graph Axes	Graph Options	Plot Setup				
Calculation	Results					
August August	iculation					
Default Ta	ables					
T x%(Ag) x%(Cu) phaseNam reactionEq f(Liquid) f(Fcc)_1 f(Fcc)_2 G	e uation		Special Please <-> X <-> Y Add	Plot List Choose a Pl	lot Swap	Replace
ID:X	ID:Y		D:Calculation		ID:	Table
2:x%(Cu)	0 T	(	Section Calcul	ation	1:D	efault Tabl

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。

	Configure Graph	
	Graph Axes Graph Options Plot	Setup
タイラインの表示	Calculation Results	
717120333	Section Calculation_1	•
	Default Table	•
	T	Special Plot List
右側の Special Plot Set	xWMD/ xWSD xWTD	Please Choose a Plot
	phaseName	Plane Chosee a Plot Tie-Lines
から Tie-Lines	f(DIAMOND_A4) f(NBSI2)	
	fSI2TD	Add Delete Swap Replace
をプルダウン選択し、	IDX IDY	ID:Calculation ID:Table
	3::%(TD 1::%(NB)	1:Section Galculation_1 1:Default Table
Add」 ホタンをクリックします。		
		OK キャンセル 通用(A)
	Configure Graph	×
	Graph Axes Graph Options Plot	Setup
	Calculation Results	
	Section Calculation_1	•
	Available Tables Tie Lines	*
	I	Special Plot List
2 行目が表示されたことを確認し	×WSD	Tie-Lines 👻
	phaseName	<-> X 3x,%(TD)
適用ボタンを		<-> Y 1,x%(NB)
		Add Delete Swap Replace
クリックします。	ID:X ID:Y	ID:Calculation ID:Table
クリックします。	ID-X ID-Y 355%(TD 155%(NB) 855%(TD 155%(NB)	ID:Galculation ID:Table 1:Section Calculation 1 1:Default Table 1:Section Calculation 1 2:Tie Lines
クリックします。	ID-X ID-Y 3-5%(TD) 1:5%(NB) 3:5%(TD) 1:5%(NB)	ID-Calculation ID-Table 1:Section Calculation 1 1:Default Table 1:Section Calculation 1 2: Tie Lines
クリックします。	ID-X ID-Y 3-56(TD 1-56(NB) 3-56(TD 1-56(NB)	ID-Calculation ID-Table 1:Section Calculation 1 1:Default Table 1:Section Calculation 1 2:Tie Lines
クリックします。	ID-X ID-Y 3-xX(TD 1-xX(NB) 8-xX(TD 1-xX(NB)	ID:Galculation ID:Table 1:Section Calculation 1 1:Default Table 1:Section Calculation 1 2:Tie Lines

### 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、

**L** 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 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。

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。

 $\lambda = \neg - \rightarrow$  Graph  $\rightarrow$  Copy WMF Format

j -					
<u>C</u> alculation	PanOptimizer <u>T</u> able	<u>Graph</u> <u>W</u> indow	Help		-
DB MS BL		Configure Gr	aph	1 🖮 🗟 👂 🤉	🕄 🛯 I T / 🗡 🖾 🕅
		Save <u>G</u> raph			
		Copy High F	esolution <u>W</u> MF Format	]	
		Select			
	110	🔎 Zoom Mode			
	110	Display Full	Range (Zoom-Out)	-	
	100	E Legend			
	100	Le Label Mode	(on/ott)		
	90	I line			
		Arrow			
	806		$\sim$		
	NA				
形式を選択して貼り付け	}				
	形式	を選択して貼り	0付け		? 🔀
Windows メダノア・	イル・リンク	元: 指定なし			
形式で貼り付ける					OK
		Hn/++(+/p)	貼り付ける形式(A):		キャンセル
	() <u></u>	いわはれたけ(1)	図 (拡張メタファイル)		
	0.	20000110000			
				02	
				<u> </u>	アイコンで表示(D)
	新吉男	カリップオ	- ドの内容を図 (Mindow	ד. וא (וו) ברקל או	
		行、挿入し	ta.	10 / / / / / / / / / / / / / / / / / / /	

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

<u>14.1</u> 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℃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)



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。

Calculation Options	×
Units Scan Lines PanEngine Parameters	_
Search Level ○ Level 1 (less search) ⓒ [Level 2 (extensive search)]	
OK キャンセル 適用(A) ヘルプ	

