

# 状態図計算ソフトウェア P a n d a t

Version 4.0

## ユーザーズガイド

株式会社 材料設計技術研究所

## 目次

システム概要	2
インストール	4
まず使ってみよう	6
計算機能1 1点計算	13
計算機能2 ライン計算	15
計算機能3 状態図	18
計算機能4 液相面図	23
計算機能5 凝固計算	25
計算機能6 バッチ計算	別紙
単位の設定	27
ファイル操作	28
グラフ機能1 グラフオプション	29
グラフ機能2 ラベルモード	31
グラフ機能3 ズームモード	33
グラフ機能4 グラフコピー	34
データベース	35
メニュー一覧	36
平衡計算モデル	37
問合せ先	39

## システム概要

多元系状態図計算ソフトウェア P a n d a t 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 98/ NT/ 2000/ Me/ XP で稼動します。

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
- 等温断面図計算
- 多元系縦断面図計算
- 3 元系液相面図計算
- 凝固計算 ( Scheil モデルによる固相率計算)

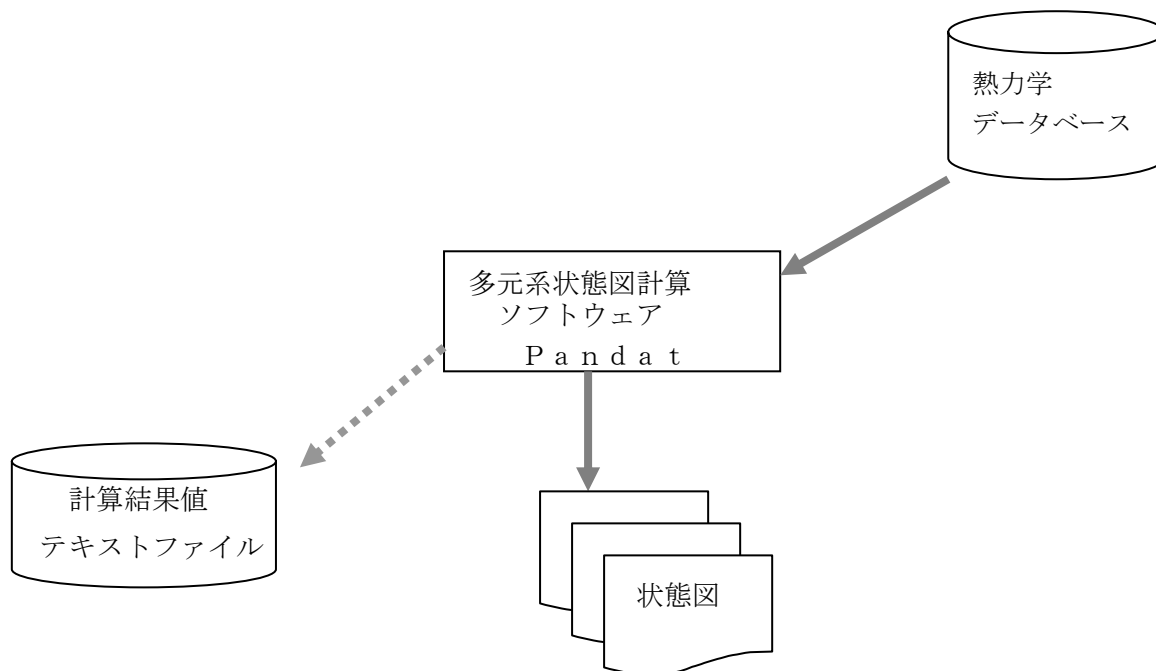
ソフトウェア操作の観点からそれぞれの機能に関して各章で説明します。

取り扱える元素数に制限はありません。

ソフトウェアは、T D B 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。

- REFERENCE 句

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



## インストール

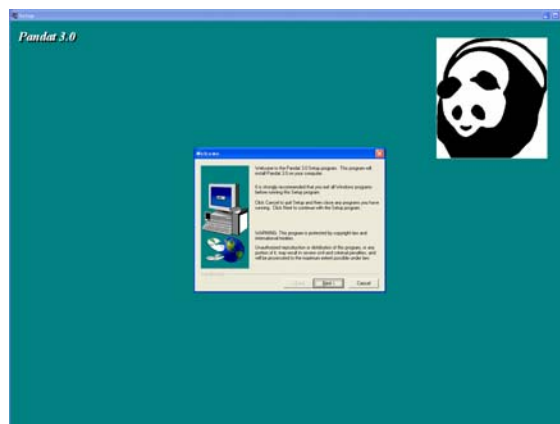
古いバージョンが既にインストールされている場合、今回インストールされる場所が前回と異なるため、古いバージョンをアンインストールする必要はありません。

- 1 ラベル「Pandat」の付いたCDをセットします。自動セットアップ・プログラムが起動します。  
本システムはパソコンのOS Windows 98/NT/2000/Me/XP に対応しています。  
ハードディスク空き容量はインストール時に 50 MB 程度必要ですが、インストール後の計算時には1計算当り10MBの作業領域が必要になります。計算結果の保存を考えると最低 100 MB の空き容量を確保してください。

WindowsNT/2000 では必ず Administrator にてログオンしてください。

- 2 右記の画面が表示されます。

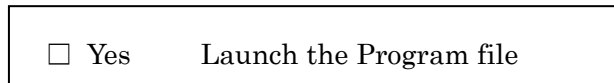
Pandat 4.0  
Setup welcome 画面



他のアプリケーションが終了  
していることを確認し、

**Next** ボタンをクリックします。

- 3 Software License Agreement 画面が表示されます。  
内容をご確認後に、**Yes** ボタンをクリックしてください。  
この内容はインストール後にテキストファイルで残されています。
- 4 Readme Information 画面が表示されます。  
**Next** ボタンをクリックします。
- 5 インストール先のディレクトリ名を指定します。  
標準は C:\Program Files\CompuThermLLC\Pandat 4.0  
です。  
これで良ければ **Next** ボタンをクリックします。
- 6 プログラム・アイコン名を指定します。  
標準は Pandat 4.0  
です。  
これで良ければ **Next** ボタンをクリックします。
- 7 インストール処理が開始します。
- 8 Setup Complete 画面が表示されます。



が表示されますので、**Finish** ボタンをクリックします。

- 9 ドングルをパラレルポート（プリンターポート）に設置します。  
ドングルはプロテクション・キーに相当し、ドングルを設置しないとソフトウェアは起動致しません。また、計算途中でこれを外すと計算を実行できません。  
（ドングルはUSBポート版も用意しています。この場合、ドングルをUSBポートに設置します。）

## アンインストール

「Pandat 3.0」かそれ以前のバージョンを既にご利用いただいている場合、「Pandat 4.0」をインストールする際に、古い Pandat をアンインストールする必要はありません。Pandat 4.0 は別の場所にインストールされます。

Pandat 4.0 をアンインストールするには、

「スタート」→「設定」→「コントロールパネル」の「アプリケーションの追加と削除」を選択します。「インストールと削除」タグの一覧に表示された「Pandat 4.0」を選択し、削除ボタンをクリックします。

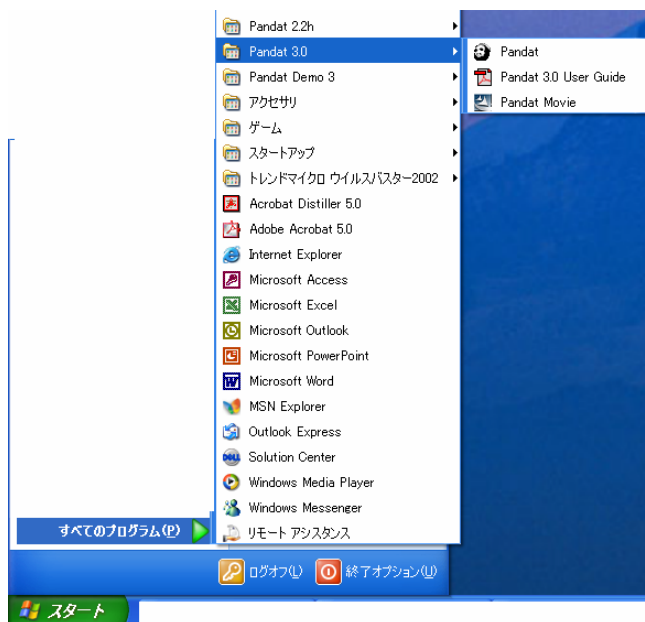
WindowsXP の場合、

「スタート」→「コントロールパネル」の「プログラムの追加と削除」を選択します。一覧に表示された「Pandat 4.0」を選択し、「変更と削除」ボタンをクリックします。

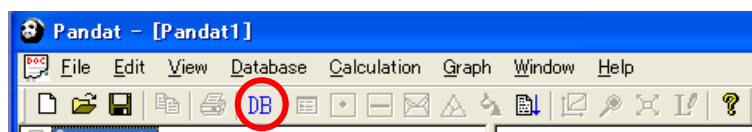
## まず使ってみよう

1) ソフトウェアを起動しましょう。

「スタート」→「プログラム」→「Pandat 4.0」→「Pandat」を選択します。



2) DBアイコンをクリックします。

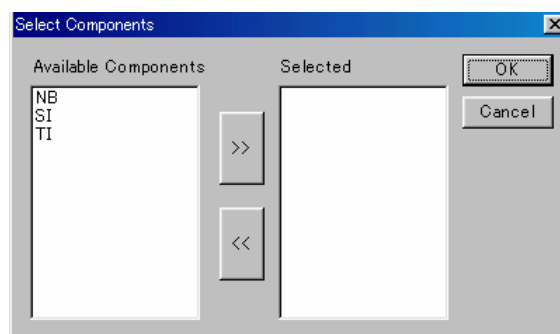


デモ用のTDBファイルを3個用意しています。

**Alcumg.tdb**, **Almgzn.tdb**, **Nbsiti.tdb** のどれかを選択します。ここでは NiSiTi.tdb を選択し、開くボタンをクリックします。

3) 元素を選択する画面が表示されます。

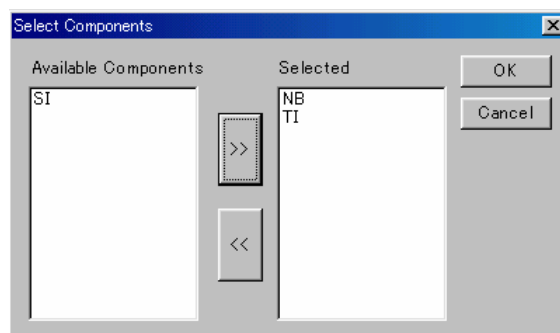
ここで **Cancel** ボタンをクリックすると元素を選択することなく先に進めます。しかし何も計算できません。この場合後で、メニューから「Database」→「Select components」を選択することにより、上記画面を再表示できます。



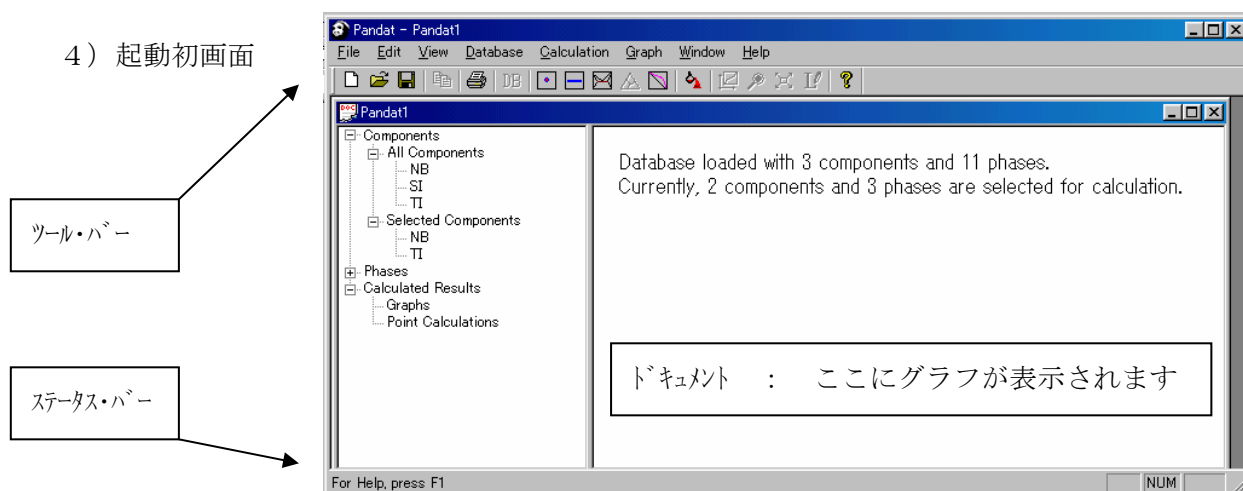
データベースに含まれている元素が左側に表示されます。右側には選択した元素が表示されます。たとえば、Nb 元素を選択し、中央の **>>** ボタンをクリックします。続いて Ti 元素を選択し、**>>** ボタンをクリックします。