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。

Calculation Options		X
Units Scan Lines PanEngine Parameters		
Set up lines to scan for phase boundaries:		
t dy 0.01 dx 0.01	t	dx 0.01
Add Option 1 Add Option 2	Add Option 3	Add Option 4
Number of steps per scan line 100		Clear List
Horizontal scan line at fraction 0.01 away Vertical scan line at fraction 0.01 from Y Horizontal scan line at fraction 0.99 away Vertical scan line at fraction 0.99 from Y	Xaxis axis Xaxis axis	
OK ++	ンセル 適用(A	

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。



<u>14.2</u>境界線を青色にする方法

アイコン  $\square$  もしくは、メニューから Graph  $\rightarrow$  Configure を選択します。 Graph Options 画面にて、Line Color を Light Blue にします。



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。

先ず、画面左側の Tables  $\rightarrow$  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。







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

利用

ľ	Table operations:					
	Id	Name	Fields			
	1	Default Table	T[C], ×(*), phaseName, f(*), G			
	🔲 Worksh		T[C],w(*)			

🔊 Co	mpuTherm Pandat 6.0 - [Pandat1]					
💬 E	ile <u>E</u> dit <u>V</u> iew <u>D</u> atabase <u>B</u> atch	<u>Calculation</u> <u>Table</u>	Graph Window Help			
	🖻 🖬   B 💩 b   🍜   b 🗈 >	<   DB   斗   🗉 💽	- 🖂 🖄 🕴 📰 🎬			
	Text File Database Components Phases Calculated Results Calculated Results Section Calculation Section Calculation Section Calculation Tables Default Table	T [C]         w(Nb)           50000         0.030503           50000         0.031143           50000         0.032413           50000         0.039878           50000         0.039878           50000         0.044682           50000         0.053977           50000         0.058338           50000         0.058338           50000         0.058254           50000         0.058264	w(S)         w(T)           0832587         0.136910           0822077         0.138765           0822077         0.145505           © CompuTherm Pandat 6.0 - [Pandat1]           Image: Second secon	ch Qalculation Table X DB D1 E1 [] T [C] (w(Nb) 500.00 0.030503 500.00 0.031143	Graph         Window         Help           Image: Spin strain strai	
/ クラフ表示で 2列を Ctrl 利用して選び	させる キーを びます。	50000 0070560	Calculated Results	500.00         0.032418           500.00         0.034940           500.00         0.039978           500.00         0.04682           500.00         0.049357           500.00         0.053907           500.00         0.058338           500.00         0.06860           500.00         0.066860           500.00         0.07960	0.822077         0.145605           0.808237         0.156824           0.781130         0.178992           0.764764         0.20654           0.729108         0.221535           0.704134         0.241959           0.676815         0.261847           0.656127         0.281219           0.63044         0.300096           0.610543         0.318497	

Table  $\rightarrow$  Create Graph を選択します。



Y 軸が w(Nb) 変数にセットできました。

X 軸が w(Ti) 変数に、

Т

w<mark>(Nb)</mark> w(Si) w(Ti)

ID:X

3:w(Ti)

ID:Y

1:w(Nb)

Choose Customized Plot Set

Swap Replace

ID:Table

3:Table 2

Please Choose a Plot

<-> X 3:w(Ti) <-> Y 1:w(Nb) Add Delete

ID:Calculation

0:Section Calculation

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。



0.6

0.4

0.6

w(Ti)

0.8

1

Ti

(9NU)

02

0 **\*** 0

Si

0.4

0.2

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℃の 重量比率による 等温断面図が得られます。

83

#### 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。

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。

📕 expNb	SiTi.txt ·	・メモ帳			
ファイル( <u>E</u> )	編集( <u>E</u> )	書式(0)	表示(⊻) /	ヽルプ(H)	
wti1 0.10 0.20 0.30 0.40	wnb1 0.016 0.042 0.058 0.075	wti2 0.42 0.45	wnb2 0.055 0.012	wti 0.1 0.2 0.2 0.3	3 wnb3 5 0.42 0 0.35 5 0.28 0 0.21

į	🕄 Panc	lat – [	Pandat	1]									
	👺 Eile	<u>E</u> dit	<u>V</u> iew	<u>D</u> atabase	<u>B</u> atch	<u>C</u> al	culation	Tab	le	<u>G</u> raph	<u>W</u> ine	wob	<u>H</u> elp
	🗅 🖻		<b>b C</b>	🗙 🚳   DB		$\downarrow$		1	Tal	ble <u>O</u> ptic	ns		123 <del></del>
Γ	Batcl	h File							<u>E</u> di	it			
	🕀 Datal	base Donents							Sav	ve			
	🗄 Phas	es							Ext	cel			
	🚊 Calcu	ulated F	Results					12	Ore	eate Graj	bh		
		Graph	valculatit NS	Jn				123-	Imp	oort			
		D	efault Gr	raph					_		E		
		G Table	raph 1								•	-	
	c	D	efault Ta	able									
		n	ewtab										

ファイルを開く		? 🛛
ファイルの場所型:	🗀 Pandat 5.0	🔽 🕝 🤌 📂 🛄
i diagram.dat option.dat warning.dat		
		開(()
ファイルの種類(工):	Data Files (*.txt; *.dat)	ギャンセル





印の色や大きさは

 $Graph \rightarrow Configure$ 

Graph Options 画面にて指定(変更)できます。

Plot Deta w(Ti) wti1 wti2 wti3	ils V w(Nb) wnb1 wnb2 wnb3	Calculation Section Calculati Section Calculati Section Calculati	Table newtab C¥tem C¥tem C¥tem	Line Solid V Line Style Light Magenta Line Color Line Width Symbol Light Magenta Symbol Type Light Magenta Symbol Color 5 V Symbol Size
Plot Style I Tie or Iso Displa Tie Line F	e ine therm Line y Tie/Isoth requency (	⊙ Symbo s erm Lines 11-10) 4	ol Tie/Isoth Tie/Isoth	C Line + Symbol erm Line Style Solid

凡例は

 $Graph \rightarrow Legend$  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  $\rightarrow$  "Copy high resolution WMF format"

を選択します。



#### <u>14.5</u> 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℃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 Cntl + "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。

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。

🗿 Pandat — (Pandat) )						
🕽 Eile Edit View Database Batch Galcul	lation <u>T</u> able	Graph Wa	ndow <u>H</u> el	p		
		BAS	100 1	田園口	2 😡 🗟	*又団 ヨエノ >
- Batch File	TEJ	20MED	SS)	ST9x	G [.0	phaseName
E Database	500.00	0.010000	0.806869	0.183131	-40215.76	DEAMOND_A4+TISI2+NESE
* Phases	500.00	0.01 8199	0.834695	0.105121	-40E93.67	DEAMOND A4+TISI2+NEST
Galculated Results	500.00	0.010579	0.890318	0.189103	-41064.48	DEAMOND_A4+TISI2+NESI
i⊒ Graphs	500.00	0.011351	0.971594	0.117065	-42695.10	DEAMOND A4+TISI2+NESI
Default Graph	500.00	0.012896	0.854114	0.132991	-43559.33	DIAMOND_A4+TISI2+NUS2
- Default Table	500.00	0.01 4440	0.836645	0.149916	-4902257	DIAMOND_A4+TISI2+NESt
	500.00	0.015284	0.819176	0.164841	-52085.81	DIAMOND_A4+TISi2+NES
	500.00	0.017526	0.001706	0.180766	-551 49.05	DEAMOND_A4+TISI2+NESI
	500.00	0.01 9072	0.784236	0.195692	-59212.28	DIAMOND A4+TISI2+NES
	500.00	0.020616	0.766767	0212617	-61275.52	DEAMOND_A4+TISI2+NES
	500.00	0.022160	0.749297	0.228542	-64333.76	DEAMOND A4+TISI2+NES
	500.00	0.023705	0.731828	0244468	-57481.99	DEAMOND_A4+TISI2+NES
	500.00	0.025249	0.714359	0.260093	-70485.23	DIAMOND A4+TISI2+NES
	500.00	0.026798	0.696889	0275318	-73528.47	DIAMOND_A4+TISI2+NES
	500.00	0.028337	0.679419	0.292244	-76591.71	DIAMOND_A4+TISI2+NES
	500.00	0.029105	0.670684	0.800206	-781 23.33	DIAMOND_A4+TISI2+MLS
	500.00	0.029302	0.666501	0.382197	-70506.20	DEAMOND_A4+TISI2+NES
	500.00	0.029300	8667400	0.8031.92	-78697.68	DIAMOND A4+TISI2+NES
	500.00	0.029464	0.656667	0.300869	-78627.76	DEAMOND_A4+TISI2+NESI
	500.00	0.029464	0.656657	0.203969	-78827.76	DIAMOND A4+TISI2+NESI
	500.00	0.029818	0.656657	0.303515	-78622.31	DEAMOND_A4+TISI2+NESI
	500.00	0.091232	0.656667	0.382161	-79600.52	DEAMOND_A4+TISI2+NEST