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NbとTiの2元素を選択することになります。



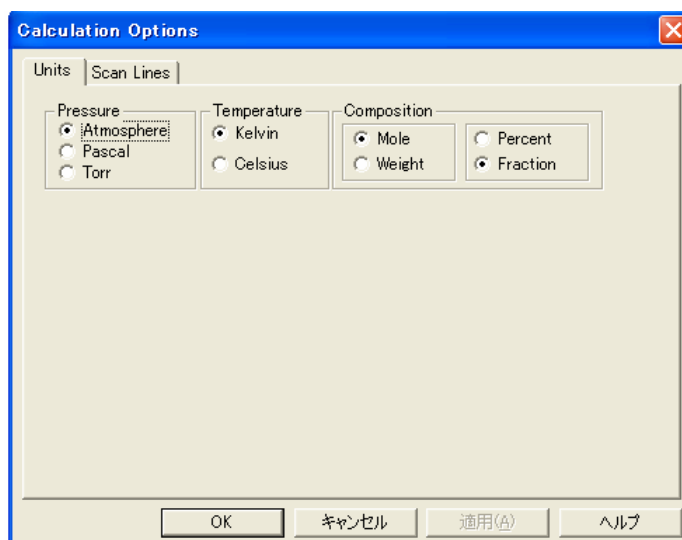
5) バージョン番号を確認しましょう。

メニューから「Help」→「About」を選択することでソフトウェアのバージョン番号を確認できます。



6) 単位の設定

メニューから「Calculation」→「Options」を選択します。Scan Lines と Units の2つの画面が用意されています。



ここでは計算に用いる「圧力」「温度」「組成」単位を設定します。  
 計算結果の図表示に関しは、**計算後にその都度**、℃かKか、モル組成か重量組成か、  
 表示する軸変数を別途指示できます。



















## 7) ソフトウェアの終了方法

メニューから 「File」 → 「Exit」 を選択することで終了します。

## 8) ツール・バー（アイコンの列）を確認しましょう。



それぞれ

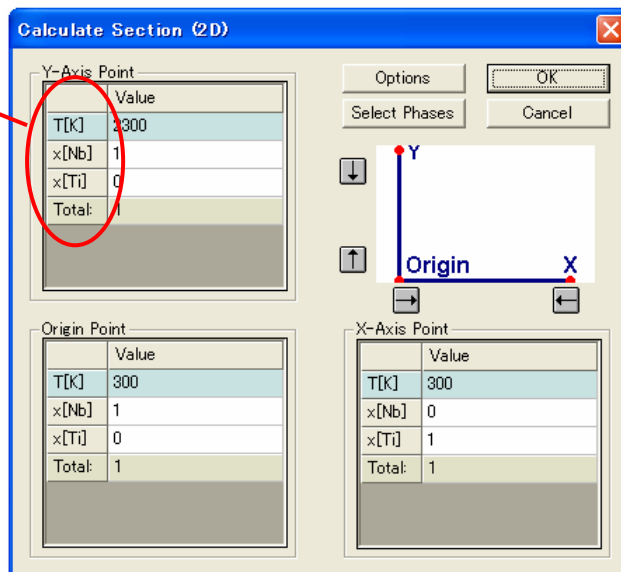
-  新規（作業領域）作成
-  開く
-  保存
-  コピー編集
-  印刷
-  DB 選択
-  単位設定
-  計算 1点計算
-  計算 ライン計算
-  計算 2次元状態図・多元系縦断面図・等温断面図計算
-  計算 液相面図計算
-  計算 凝固計算
-  計算 バッチモード
-  グラフオプション
-  ズーム・イン
-  ズーム・アウト
-  ラベル・モード
-  ヘルプ

を意味します。

9) Nb-Ti 2元系状態図を計算してみましょう。本章3)において Nb と Ti を選択した後、

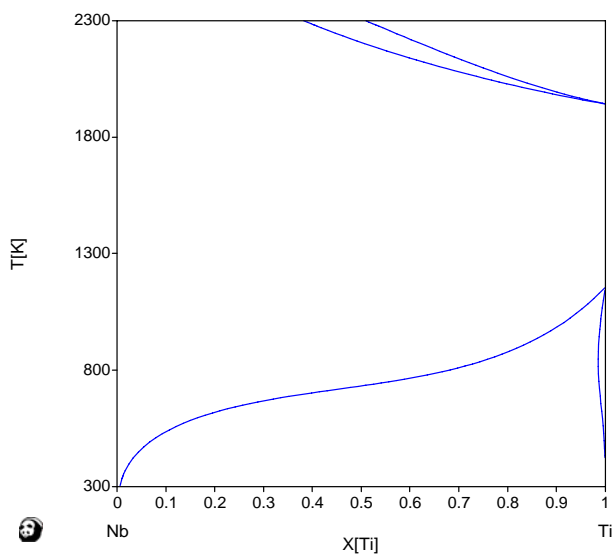
- ① アイコン  をクリックします。

ここでは温度単位がK、組成濃度単位がモル比率であることに注意します。これは本章6)に起因します。単位を変更すればこの画面の単位表示も自動的に変わります。



- ② このままOKボタンをクリックします。計算が開始されます。
- ③ 計算が終了すると2元系状態図が表示されます。

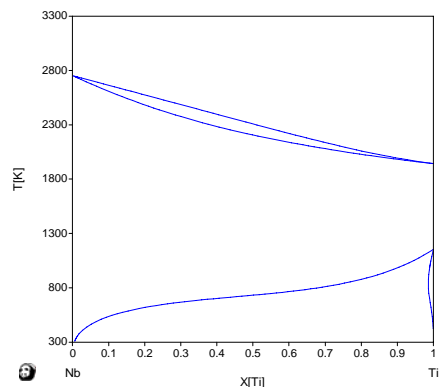
Y軸タイトル : T[K]  
Y軸値範囲 : 300 ~ 2300




X軸タイトル : X[Ti]  
X軸値範囲 : 0 ~ 1 mole fraction

Nb-Ti 2元系の状態図の計算はこれだけの操作です。

液相線が途中で切れています。表示範囲を広げても仕方ありません。  
 温度の計算範囲を広げる必要があります。  
 ①においてY点の値を 3000 にして  
 再度計算します



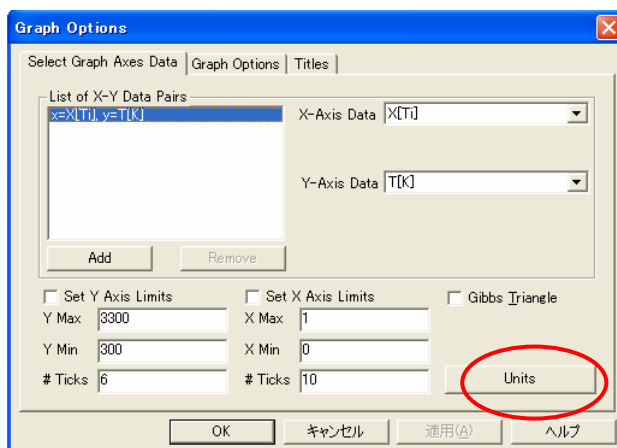
- ④ 表示範囲を変更するには、図上を1度クリック後、アイコン  をクリックします。

Graph Options 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。

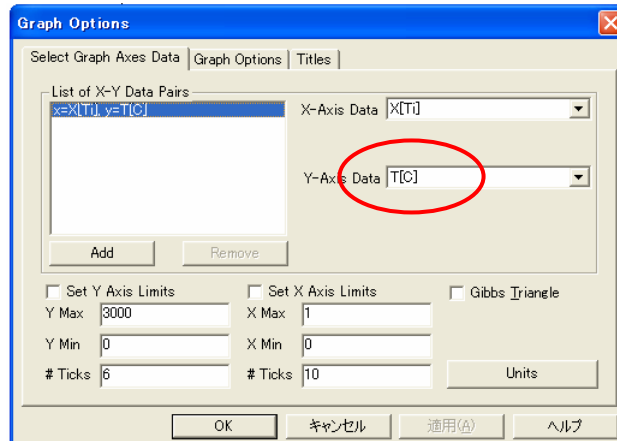
[Select Graph Axis Data]	軸変数の選択と表示範囲の指定。 たとえば横軸を他の元素にしたい場合は、 X軸の変数を一覧から選択します。  三角図表示の指定。
[Graph Options]	テキストサイズの指定。軸値サイズの指定。 線幅太さの指定。
[Titles]	図のタイトル、X軸とY軸のタイトルの指定。

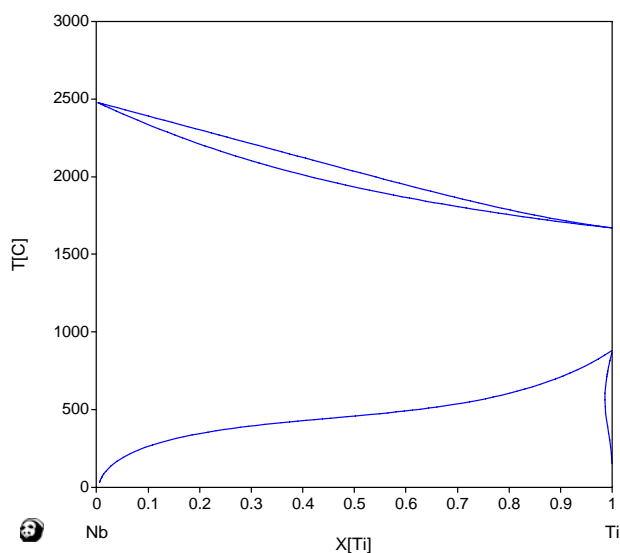
次に、Y軸の温度単位を  
℃に変えてみましょう。


Units ボタンをクリックし  
単位を変えます。

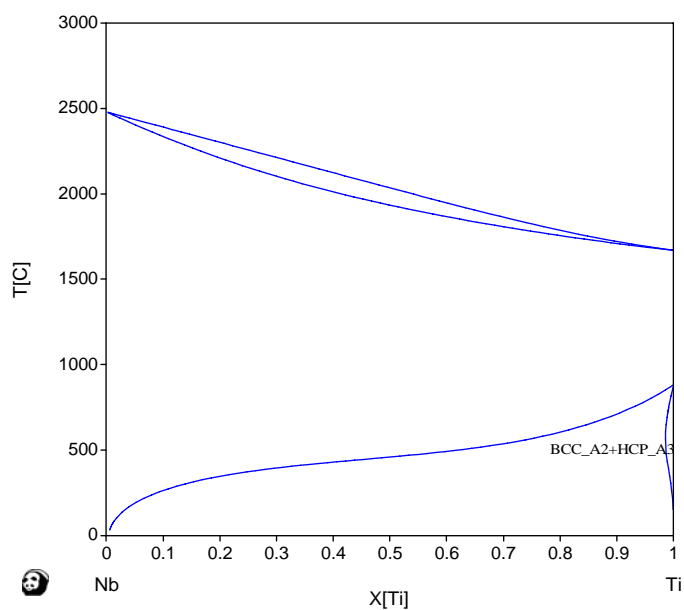
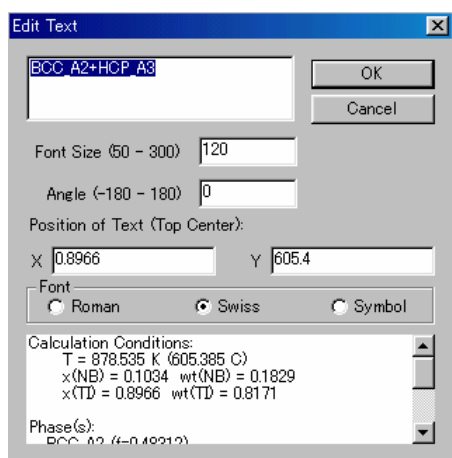