🗿 Pandat – [Pandat1]						
🗒 Eile Edit View Database Batch Galculation	<u>T</u> able §	araph <u>W</u> r	idow <u>H</u> el)	p		
0 📽 🖬 🕾 📾 🛪 🚳 💷 🗟 🖬 🗟 🖬 🔤			10 1	國國	ZRIA	*区間ゼエノク
- Batch File	T [C]	x(MD)	:050	×CT0	0.0	phaseName
Database     Someonents	500.00	0.010000	0.006669	0.183131	-40215.76	DIAKOND, A4+T/SI2+N6Si2
* Phases	500.00	001058	1854685		-40568.67	DIAMOND A4+TISI2+NbSi2
Calculated Results     Calculated Results	500.00	0.010579	3,900010	0.109103	-41364.49	DIAMOND_A4+TISI2+N6Si2
<ul> <li>Graphs</li> </ul>	00000	0011861	0.871584		-4289610	DIAMOND A4+TER2+N6512
- Default Graph	500.00	0.012095	0.054114	0.132991	-45959.33	DIAMOND_A4+TISI2+N6Si2
Default Table	500.00	0014448	1880645	0148916	-43022.57	DIAMOND A4+T SQ+NbSi2
	500.00	0.015904	3.019175	0.164941	-52065.81	DIAMOND_A4+TISI2+N6Si2
	60000	0017528	0.801706	0.180706	-65149.05	DIAMOND A4+TISI2+NbSI2
	560.00	0.019072	0.734236	0.196692	-59212.28	DIAMOND_A4+TISI2+N6Si2
	600.00	0.02061.6	0.796767	0.212617	-61275.52	DIAMOND A4+TISI2+NbSi2
	560.00	0.022160	0.749297	0.228542	-64358.76	DIAMOND_A4+TISI2+N6Si2
	600.00	0023706	0 731 928	0.244468	-67401.99	DIAMOND_A4+TISI2+NbSi2
	500.00	0.025249			-70465.23	DIAMOND_A4+TISI2+N6Si2
	E00.00	0.028708	0.926890	0276318	-7362847	DIAMOND A4+TG2+NbSi2
	500.00	0.028337	0.679419	0292244	-76591.71	DIAMOND A4+T/SI2+N6SI2
	800.00	0029109	0.670634	0.280206	-78123.33	DIAMOND A4+TIGI2+NbSi2
	500.00	0.028302			-78506.23	DIAKOND A4+TISI2+N6Si2
	6688.00	0.029359	0.667400		-79697.68	DIAMOND A4+TIGI2+N5SI2
	500.00	0.029464	0.666667	0.503969	-78827.76	DIAMONO AI+TISI2+NESI2
	500.00	0.029464	0.656657	0.283969	-78927.76	DIAMOND_A4+T/Si2+NbSi2
	508.00	0.029818	0.656657	0.303515	-78622.31	DIAMOND_A4+T/SI2+N6Si2
	500.00	0.091232	0.656657	0.282101	-78908.52	DIAMOND A4+TISI2+N5Si2

:8)	ファイル(E) 箱	[集(E) 表示	☑ 挿入页	書式(2) ツ	バール( <u>T</u> ) デー	-タ(D) ウィン	<つ <u>())</u>
: D	💕 🔒 🖂	📖 🖻 -	🄊 🛛 😣 🗅	Σ - ϟ↓   🛍	I 🕜 🍟 i M	IS Pゴシック	<b>•</b> 11
	<b>*</b> *						
-	B2	-	€ 500				
	Δ	B	0	D	F	F	G
1	A			0			u
2		500	0.01	0.886869	0.103131		
3		500	0.01 01 93	0.884686	0.105121		
4		500	0.01 05 79	0.880318	0.109103		
5		500	0.011351	0.871584	0.117065		
6		500	0.012895	0.854114	0.132991		
7		500	0.01 444	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	0.02216	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	0.0291 09	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。

 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)



 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<sup>-</sup>15Cr<sup>-</sup>5Ni 温度 500℃から 1500℃まで の平衡相のモル分率が