Y軸の表示が T[C]  
に変わることを確認し、  
OKボタンをクリックします。

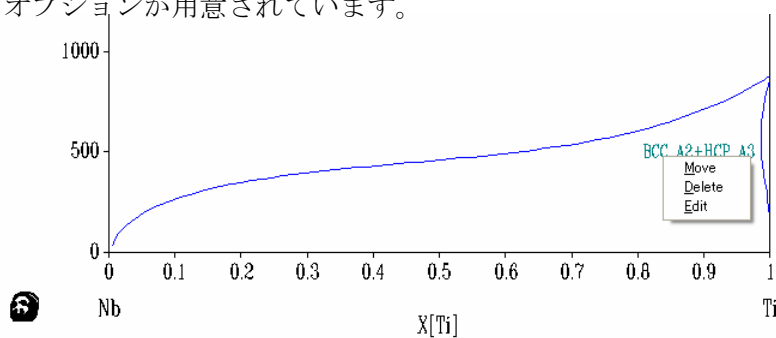




- ⑤ 相名 (ラベル) を表示させるためにはアイコン  をクリックします。マウス形状が+印になります。たとえば、600°C、0.9 X[Ti] (90at%Ti) の位置で左クリックすると、平衡相名 BCC\_A2+HCP\_A3 が Edit Text 画面上に表示されます。OK ボタンをクリックすると画面図上に相の名前が表示されます。



名前 (たとえば HCP\_A3 を  $\alpha$  に変更する) や表示位置を変更するには、ラベル上にマウスを重ね合わせ、ラベルの色が黒色から緑色に変わった所で右クリックします。Move, Delete, Edit オプションが用意されています。



- ⑥ 図を Word 等に貼り付ける方法  
「Edit」メニューから「Copy High Resolution WMF Format」を選択します。  
その後、Word にペーストします。

10) File メニューの Save とは

計算結果情報の保存を意味します。計算途中のリスタート・ファイルを保存するのではありません。また、保存ファイルではラベルモードが無効になります。ご注意ください。

ファイル拡張子は p n d で保存します。再度読み込みは、File メニューの open で行います。

11) 計算結果の値を表形式で得られます。

各種計算後に、DB ファイルが存在するディレクトリに下記のファイルが作られます。

Point.dat  
Line.dat  
Diagram.dat  
Solidification.dat  
Projection.dat

データは「タブ記号」を区切り文字としています。

たとえば、Excel から Diagram.dat ファイルを開きます。

テキストファイルウィザード 1/3 が現れますので、

1/3 画面にて元のデータ形式として「カンマやタブなどの区切り」を選択し

2/3 画面にて区切り文字として 「タブ」を選択し

3/3 画面にて列のデータ形式として「G/標準」を選択し

ボタンをクリックします。

次へ  
次へ

完了

## 計算機能 1 1点計算

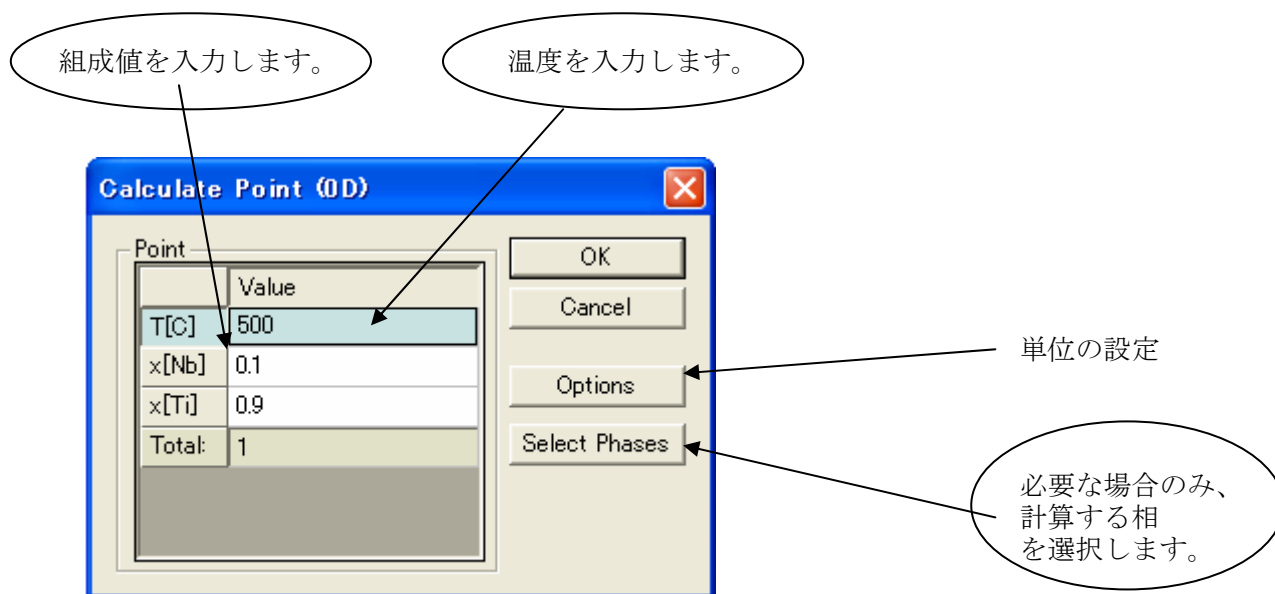


指定条件下における平衡計算を実行します。通常、温度と組成値を指定します。

現在のバージョンでは、圧力は1気圧に固定されています。

計算結果が画面に表示されます。

かつ、Point.dat ファイルを自動作成し、この外部ファイルに計算結果値を書き出します。



### 計算結果表示例

温度 500 °C 、  
Nb-90at%Ti の  
点を計算しました。

Pandat - [Pandat1]

File Edit View Database Calculation Graph Window Help

Equilibrium found

Calculated Point

Temperature = 500 [C]

Pressure = 1 [atm]

System composition and chemical potential:

Nb : x = 0.1, wt = 0.17736, mu = -37537.7

Ti : x = 0.9, wt = 0.82264, mu = -30869.4

There are 2 stable phases:

Phase BCC\_A2: fraction = 0.236473

G = -33388.5

H = 18704.5

S = 67.3776

Cp = 27.398

T = 773.15 K

x[Nb] = 0.377775 (wt[Nb] = 0.54088)

x[Ti] = 0.622225 (wt[Ti] = 0.45912)

Phase HCP\_A3: fraction = 0.763527

G = -30962.6

H = 13742.1

S = 57.8214

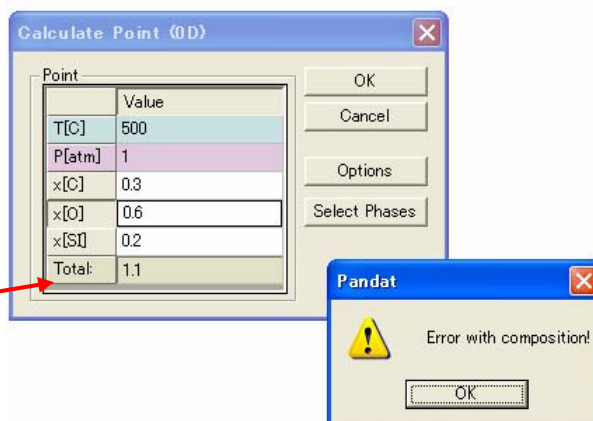
Cp = 30.7046

T = 773.15 K

x[Nb] = 0.0139697 (wt[Nb] = 0.0267553)

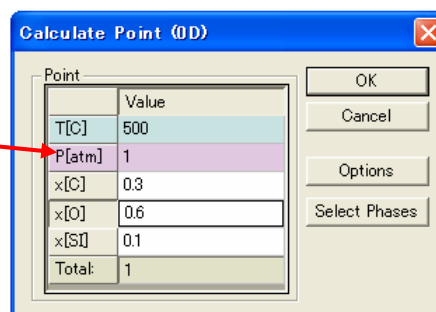
x[Ti] = 0.98603 (wt[Ti] = 0.973245)

組成比率の合計値は自動的に計算され Total 欄に表示されます。



もし、合計値が1でない場合に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。



ガス相を含む場合の計算結果

The Pandat software interface displays the following results:

Temperature = 500 [C]  
Pressure = 1 [atm]

System composition and chemical potential:  
C : x = 0.3, wt = 0.225047, mu = -7674.77  
O : x = 0.6, wt = 0.599539, mu = -281346  
SI : x = 0.1, wt = 0.175414, mu = -394373

There are 3 stable phases:

- Phase C: fraction = 0.0935606  
G = -7674.77  
H = 7134.12  
S = 19.154  
Cp = 19.5473  
T = 773.15 K  
x[C] = 1 (wt[C] = 1)
- y[C] = 1
- Phase SiO2\_quartz: fraction = 0.3  
G = -319021  
H = -293948  
S = 32.4295  
Cp = 24.6613  
T = 773.15 K  
x[SI] = 0.333333 (wt[SI] = 0.467446)  
x[O] = 0.666667 (wt[O] = 0.532554)
- y[SI(O)2.000000] = 1
- Phase GAS: fraction = 0.606439  
G = -188185  
H = 7.8831e-304  
S = -4.96271e+138  
Cp = 2.63123e-308  
T = 773.15 K

## 計算機能2 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。

現在のバージョンでは、圧力は1気圧に固定されています。

計算結果は図表示されます。

かつ、line.dat ファイルを自動作成し、この外部ファイルにも計算結果を書き出します。

計算開始点を指示します。

温度を入力します。  
組成値を入力します。



計算終了点を指示します。

計算回数を指示します。  
Ti 組成値を 1%刻みで  
100 回計算します

必要な場合のみ、  
計算する相を選択します。

The dialog box 'Calculate Line (1D)' contains the following elements:

- Start Point:** A table with columns 'Value' and 'Variable'. It contains: T[C] 2000, x[Nb] 1, x[Ti] 0, and Total: 1.
- End Point:** A table with columns 'Value' and 'Variable'. It contains: T[C] 2000, x[Nb] 0, x[Ti] 1, and Total: 1.
- Number of Calculation Steps:** A text input field containing '100'.
- Buttons:** 'OK', 'Cancel', 'Options', and 'Select Phases'.
- Navigation:** Two arrow buttons (right and left) between the Start and End point tables.