縦軸に表示されます。



\delta Pandat - [Pandat1]									Ð	X
📴 Eile Edit View Database Batch Calculation Table	e <u>G</u> raph <u>V</u>	<u>V</u> indow <u>H</u> e	elp						- 8	r ×
D 📽 🖬   🖻 🖻 🗙 🌧   DB   B   B   1 💷 💽	<u>- M A 4</u>	🖌   🗔 🕯	<b>B</b>	L 🔜   🛙	2 🔎 X E	I ∐ T / ≯	K [2] 💡			
Batch File	T [C]	w(CR)	w(FE)	w(ND	G [J]	phaseName	f(BCC_A2)	f(FCC_A1)	f(LIQUID)	
i ⊥- Database ii- Components	1240.00	0.150000	0.800000	0.050000	-86942.99	FCC_A1+BCC_A2	0.186670	0.813330		
Phases	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		
🚍 Graphs	1270.00	0.150000	0.800000	0.050000	-89615.36	FCC_A1+BCC_A2	0.323652	0.676348		
Default Graph	1280.00	0.150000	0.800000	0.050000	-90511.88	FCC_A1+BCC_A2	0.374767	0.625233		
Default Table	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		
左側の窓の Tables 欄を	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			
カリックナスト、主形士の	1400.00	0.150000	0.800000	0.050000	-101504.40	BCC_A2	1.000000			
クリツク別ると、衣形氏の	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			
数値表が表示されます。	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			
タガの文明いりまたよりマ	1470.00	0.150000	0.800000	0.050000	-108096.47	BCC_A2	1.000000			
谷列の恵琳は光與仃を見て	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	
判断できます。ここで	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	
(11々)け相エル八家で十	1500.00	0.150000	0.800000	0.050000	-111005.02	LIQUID			1.000000	
10個石川は個人レ万平 じり。										

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  $\rightarrow$  Crate&Edit 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 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。

C	)ptim	izer	Tabl	е	<u>G</u> rap	h	<u>W</u> indo	W	He
]	•		123-	Īu	nport T	able			
		(5.11	12	Q	reate o	r Ec	lit Tab	le	15
1		X(ND	F Save Selected Table				Ľ		
00	0.00	0.100		E					- 21
05	5.00	0.100		E	xport to	o Ex	cel		
10	0.00	0.100	$\square$	C	reate G	àrap	h		
15	5.00	0.100	000	0.8	00000	0.1	00000	DIAI	MOI

Cre	eate & E	dit Table	e								
	System	Propert	ies								
	×	•	w	•	т	•	f(*)	•	fs	•	
	G	•	G(:)	-	pmG	-	pmG(:)	•	Vm	-	
	Phase P	ropertie	es								Database Inf
	×(@)	-	w(@)	•					DC(@)	-	Comps.
	G(@)	· +	G(@:)	-	pmG(@)	-	pmG(@:)	-	Vm(@)	-	Phases
Т	Table oper	ations:									≝ × <del>1</del>
	ID	Table '	Туре	N	ame		Fields				
-	1	Defaul	t	D	efault Tab	le	T[C], w	v(*),	phaseNa	me, r	eactionEquati

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。

-Sy	/stem Pr	ropert	ies					
	x	-	w	•		Т	-	f(*)
	G	-	G(:)	÷		T[C	]	
Pł	nase Pro	pertie	es			T[K	]	
	×(@)	-	w(@)	•		1_T	[1/K]	
	ദക്രി		ദക്രി		DD	ഹര	1	- pmG(@1



System	Propert	ies				
x	•	w	•	Т	•	f(*) 🗸 fs -
G	-	G(:)	•	pmG	•	phaseName
-Phase P x(@)	ropertie •	⊧s w(@)	Ŧ			reactionEquation invariantReaction
G(@)	<b>.</b>	G(@:)	•	pmG(@)	•	extreme(T)
т[С],	w% (*)	)		DF(*) act(*) ZPF(*)		
Table oper	ations:					£(*)
ID	Table '	Туре	N	ame		fw(*)

Phase Properties							
×(@) 🗸	w(@) 🗸						
G(@) 🗸	w(*@*)						
T[C],w%(*	W%(*@*)						

	T[C],w%(*),phaseName,fw(*),w%(*@*)									
T	Table operations:									
	ID	Table Type	Name	Fields						
	1	Default	Default Table	T[C], w(*), phaseName, reactionEquation						
		Default 🗾								

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。

Edit box に5個の変数を

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。

用意できました。

T[C], w%(*), phaseName, fw(*), w%(*0*)									
Table operations:									
	ID	Table Type	Name	Fields	Replace				
	1	Default	Default Table	T[C], w(*), phaseName, reactionEquation	4000				
		Default 🗾		T[C],w%(*),phaseName,fw(*),w%(*@*)	4097				
					-087				

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。



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。

Ga	Calculate Point (OD)							
ſ	Point		ОК					
		Value						
	T[C]	1300	Cancel					
	w[CR]	0.15						
	w[FE]	0.8	Uptions					
	w[NI]	0.05	Select Phases					
	Total w:	1						