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手間が省けます。

計算結果表示例

T(K)	x(Nb)	x(Ti)	Stable Phases	f(BCC_A2)	x(Nb)(BCC_A2)	x(Ti)(BCC_A2)	f(Liquid)	x(Nb)(Liquid)	x(Ti)(Liquid)
2000.0	0.66	0.34	BCC_A2	1	0.66	0.34			
2000.0	0.65	0.35	BCC_A2	1	0.65	0.35			
2000.0	0.64	0.36	BCC_A2	1	0.64	0.36			
2000.0	0.63	0.37	BCC_A2	1	0.63	0.37			
2000.0	0.62	0.38	BCC_A2	1	0.62	0.38			
2000.0	0.61	0.39	BCC_A2	1	0.61	0.39			
2000.0	0.6	0.4	BCC_A2	1	0.6	0.4			
2000.0	0.59	0.41	BCC_A2	1	0.59	0.41			
2000.0	0.588895	0.411105	Liquid + BCC_A2	1	0.588895	0.411105	0	0.463008	0.536992
2000.0	0.58	0.42	Liquid + BCC_A2	0.929342	0.588895	0.411105	0.0706578	0.463008	0.536992
2000.0	0.57	0.43	Liquid + BCC_A2	0.849906	0.588895	0.411105	0.150094	0.463008	0.536992
2000.0	0.56	0.44	Liquid + BCC_A2	0.770471	0.588895	0.411105	0.229529	0.463008	0.536992
2000.0	0.55	0.45	Liquid + BCC_A2	0.691035	0.588895	0.411105	0.308965	0.463008	0.536992
2000.0	0.54	0.46	Liquid + BCC_A2	0.611599	0.588895	0.411105	0.388401	0.463008	0.536992
2000.0	0.53	0.47	Liquid + BCC_A2	0.532159	0.588895	0.411105	0.467841	0.463008	0.536992
2000.0	0.52	0.48	Liquid + BCC_A2	0.452719	0.588895	0.411105	0.547281	0.463008	0.536992
2000.0	0.51	0.49	Liquid + BCC_A2	0.373286	0.588895	0.411105	0.626714	0.463008	0.536992
2000.0	0.5	0.5	Liquid + BCC_A2	0.293852	0.588895	0.411105	0.706148	0.463008	0.536992
2000.0	0.49	0.51	Liquid + BCC_A2	0.214412	0.588895	0.411105	0.785588	0.463008	0.536992
2000.0	0.48	0.52	Liquid + BCC_A2	0.134973	0.588895	0.411105	0.865027	0.463008	0.536992
2000.0	0.47	0.53	Liquid + BCC_A2	0.0555395	0.588895	0.411105	0.944461	0.463008	0.536992
2000.0	0.463009	0.536991	Liquid + BCC_A2	0	0.588895	0.411105	1	0.463008	0.536992
2000.0	0.46	0.54	Liquid				1	0.46	0.54
2000.0	0.45	0.55	Liquid				1	0.45	0.55
2000.0	0.44	0.56	Liquid				1	0.44	0.56
2000.0	0.43	0.57	Liquid				1	0.43	0.57
2000.0	0.42	0.58	Liquid				1	0.42	0.58
2000.0	0.41	0.59	Liquid				1	0.41	0.59
2000.0	0.4	0.6	Liquid				1	0.4	0.6
2000.0	0.39	0.61	Liquid				1	0.39	0.61

この部分を  
クリックし  
ます

相境界点も計算し  
表示します。

line.dat

ファイルの内容

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1	x(Nb)	wt(Nb)	mu(Nb)	x(Ti)	wt(Ti)	mu(Ti)	G(total)	T(K)	T(C)		Line Calculation			
2														
35	0.68	0.804815	-160097	0.32	0.195185	-168734	-162861	2273.15	2000		BCC_A2(1)			
36	0.67	0.797554	-160319	0.33	0.202446	-168272	-162944	2273.15	2000		BCC_A2(1)			
37	0.66	0.790209	-160544	0.34	0.209791	-167826	-163020	2273.15	2000		BCC_A2(1)			
38	0.65	0.782778	-160771	0.35	0.217222	-167395	-163089	2273.15	2000		BCC_A2(1)			
39	0.64	0.77526	-161001	0.36	0.22474	-166977	-163152	2273.15	2000		BCC_A2(1)			
40	0.63	0.767653	-161233	0.37	0.232347	-166573	-163209	2273.15	2000		BCC_A2(1)			
41	0.62	0.759956	-161469	0.38	0.240044	-166180	-163259	2273.15	2000		BCC_A2(1)			
42	0.61	0.752167	-161708	0.39	0.247833	-165798	-163303	2273.15	2000		BCC_A2(1)			
43	0.6	0.744284	-161950	0.4	0.255716	-165428	-163341	2273.15	2000		BCC_A2(1)			
44	0.59	0.736306	-162196	0.41	0.263694	-165067	-163373	2273.15	2000		BCC_A2(1)			
45	0.588895	0.735418	-162223	0.411105	0.264582	-165027	-163376	2273.15	2000		Liquid(0)+BCC_A2(1)			
46	0.58	0.728231	-162223	0.42	0.271769	-165027	-163401	2273.15	2000		Liquid(0.0706578)+BCC_A2(0.929342)			
47	0.57	0.720056	-162223	0.43	0.279944	-165027	-163429	2273.15	2000		Liquid(0.150094)+BCC_A2(0.849906)			
48	0.56	0.711782	-162223	0.44	0.288218	-165027	-163457	2273.15	2000		Liquid(0.229529)+BCC_A2(0.770471)			
49	0.55	0.703404	-162223	0.45	0.296596	-165027	-163485	2273.15	2000		Liquid(0.308965)+BCC_A2(0.691035)			
50	0.54	0.694922	-162223	0.46	0.305078	-165027	-163513	2273.15	2000		Liquid(0.388401)+BCC_A2(0.611599)			
51	0.53	0.686334	-162223	0.47	0.313666	-165027	-163541	2273.15	2000		Liquid(0.467841)+BCC_A2(0.532159)			
52	0.52	0.677637	-162223	0.48	0.322363	-165027	-163569	2273.15	2000		Liquid(0.547281)+BCC_A2(0.452719)			
53	0.51	0.668829	-162223	0.49	0.331171	-165027	-163597	2273.15	2000		Liquid(0.626714)+BCC_A2(0.373286)			
54	0.5	0.659909	-162223	0.5	0.340091	-165027	-163625	2273.15	2000		Liquid(0.706148)+BCC_A2(0.293852)			
55	0.49	0.650874	-162223	0.51	0.349126	-165027	-163653	2273.15	2000		Liquid(0.785588)+BCC_A2(0.214412)			
56	0.48	0.641722	-162223	0.52	0.358278	-165027	-163681	2273.15	2000		Liquid(0.865027)+BCC_A2(0.134973)			
57	0.47	0.632451	-162223	0.53	0.367549	-165027	-163709	2273.15	2000		Liquid(0.944461)+BCC_A2(0.0555395)			
58	0.463009	0.625897	-162223	0.536991	0.374103	-165027	-163729	2273.15	2000		Liquid(1)+BCC_A2(0)			
59	0.46	0.623058	-162336	0.54	0.376942	-164930	-163737	2273.15	2000		Liquid(1)			
60	0.45	0.613541	-162719	0.55	0.386459	-164611	-163760	2273.15	2000		Liquid(1)			
61	0.44	0.603897	-163111	0.56	0.396103	-164297	-163775	2273.15	2000		Liquid(1)			
62	0.43	0.594124	-163511	0.57	0.405876	-163988	-163783	2273.15	2000		Liquid(1)			
63	0.42	0.584219	-163921	0.58	0.415781	-163685	-163784	2273.15	2000		Liquid(1)			
64	0.41	0.57418	-164342	0.59	0.42582	-163387	-163778	2273.15	2000		Liquid(1)			
65	0.4	0.564003	-164773	0.6	0.435997	-163094	-163765	2273.15	2000		Liquid(1)			
66	0.39	0.553687	-165215	0.61	0.446313	-162805	-163745	2273.15	2000		Liquid(1)			
67	0.38	0.543227	-165669	0.62	0.456773	-162521	-163717	2273.15	2000		Liquid(1)			

平衡相の存在比率を図表示できます。

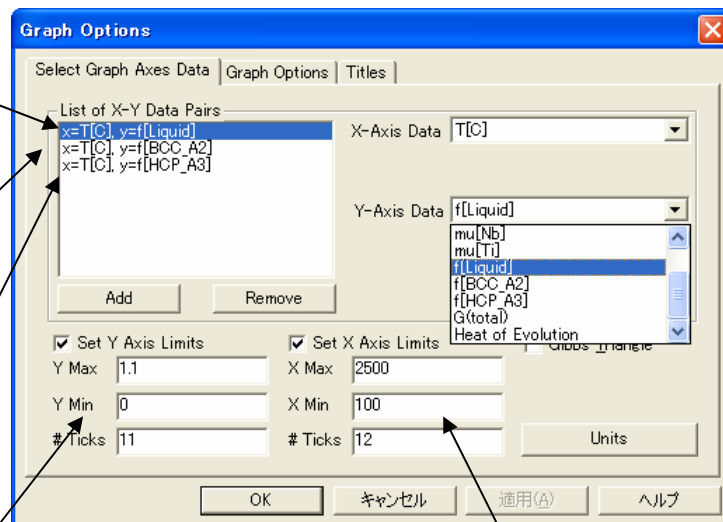
組成を固定し（ 50at%Nb-50at%Ti ）温度を変化させた場合を計算します。