Equ	uilibrium found						
Cal							
Ter	Temperature = 1573.15 K (1300 C)						
Pre	ssure = 1 [atm]						
Sys	tem 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	t = 0.05, mu = -130260					
G =	-92313.7						
The	re are 2 stable pł	nases:					
			-				
	T = 1573.15 K				1		
	×[CR] = 0.145322	(wt[CR] = 0.136286)					
	×[FE] = 0.799847	(wt[FE] = 0.805669)					
	Phase BCC A2: f	raction = 0.485711			-		
	T = 1573.15 K						
	×[CR] = 0.17497	wt[CR] = 0.164562)					
	×[FE] = 0.785981	(wt[FE] = 0.79398)					
	( . Furl			1			

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。

-							_						
🗃 Pandat ·	- [Pan	dat1]											
🔛 <u>F</u> ile <u>E</u> o	lit <u>V</u> i	iew <u>D</u> ata	abase	<u>B</u> atch	<u>C</u> a	lculatio	n	Table	<u>G</u> ra	aph ⊻	Vindov	v <u>H</u> elp	)
D 😅 日		r x e	🗟   DB		ð l	B.	ΞΞ		Table (	<u>O</u> ptions		Ⅲ <sup>123</sup> →	B
Batch File							Ī	Ð	<u>E</u> dit			%(NI)	W
<ul> <li>Database</li> <li>Component</li> </ul>	ts						ľ		<u>S</u> ave		- 1	2.00	0.
Phases									<u>E</u> xcel			2.00	0.
🖻 Calculated	Result: Iculation	S						12	Create	Graph		2.00	0.
Grapi	าร							123- <b>-</b>	Import		- 1	2.00	0.
De La De	efault Gi	raph						900	.00	97.7	<sup>-</sup>	2.00	0.
	s fault T	able						900	.00	97.70	)	2.00	0.
🔊 Dan dat 🗕 🛙	Dandat	41											
	anual	Databas			2-11		<b>T</b> -1		0	U.C. J			
	view	<u>D</u> atabas	se <u>B</u> a	aton y	Jaicul		Ta		<u>a</u> rapn	<u>.</u>	I		_
	ð C	X	DB   🛙		1 8	) 📰	•		ΜA	7 🔊		≌₩	
Batch File						- F	T [C	)]	w%(C	U) (U	~%(NI)	w%	SD
Database Components							9	00.00	9	7.75	2.0	00 0.2	4765
Phases													
Calculated Re Line Calcul		crosoft	Excel	- Boo	k1								
🖨 Graphs	:B)	ファイル(E)	編集	(E) 表	₩	挿入	Φ	書式	() ()	ソール(T)	・デ	-夕( <u>D</u> )	ウイ
- Defau cu Tables	10	🗃 🔒 i e	3 🖪	ABC (	۵ ا	6 🗈	2	🏈	5	- (21 -	2	Σ -	à↓ ł
Defau	:												
	•	A1		_	£.	тГе	1						
		A		• 	)x	0	_	r	<u></u>		-		-
	1			(CLI)		(NII)	-	L w%(S1	0	GLI	-	nhase	Nar
	2	91	00		8	1.1412	2		0	-587	767.7	FCC /	41
	3	90	00	97.9	9		2	0.00	9877	-587	790.5	FCC /	41
	4	90	00	97.9	8		2	0.01	9756	-588	31 0.2	FCC /	41

#### 例えば

Cu-Ni-Si 3元系で 900℃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)

900

97.97

2 0.029638 -58828.7 FCC\_A1

5

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 fw(FCC)=0.995774, w(Ni@FCC)=0.016523

fw(Ni5Si2)=0.004226, w(Ni@Ni5Si2)=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(Fe3C)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。





T[C]

Cementite 基準の場合:

T[C]

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個にすることをお勧めします。

「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。 T[0] 2000 Load Condition Immobile Comps. 100 D 100 ×NC] reject された相の背景色は白色です。 ×X(FE) Total với J 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。 Ť H Ð Drigin Pol -Axia OK ボタンをクリックし T[C] T[0] 0 \*X(C) \*X(FE) 100 0 100 \*X[C] \*X(FE) 戻ります。 100 **Phase Selection** 100 .iquid Boo\_A2 ΟK entite Cancel Diamond\_Fcc\_A4 Fcc\_A1 Fe4N Chi\_FeCN Sel/Clr All Graphite Hcp\_A3 Ksi\_Carbide Laves C14 M23C6 M5C2 計算結果 2000-1000 2000 1800 Liq 10 20 30 40 50 60 70 80 90 10 0 1600 0 С w%(FE) FE 1400 1200 横軸を wt%(C) とし、 Fcc T[C] 1000-範囲を 0 から 10wt%C とする。 Fcc+Cementite 800-