X軸を T(C) とし、  
Y軸の1つ目を f(Liquid)  
とし Add ボタンをクリック  
します。

次に、Y軸を f(BCC)  
とし Add ボタンをクリック  
します。

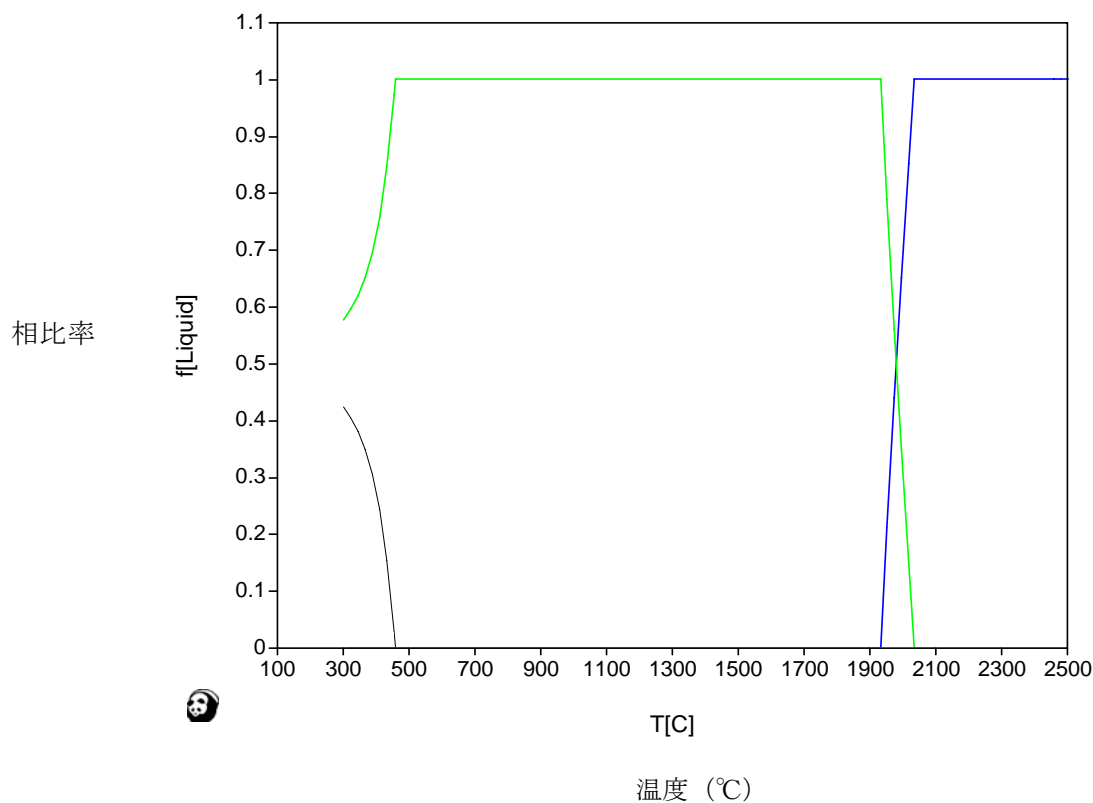
そして Y軸を f(HCP)  
とし Add ボタンをクリック  
します。

不要な組み合わせがあれば  
Remove します。



Y軸の表示範囲は 0～1.1 とし、X軸の表示範囲は 100～2500℃とします。

青線が液相、緑線が BCC 相、黒線が HCP ( $\alpha$  Ti) 相です。



### 計算機能3 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。

現在のバージョンでは、圧力は1気圧に固定されています。

計算結果が画面に表示されます。

かつ、`diagram.dat` ファイルを自動作成し、この外部ファイルにも計算結果を書き出します。

2元系の場合、通常、このまま **OK** ボタンをクリックします。

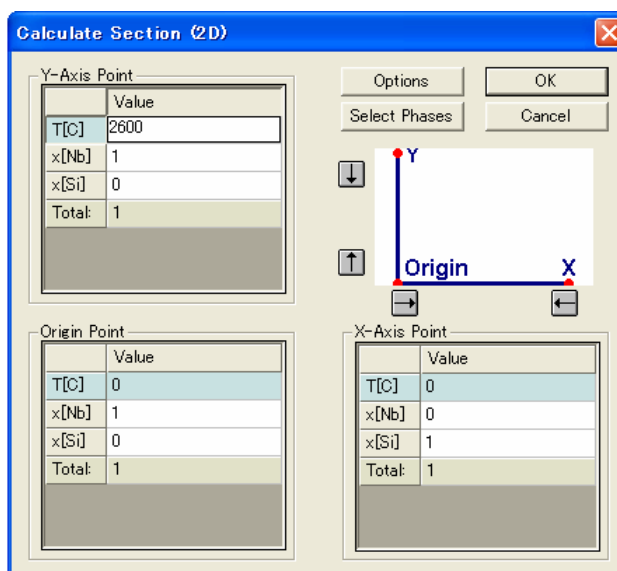
3点 (Y点、O点 (Origin)、X点) の条件値を考えます。

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、

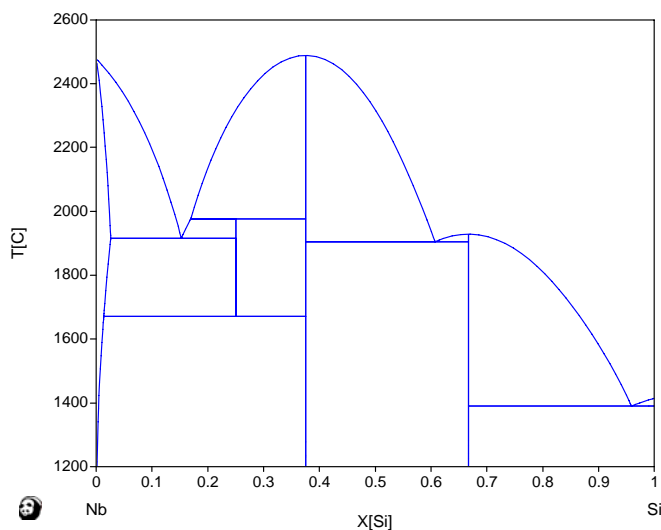
O点では Si がゼロで Nb が 100at% の断面とします。

X点では Nb がゼロで Si が 100at% の断面とします。



計算結果表示例

Nb-Si 状態図



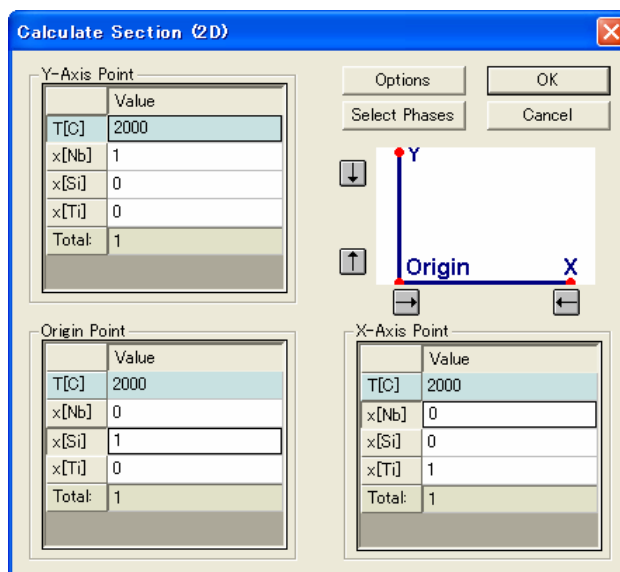
## 等温断面図の計算指示

温度を3箇所（Y点、O点、X点）とも同じにします。

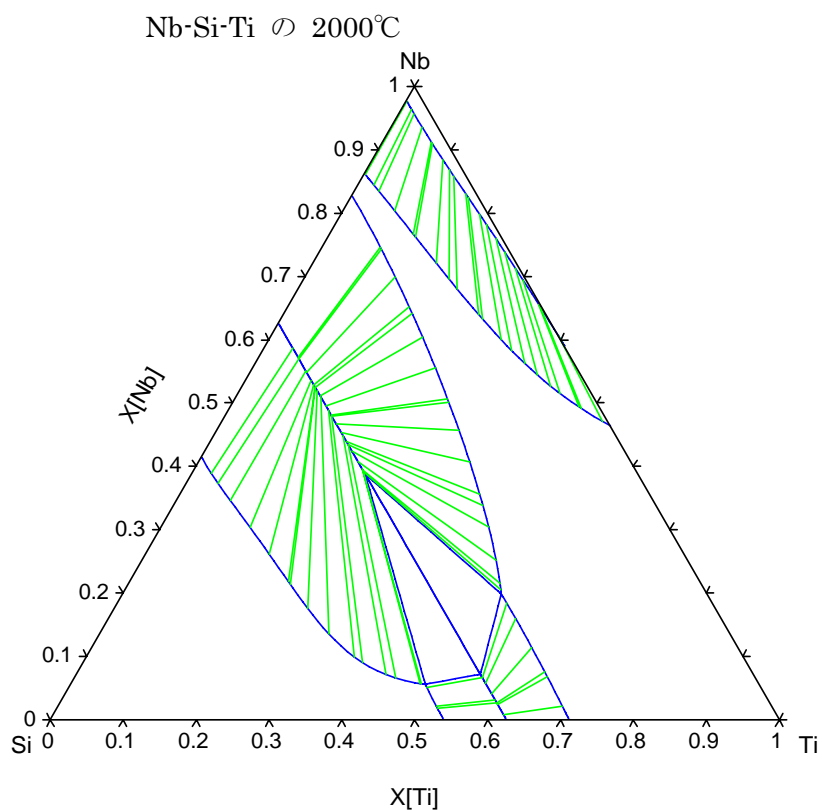
3元系の場合は、3角コーナーの組成値をそれぞれ1にします。

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。（例えば a）

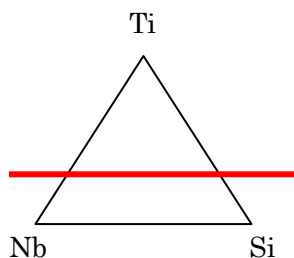
3角コーナーの組成値をそれぞれ（1 - a）にします。



## 計算結果例



多元系の場合も同じ指示画面を uses。



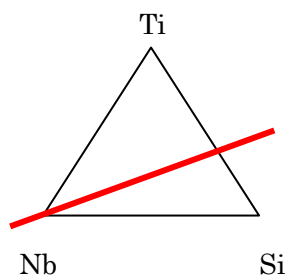
Ti の組成を固定した縦断面を計算する。

指示画面は

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

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

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



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

指示画面は

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

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

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

## 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。

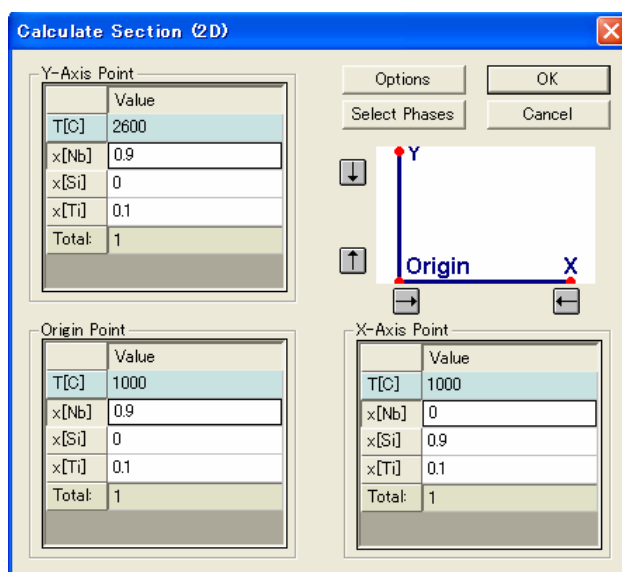
組成を固定する元素の値を3箇所とも同じにします。

(2元素を残し) 例えば Ti の値を3箇所とも同じにします。 10at%Ti = 0.1 mole frac.

2元素の値を指示します。

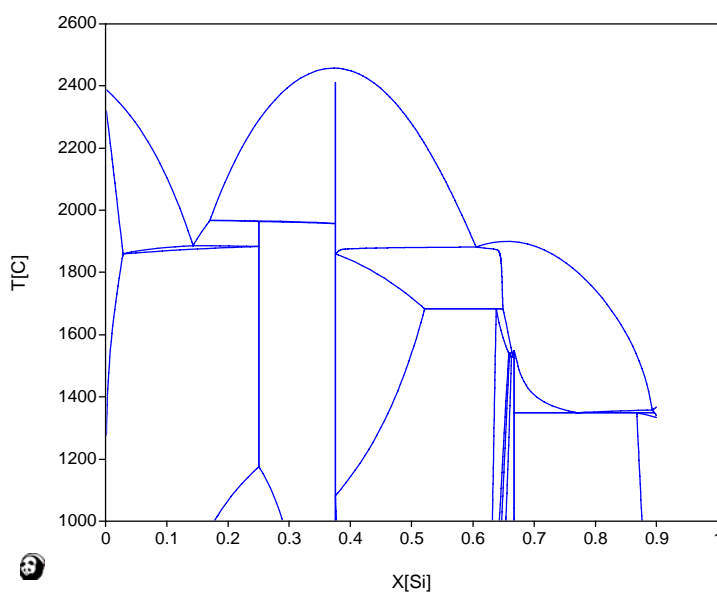
O点では Si がゼロで Nb が 90at% の断面とします。

X点では Nb がゼロで Si が 90at% の断面とします。



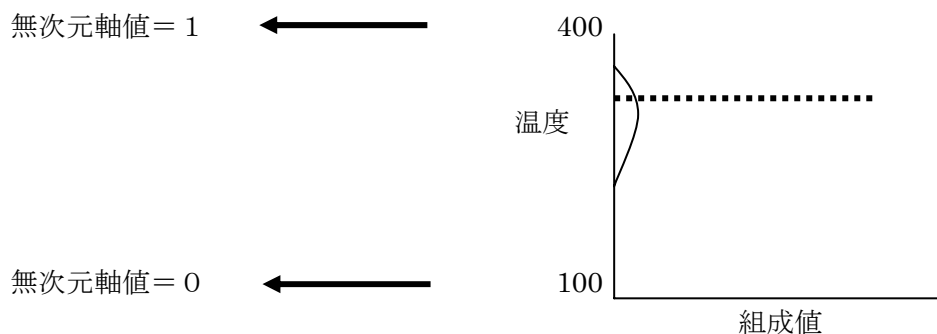
## 計算結果例

Nb-10at%Ti-Si の縦断面図



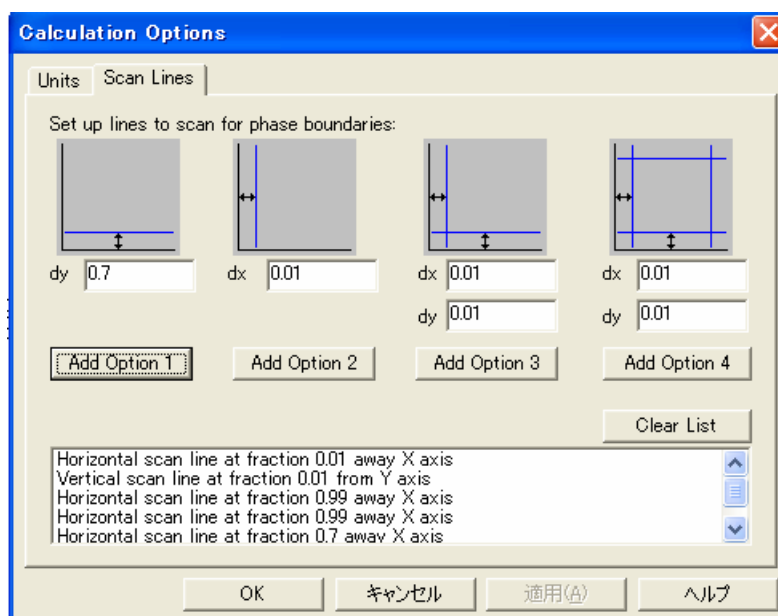
**Scan Lines** の利用

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。



例えば組成値が 0.01% 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で指示します。 100°Cを0とし 400°Cを1と考え、約 0.7 の温度部分を計算したいので 「 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。