600

400

200-

0

0

FE

2

1

3

**Bcc+Cementite** 

4

5

w%(C)

6

7

8

9

10

### 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。

	Option	
Value	Option	
2000	Select Ph	ases Cancel
100	Save Con	Load Condition
0	<b>t</b> Y	
100		
		inin V
	X-Axis Po	oint IIII
Value		Value
0	T[C]	0
100	w%[CU]	U
100 0	w%[CU] w%[ZN]	100
	Value 2000 100 0 100 100 Value	Value 2000 100 0 100 Value Value Value Value Value Value Value Value Value Value Value Value



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。

🕄 CompuTherm Pandat 6.0 - [Pandat1]				
📴 <u>F</u> ile <u>E</u> dit <u>V</u> iew <u>D</u> atabase <u>B</u> atch <u>C</u> alculation <u>T</u> able <u>C</u>	<u>à</u> raph <u>W</u> in	idow <u>H</u> elp	r	
D 📂 🖬   B 🏖 D   🍜   B 🛍 🗙   DB   B1   🗉 💽		7   💷	1	Ľ
Text File	T [C]	w%(CU)	w%(ZN)	ph
	1081.45	98.97128	1.02872	LIG
	1080.77	98.76864	1.23136	LIG
	1079.39	98.36353	1.63647	LIG
Calculated Results	1076.59	97.55397	2.44603	LIG
Section Calculation	1070.81	95.93754	4.06246	LIG
Section Calculation_1	1064.81	94.32474	5.67526	LIG
	1058.60	92.71557	7.28443	LIG
	1052.17	91.11004	8.88996	LIG
	1045.54	89.50815	10.49185	LIG
	1038.71	87.90987	12.09013	LIG
	1031.69	86.31519	13.68481	LIG





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

Liquid 1100 1000 Fcc 相のみを計算対象とすると 900 800 1200 700 Fcc 1100 Fcc T[C] 600 1000 500 900 400 800-300 700-Fcc + Fcc 200 T[C] 600-100 500 0 Fcc + Fcc 400 10 20 30 40 50 60 70 80 90 100 0 300 0 AG w%(CU) CU 200 100-0. 10 20 30 40 50 60 70 80 90 100 0 0 AG w%(CU) CU

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。

スタート プログラム	m PANDAT 8.2	> 🕄 Pandat 8.2
		🛃 Pandat 8.2 Dongle Driver
		📩 Pandat 8.2 Example Book
		📩 Pandat 8.2 Help File
		🕘 Pandat 8.2 Website
		🧊 Uninstall PANDAT 8.2