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



## 計算機能 4 液相面図



液相面図の計算を実行します。

現在のバージョンでは、圧力は1気圧に固定されています。

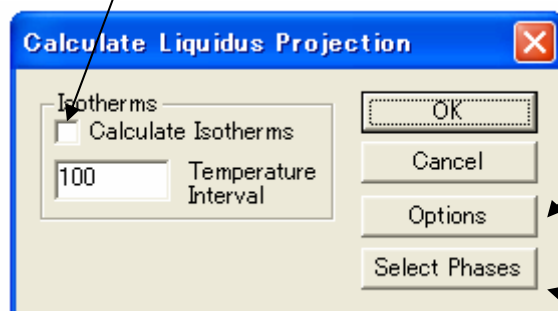
計算結果が画面に表示されます。

かつ、projection.dat ファイルを自動作成し、この外部ファイルにも計算結果を書き出します。

通常、このまま OK ボタンをクリックします。

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

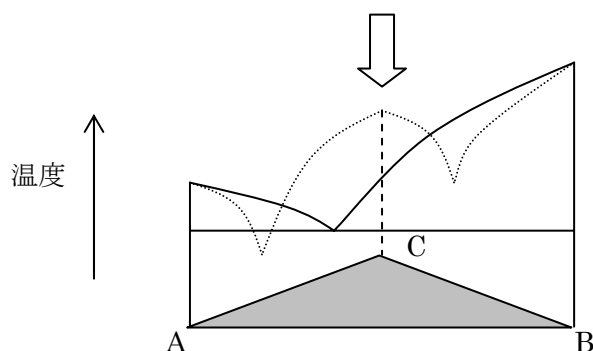
等温度の補助線が必要な場合チェックします。



必要な場合のみ、計算する相を選択します。

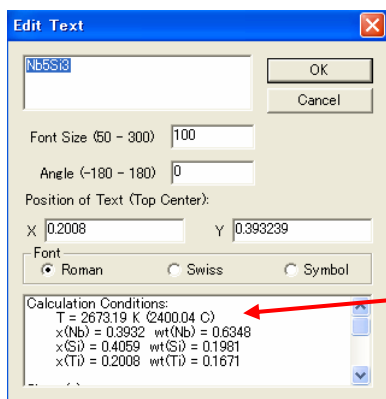
液相面図とは、

上部からの投射 = 液相面図

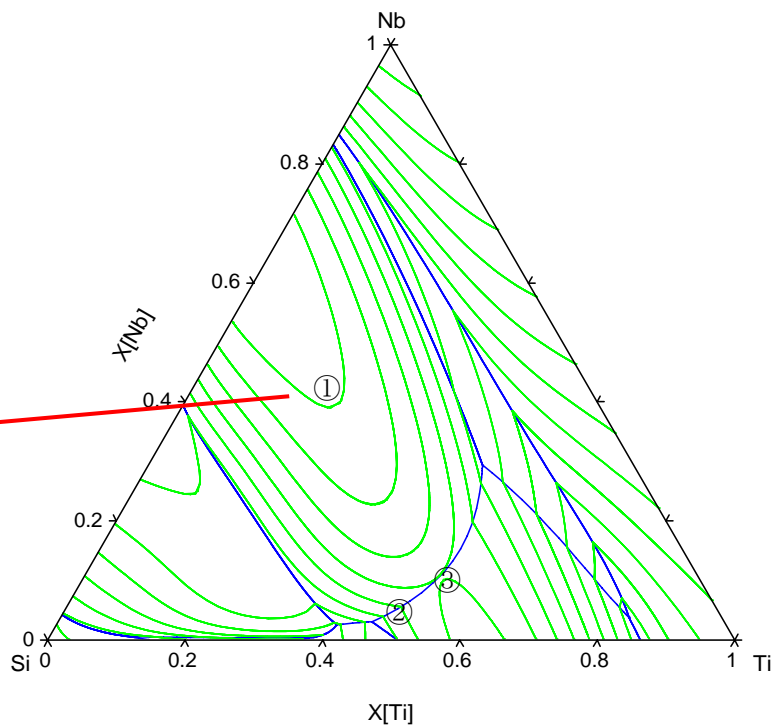


計算結果例

Nb-Si-Ti の液相面図



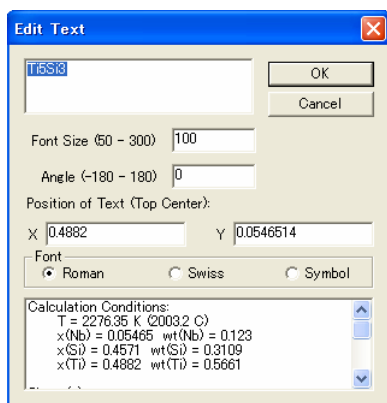
ラベル機能を用いて  
①のラインは 2400°C  
であることが分かる。  
初晶は Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>



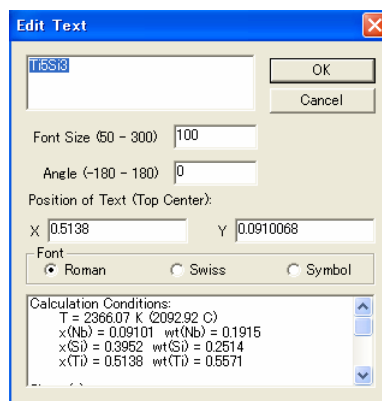
谷がどちらに傾斜しているのか図から判断できないので、  
ラベル機能を用いて温度を2点以上調べます。

②の点では

③の点では



温度は約 2000°C  
初晶は Ti<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>



温度は約 2100°C  
初晶は Ti<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>

したがって、温度は点③の方が高いことが分かる。

## 計算機能6 凝固計算



凝固シミュレーションの計算を実行します。 温度-固相率の関係を計算します。

計算モデルは、lever rule と Scheil モデルが用意されています。 前者はより平衡計算に近いモデルです。

現在のバージョンでは、圧力は1気圧に固定されています。

計算結果が画面に表示されます。

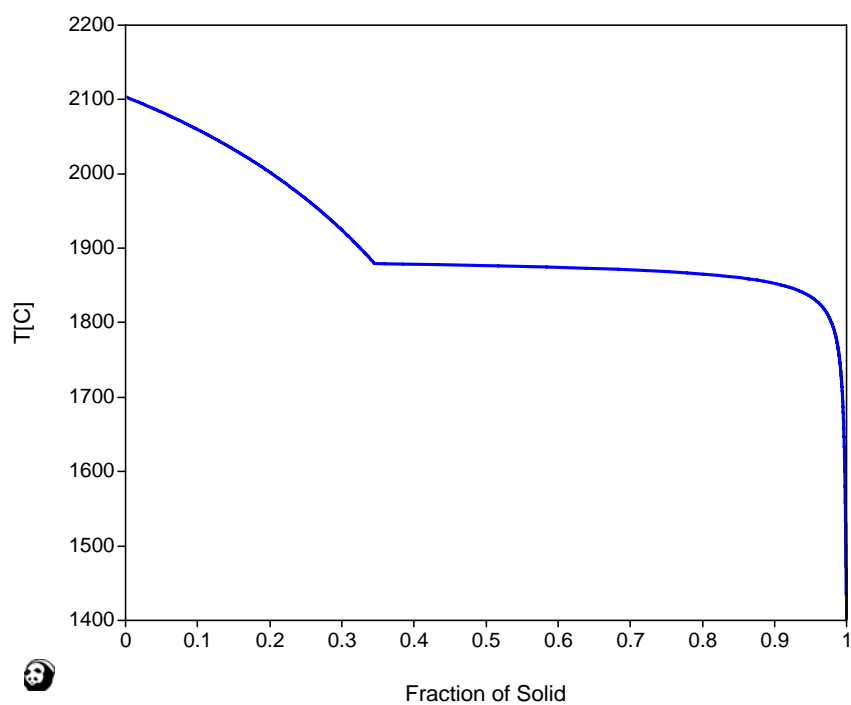
かつ、solidification.dat ファイルを自動作成し、この外部ファイルにも計算結果を書き出します。

組成値を入力し、OK ボタンをクリックします。

	Value
T[C]	3000
x[Nb]	0.8
x[Si]	0.1
x[Ti]	0.1
Total	1

必要な場合のみ、  
計算する相を選択します。

計算結果例



ここをクリックします。

画面にテーブル表示します。温度、固相率、相名を確認できます。

[T(C)]	Stable Phases	fs	f(Liquid)	f(BCC_A2)	f(Nb3Si)	f(Ti5Si3)	Hm	H-HD	x(Liq)/Nb
1893.23	Liquid + BCC_A2	0.331339	0.668661	0.331339			59393.3	-14884.9	0.742201
1891.63	Liquid + BCC_A2	0.332896	0.667104	0.332896			59306.8	-14971.4	0.742826
1890.03	Liquid + BCC_A2	0.334445	0.665555	0.334445			59220.6	-15057.6	0.742452
1888.43	Liquid + BCC_A2	0.335996	0.664014	0.335996			59134.5	-15143.7	0.742079
1886.83	Liquid + BCC_A2	0.337517	0.662483	0.337517			59048.7	-15229.5	0.741706
1885.23	Liquid + BCC_A2	0.33904	0.66096	0.33904			58963.1	-15315.1	0.741335
1883.63	Liquid + BCC_A2	0.340554	0.659446	0.340554			58877.8	-15400.4	0.740964
1882.03	Liquid + BCC_A2	0.342059	0.657941	0.342059			58792.6	-15486.6	0.740594
1880.43	Liquid + BCC_A2	0.343567	0.656443	0.343567			58707.7	-15570.5	0.740224
1879.63	Liquid + BCC_A2	0.344302	0.655698	0.344302			58710.7	-15567.5	0.739856
1879.23	Liquid + BCC_A2	0.344674	0.655326	0.344674			58712.1	-15566.1	0.739671
1879.03	Liquid + BCC_A2	0.34486	0.65514	0.34486			58712.8	-15565.4	0.73958
1878.93	Liquid + BCC_A2	0.344952	0.655048	0.344952			58713.1	-15565.1	0.739534
1878.91	Liquid + BCC_A2 + Nb3Si	0.344974	0.655026	0.344974	0		58716.2	-15562	0.739511
1878.71	Liquid + BCC_A2 + Nb3Si	0.358387	0.641613	0.351428	0.00695834		57555.4	-16722.8	0.739505
1878.31	Liquid + BCC_A2 + Nb3Si	0.38426	0.61574	0.363887	0.0203736		56124.7	-18153.5	0.738953
1877.51	Liquid + BCC_A2 + Nb3Si	0.432432	0.567568	0.387111	0.0453217		53526.6	-20751.6	0.737852
1875.91	Liquid + BCC_A2 + Nb3Si	0.516152	0.483848	0.427688	0.0885845		49232.7	-25054.5	0.735655
1874.31	Liquid + BCC_A2 + Nb3Si	0.583423	0.416577	0.460155	0.123269		47905.1	-26373.1	0.731285
1872.71	Liquid + BCC_A2 + Nb3Si	0.638131	0.361859	0.486718	0.151413		46798.8	-27479.4	0.726941
1871.11	Liquid + BCC_A2 + Nb3Si	0.68311	0.31689	0.509606	0.174504		45961.2	-28417	0.722541
1869.51	Liquid + BCC_A2 + Nb3Si	0.72046	0.27954	0.528622	0.193638		45059	-29219.2	0.718366
1867.91	Liquid + BCC_A2 + Nb3Si	0.751759	0.245241	0.542119	0.20964		44366.8	-29911.4	0.714121
1866.31	Liquid + BCC_A2 + Nb3Si	0.778206	0.221794	0.55607	0.223135		43764.6	-30513.6	0.709906
1864.71	Liquid + BCC_A2 + Nb3Si	0.800725	0.199275	0.566121	0.234605		43236.6	-31041.6	0.705719
1863.11	Liquid + BCC_A2 + Nb3Si	0.820037	0.179963	0.575615	0.244422		42770.2	-31508	0.701561
1861.51	Liquid + BCC_A2 + Nb3Si	0.836706	0.163294	0.583825	0.25288		42355.6	-31922.6	0.697432
1859.91	Liquid + BCC_A2 + Nb3Si	0.851182	0.148818	0.590968	0.260213		41984.6	-32293.6	0.693329
1858.31	Liquid + BCC_A2 + Nb3Si	0.863894	0.136176	0.597218	0.266693		41650.5	-32677.7	0.689254

Solidification.dat ファイルの内容

固相率、系のエンタルピー、系の熱容量、液相中の各元素濃度、各元素の化学ポテンシャル  
 温度 (K)、温度 (°C)、相名

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q				
1	fs	H(total)	Cp(total)	x(L,Nb)	wt(L,Nb)	mu(Nb)	x(L,Si)	wt(L,Si)	mu(Si)	x(L,Ti)	wt(L,Ti)	mu(Ti)	T(K)	T(C)		Nb	Si	Ti (liquid)	Nb	O	
2																					
3	0	74278.2	37.3971	0.8	0.90727	-90175.9	0.1	0.034284	-226839	0.1	0.058446	-120851	2375.88	2102.73				Liquid + BCC_A2			
4	0.000258	74249.4	37.3865	0.799968	0.907254	-90177.3	0.100021	0.034292	-226829	0.100011	0.058454	-120851	2375.78	2102.63				Liquid + BCC_A2			
5	0.000773	74211	37.3751	0.799904	0.907222	-90180	0.100064	0.034308	-226808	0.100033	0.058469	-120850	2375.58	2102.43				Liquid + BCC_A2			
6	0.0018	74134.5	37.3523	0.799775	0.907159	-90185.5	0.100149	0.034341	-226765	0.100076	0.0585	-120849	2375.18	2102.03				Liquid + BCC_A2			
7	0.003846	73982	37.3068	0.799519	0.907034	-90196.5	0.100319	0.034405	-226680	0.100162	0.058561	-120846	2374.38	2101.23				Liquid + BCC_A2			
8	0.007911	73679.6	37.2167	0.799006	0.906782	-90218.4	0.100659	0.034534	-226511	0.100334	0.058683	-120841	2372.78	2099.63				Liquid + BCC_A2			
9	0.011938	73529.9	37.203	0.798496	0.906532	-90240.3	0.100998	0.034663	-226343	0.100506	0.058805	-120836	2371.18	2098.03				Liquid + BCC_A2			
10	0.015926	73381.1	37.1894	0.797987	0.906282	-90262.2	0.101336	0.034792	-226175	0.100677	0.058926	-120831	2369.58	2096.43				Liquid + BCC_A2			
11	0.019876	73233.4	37.1757	0.797479	0.906032	-90284.1	0.101674	0.03492	-226008	0.100847	0.059047	-120827	2367.98	2094.83				Liquid + BCC_A2			
12	0.023789	73086.6	37.1621	0.796973	0.905784	-90305.9	0.10201	0.035049	-225841	0.101017	0.059168	-120822	2366.38	2093.23				Liquid + BCC_A2			
13	0.027666	72940.7	37.1485	0.796468	0.905535	-90327.7	0.102346	0.035177	-225675	0.101186	0.059288	-120818	2364.78	2091.63				Liquid + BCC_A2			
14	0.031507	72795.8	37.1349	0.795964	0.905287	-90349.5	0.102681	0.035305	-225510	0.101354	0.059408	-120814	2363.18	2090.03				Liquid + BCC_A2			
15	0.035312	72651.2	37.1213	0.795462	0.90504	-90371.3	0.103016	0.035432	-225345	0.101522	0.059528	-120810	2361.58	2088.43				Liquid + BCC_A2			
16	0.039081	72508.7	37.1077	0.794962	0.904794	-90393.1	0.103349	0.03556	-225181	0.101689	0.059647	-120806	2359.98	2086.83				Liquid + BCC_A2			

Solidification\_X.dat ファイルの内容

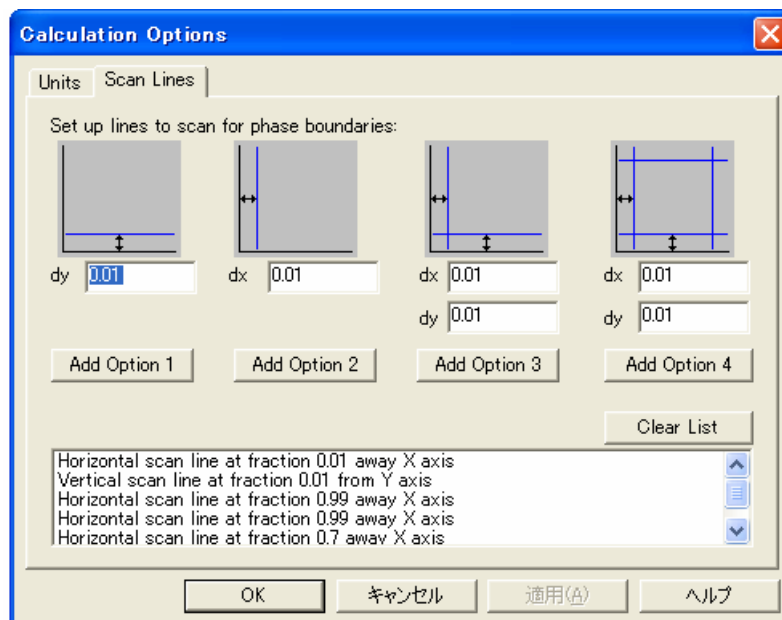
温度 (K)、温度 (°C)、固相率、系のエンタルピー、液相の比率、液相中の各元素濃度、  
 他の相の比率、各相中の各元素濃度

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	
1	T(K)	T(C)	fs	Hm	f(Liquid)	x(Nb@Liquid)	x(Si@Liquid)	x(Ti@Liquid)	f(BCC_A2)	x(Nb@BCC)	x(Si@BCC)	x(Ti@BCC)	f(Nb3Si)	x(Nb@Nb3Si)	x(Si@Nb3Si)	x(Ti@Nb3Si)	f(T5Si3)	x(Nb@T5Si3)	
2																			
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	0.901794	0.027889	0.070316							
147	2152.38	1879.23	0.344674	58712.1	0.655326	0.73958	0.141179	0.119242	0.344674	0.901755	0.027909	0.070336							
148	2152.18	1879.03	0.34486	58712.8	0.65514	0.739534	0.141211	0.119256	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	0.119856	0.351428	0.901402	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	0.427588	0.896967	0.027981	0.075052	0.088585	0.633873	0.25	0.116327			
155	2147.46	1874.31	0.583423	47905.1	0.416577	0.726947	0.140359	0.132694	0.460155	0.894483	0.028007	0.07751	0.123269	0.630051	0.25	0.119949			
156	2145.86	1872.71	0.638131	46798.8	0.361859	0.722641	0.140077	0.137822	0.486718	0.892304	0.028031	0.079935	0.151413	0.626503	0.25	0.123497			
157	2144.26	1871.11	0.68311	45861.2	0.31689	0.718366	0.139805	0.141829	0.508606	0.889618	0.028051	0.08233	0.174504	0.623028	0.25	0.126972			
158	2142.66	1869.51	0.72046	45059	0.27954	0.714121	0.139543	0.146336	0.528622	0.887234	0.02807	0.084696	0.193638	0.619622	0.25	0.130378			
159	2141.06	1867.91	0.751759	44366.8	0.248241	0.709906	0.139291	0.150804	0.542119	0.88488	0.028086	0.087034	0.20964	0.616283	0.25	0.133717			

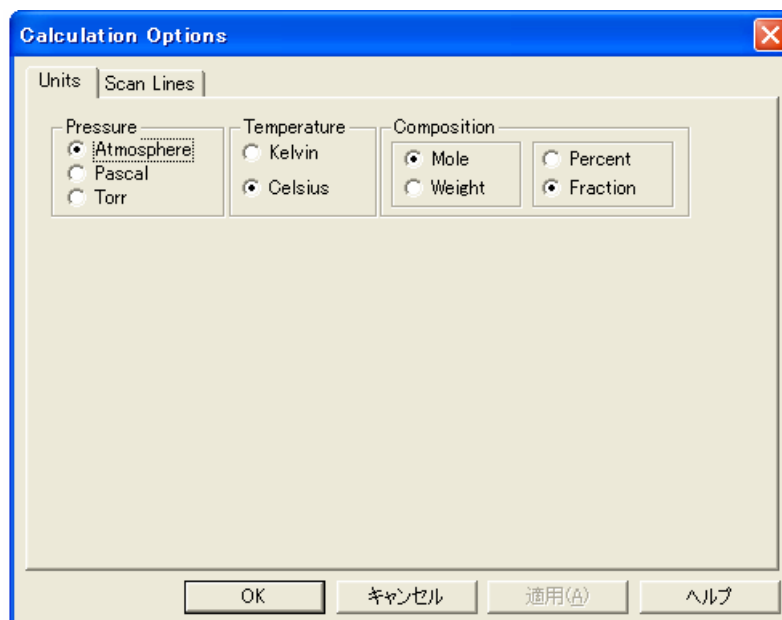
## 単位の設定

メニュー「Calculation」→「Options」を選択します。

Scan Lines と Units の2つの画面が用意されています。



ここでは、22ページで説明した「必ずスキャンして欲しい場所」を手動で指示します。



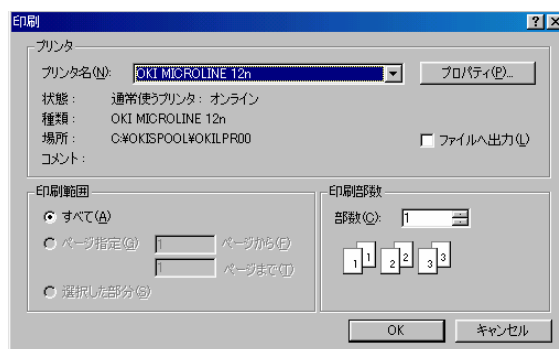
ここでは計算に用いる単位を「圧力」「温度」「組成」に関して指示します。計算結果の図表示に関しは、計算後にその都度、℃か K か、モル組成か重量組成か、表示する軸変数を別途指示できます。