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≥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で、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)+0.0002034	75*T**2
	-3.5012e-007*T**3 -37669.3+271.721*	8+93399*T* T-41.77*T*	*(-1); 2750 ln(T)+1.5282	Y 24e+ <b>0</b> 32 <b>*</b> T <b>**(</b> -9	); 6000 N !
Function GHSERSI	298.15 -8162.61+1 -3.552e-009*T**3+1	37.227*T-2 76667*T**	2.8318*T*ln (-1); 1687 Y	n(T)-0.0019129*	T**2
Function GHSERTI	-9457.64+167.272*T 298.15 -8059.92+1	-27.196*T* .33.687*T-2	ln(T)=4.2036 3.9933*T*lr *(=1): 000 V	59e+030*T**(-9 n(T)=0.00477798	); 3600 N ! 3*T**2
	+1.00710e-007*1**3	)+ <i>12</i> 030*1*	*(-1); 900 Y		
Function GSIBCC	298.15 47000-22.	5*T+GHSE	RSI; 6000 N	!	
Function GHEXTNE	298.15 -8519.35+ -3.5012e-007*T**3	-142.045*T- 3+93399*T*	-26.4711*T* *(-1); 6000	ln(T)+0.0002034 N !	475*T**2
Type_Definition % SEG	) *!				
Type_Definition ( GES	A_P_D BCC_A2 Magn	etic -1 0.4	1!		
Type_Definition * GES	S A_P_D FCC_A1 Magr	netic -3 0.	28!		
Type_Definition ) GES	A_P_D HCP_A3 Magn	etic -3 0.2	28!		
Phase Liquid % 1 1 !					
Constituent Liquid :N	b,Si,Ti:!				
Parameter G(Liquid,N	b;0) 298.15 29781. -7499.4+260.75	6–10.8164* 6*T–41.77*	T+GHSERN T*ln(T); 600	B-3.06098e-023 10 N !	3*T**7; 2750 Y
Parameter G(Liquid,S	;0) 298.15 50696.4 49828.2-29.559	I−30.0994*7 1*T+4.2036	`+2.09307e- 9e+030*T**	021*T**7+GHS (–9)+GHSERSI;	ERSI; 1687 Y 3600 N !
Parameter G(Liquid,T	i;0) 298.15 4134.49	9+126.706*7	[-23.9933*]	`*ln(T)−0.00477	798*T**2
	+1.06716e-007*T	**3+72636	*T**(-1); 90	0 Y	
Parameter G(Liquid,N	b,Si;0) 298.15 -198	8883; 6000 ]	N !		
Parameter G(Liquid,N	b,Si;1) 298.15 -183	340.5; 6000	N !		
Parameter G(Liquid,N	b,Si;2) 298.15 4723	35.4; 6000 N	J !		
Parameter G(Liquid,S	,Ti;0) 298.15 -236	700+15.819	2*T; 6000 N	1	
Parameter G(Liquid,S	,Ti;1) 298.15 6150	0.6-4.92006	6000 N	!	
Parameter G(Liquid,S	,Ti;2) 298.15 7171	1.8-5.73696	6000 N	!	
Parameter G(Liquid,S	,Ti;3) 298.15 -486	95+3.8956*	T; 6000 N !		
Parameter G(Liquid,N	b,Si,Ti;0) 298.15 1	29990; 6000	) N !		
Parameter G(Liquid,N	b,Si,Ti;1) 298.15 -	413123; 600	00 N !		
Parameter G(Liquid,N	b,Si,Ti;2) 298.15 1	29990; 6000	) N !		
Phase BCC_A2 %(11	! ·Nb Si Ti·!				
Constituent DCC_A2	.110,01,11.:				

### 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。
$
             , (600+273.15)*8.314=7259
Tm(A) = 600C
              , (1000+273.15)*8.314=10585
$ Tm(B)=1000C
Tm(C) = 800C, (800+273.15) \times 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
                                                6000 N!
                                  7259-8.314*T;
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!
         G(LIQUID,B,C;0)
                          298.15
                                  -10000;
                                                6000 N!
Parameter
Parameter G(LIQUID,A,B,C;0) 298.15
                                                6000 N!
                                  +0;
$
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)
                                           6000 N!
                         298.15
                                    0;
$
                         298.15 +30000;
                                           6000 N!
Parameter G(SOLID,A,B;0)
                                           6000 N!
Parameter
         G(SOLID,A,C;0)
                         298.15
                                +0;
         G(SOLID, B, C; 0)
                         298.15
                                           6000 N!
Parameter
                                +15000;
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/(m<sup>2</sup>)

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メモリー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 par	ameter va	lues.			
PARAMETER G(Liquid,AG,CU;0) PARAMETER G(Liquid,AG,CU;1) PARAMETER G(Liquid,AG,CU;2)	298.15 298.15 298.15	+30000; 0; 0;	6000 6000 6000	N N N	! \$ MDT ! \$ MDT ! \$ MDT
♥ PARAMETER G(Fcc,AG,CU;0) PARAMETER G(Fcc,AG,CU;1) \$	298.15 298.15	+30000; 0;	6000 6000	N N	! \$ MDT ! \$ MDT

メニュー  $\rightarrow$  Database  $\rightarrow$  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	Сору		
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			

MDT

## 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 11 // 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 calcualtion 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

// in this case, x(Si) = 0. // 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(componentNane@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
// |
//
11
// Ö-----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(\hat{C}) or T(K), default is in K
[end]
[begin] {Si-Ti binary phase diagram}
         [CalculationType] {SECTION}
          [COMPONENT] {Si Ti}
          \begin{array}{l} [POINT] \{T = 3000, x(Si) = 1\} \\ [POINT] \{T = 300, x(Si) = 1\} \\ [POINT] \{T = 300, x(Ti) = 1\} \end{array} 
         [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元系等温断面図計算
// 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 = 1500, x(Si) = 1
         [POINT] \{T = 1500, x(Ti) = 1\}
[end]
// Phase diagram: Nb-Si-Ti Isopleth
                                                                         3元系縦断面図計算
// 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 calcualtes 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

// calculate a ternary phase diagram: Nb-Ti-Si liquidus projection

// 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