## ファイル操作

save, open を選択すると、計算結果の図を保存、再表示できます。

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図が印刷されます。



Print Preview を選択すると、プレビューが表示されます。

Close ボタンをクリックすると元に戻れます。

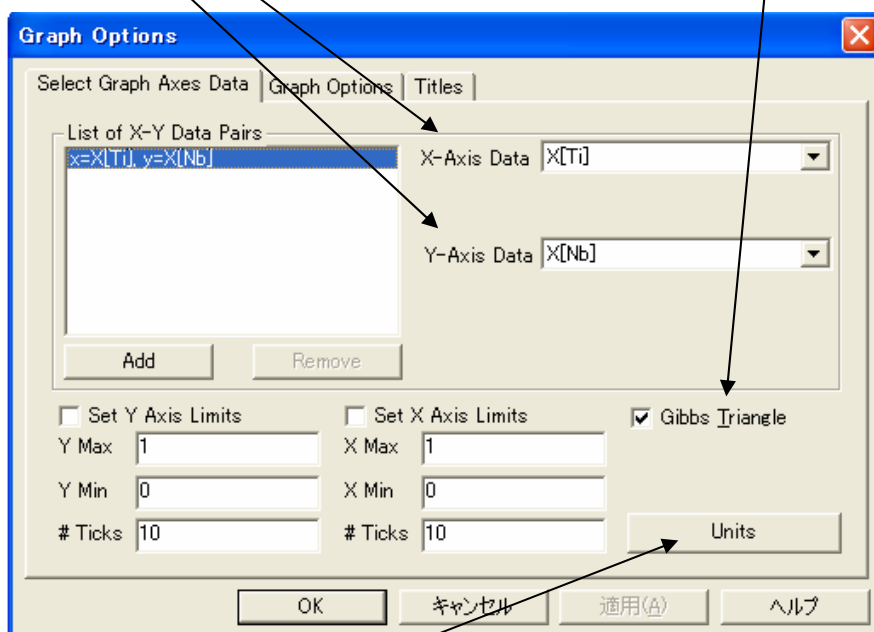
Print Setup を選択すると、「プリンターの設定」画面が表示されます。

## グラフ機能1 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。

1. X軸とY軸の変数を変更する。
2. 軸値の範囲を変更する。
3. 三角状態図表示を指示する。



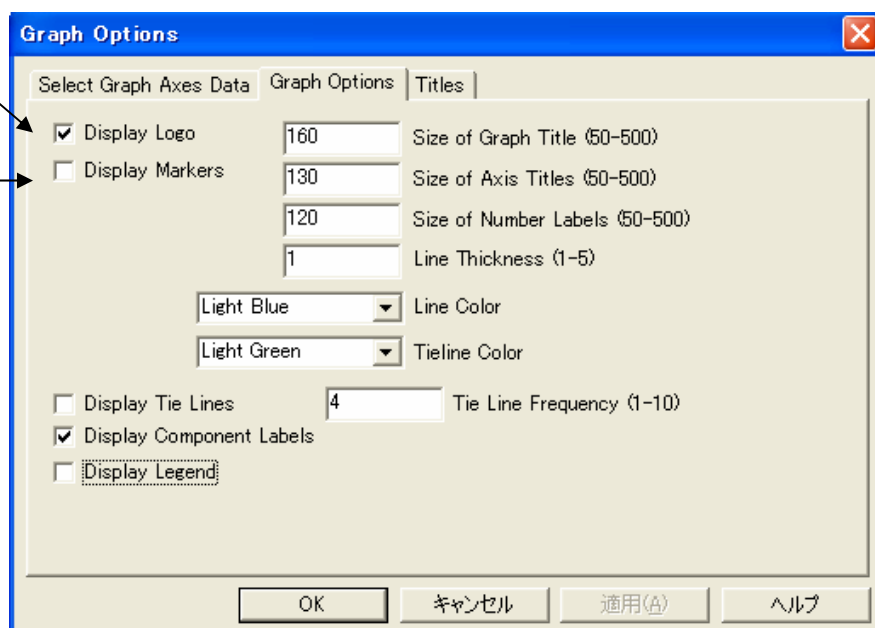
4. 必要な場合は単位を変更できます。

5. ログマークの表示の on/off.

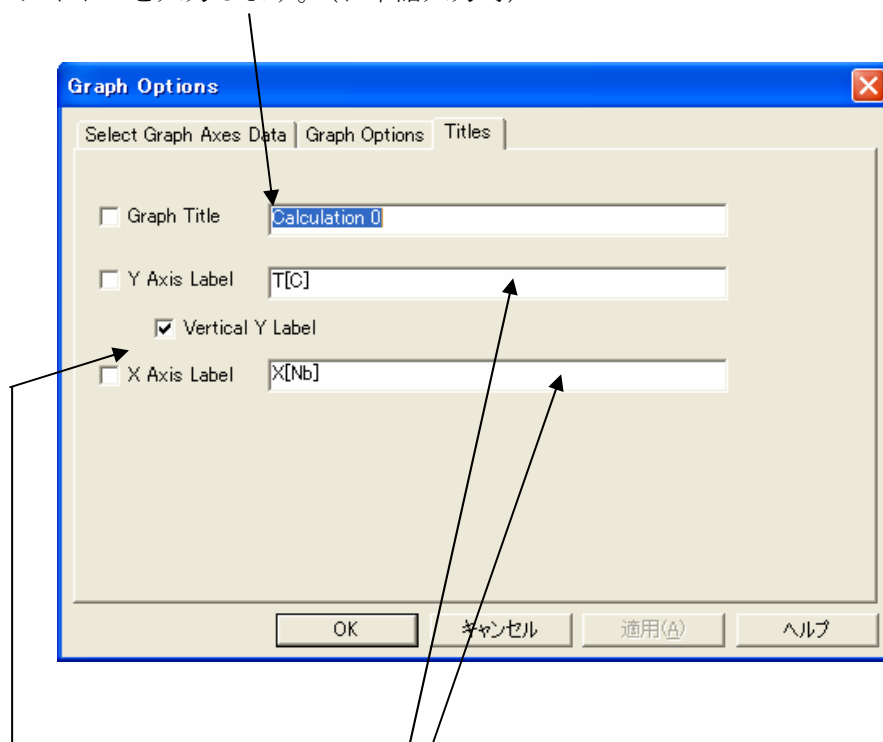
6. 計算点上にシンボルマークを表示させるオプションの on/off

7. グラフタイトルのサイズ  
軸タイトルのサイズ  
軸値のサイズ  
線幅太さ  
を変更する。

8. タイライン (共役線)



9. グラフのタイトルを入力します。(日本語入力可)




Y軸のタイトルを縦書きにしたい場合は、この枠をチェックしておきます。

X軸とY軸のタイトルを変更できます。(日本語入力不可)

## グラフ機能2 ラベルモード

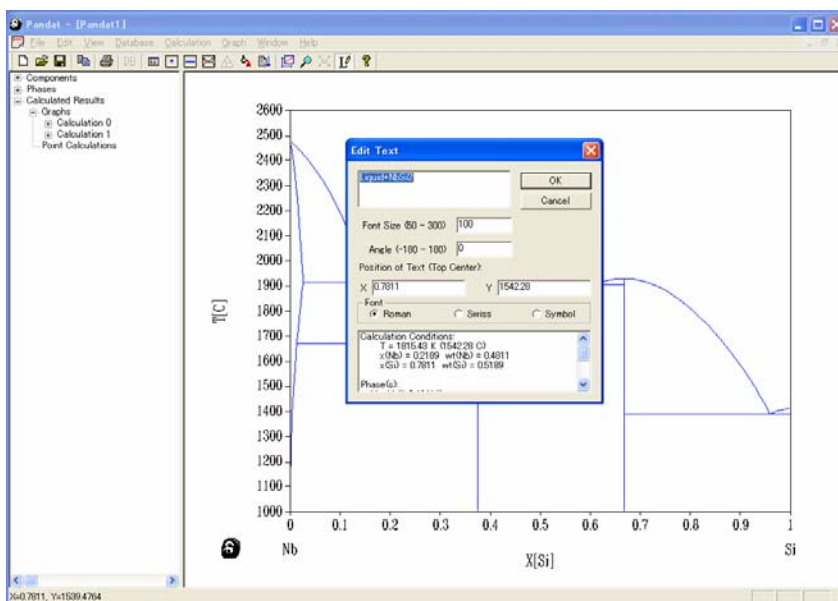


2元系状態図、多元系縦断面図、多元系等温断面図、3元系液相面図、3元系表面張力図、3元系粘性図において領域のラベルを付けることができます。ラベルモードをオンにすると、マウス形状が+印になります。

 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。

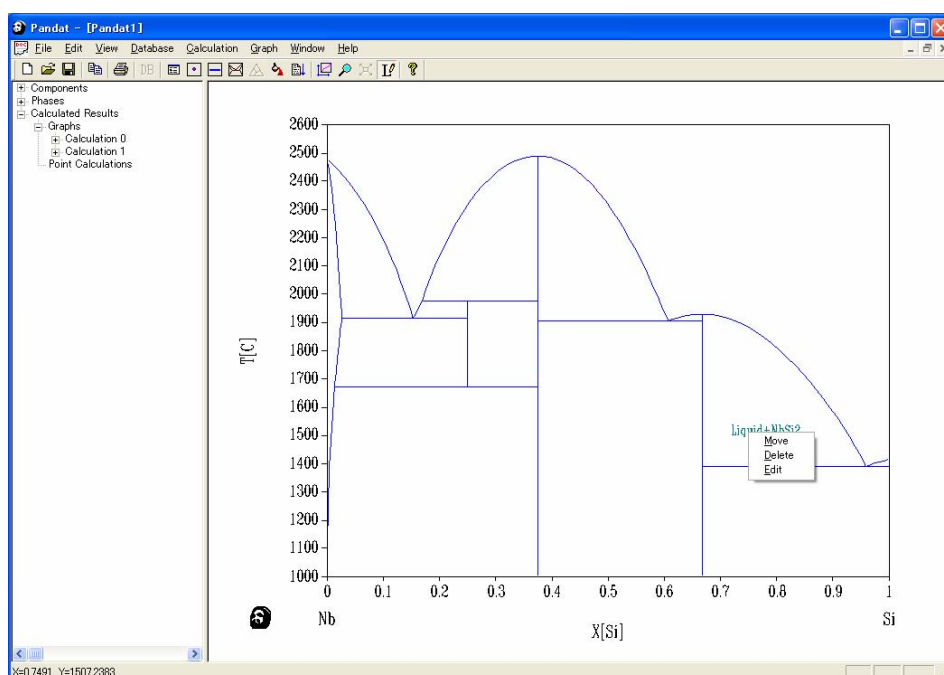
① 知りたい位置においてマウスを一度クリックします。

- ② 平衡計算した後、Edit Text 画面が表示されます。



Edit Text 画面ではラベルの文字、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、画面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、そのラベル上で右クリックします。するとメニューが表示されます。ラベルの移動、削除、変更ができます。



### グラフ機能3 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ではなく、マウス操作で行ないます。拡大表示は四角形状範囲で指定します。拡大表示したい領域の左上を先ずクリックし、クリックしたまま領域の右下までマウスを動かし、マウスボタンを離します。この操作によりズームインします。

Display Full Range (Zoom-out)



を選択することにより、拡大表示から全体表示に戻ります。

## グラフ機能4 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 **BMP** や **WMF** 形式でクリップボードにコピーすることができます。 **BMP** 形式は画面イメージです。  
**Microsoft-Word** に貼り付けるためには、**WMF** 形式をお勧めします。

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。

## データベース

## NbSiTi.tdb ファイルの例

```

$=====
$
ELEMENT /- ELECTRON_GAS          0.0000E+00  0.0000E+00  0.0000E+00!
ELEMENT YA VACUUM                0.0000E+00  0.0000E+00  0.0000E+00!
ELEMENT NB BCC_A2                9.2906E+01  5.2200E+03  3.6270E+01!
ELEMENT SI DIAMOND_A4           2.8085E+01  3.2175E+03  1.8820E+01!
ELEMENT TI HCP_A3                4.7880E+01  4.8100E+03  3.0648E+01!

FUNCTION UN_ASS 298.15 0; 300 N !
FUNCTION GHSENRB 2.98140E+02 -8519.353+142.045475*T-26.4711*T*LN(T)
+2.03475E-04*T**2-3.5012E-07*T**3+93399*T**(-1); 2.75000E+03 Y
-37669.3+271.720843*T-41.77*T*LN(T)+1.528238E+32*T**(-9);
6.00000E+03 N !
FUNCTION GHSERSI 2.98140E+02 -8162.609+137.227259*T-22.8317533*T*LN(T)
-.001912904*T**2-3.552E-09*T**3+176667*T**(-1); 1.68700E+03 Y
-9457.642+167.271767*T-27.196*T*LN(T)-4.20369E+30*T**(-9);
3.80000E+03 N !
FUNCTION GHSERTI 2.98140E+02 -8059.921+133.687208*T-23.9933*T*LN(T)
-.004777975*T**2+1.06716E-07*T**3+72636*T**(-1); 9.00000E+02 Y
-7811.815+133.060068*T-23.9887*T*LN(T)-.0042033*T**2-3.0876E-08*T**3
+42680*T**(-1); 1.15500E+03 Y
+908.837+67.048538*T-14.9466*T*LN(T)-.0081465*T**2+2.02715E-07*T**3
-1477860*T**(-1); 1.94100E+03 Y
-124526.786+638.878871*T-87.2182461*T*LN(T)+.008204849*T**2
-3.04747E-07*T**3+36699805*T**(-1);
4.00000E+03 N !
FUNCTION GSIBCC 2.98150E+02 +47000-22.5*T+GHSERSI#;
6.00000E+03 N !
FUNCTION GHEXTNB 2.98150E+02 -8519.35+142.048*T-26.4711*T*LN(T)
+2.03475E-04*T**2-3.50119E-07*T**3+93398.8*T**(-1);
6.00000E+03 N !

TYPE_DEFINITION % SEQ #!
DEFINE_SYSTEM_DEFAULT SPECIE 2 !
DEFAULT_COMMAND DEF_SYS_ELEMENT YA !

PHASE LIQUID:L % 1 1.0 !
CONSTITUENT LIQUID:L :NB,SI,TI : !

PARAMETER G(LIQUID,NB;0) 2.98140E+02 +29781.555-10.816418*T
-3.06098E-23*T**7+GHSENRB#; 2.75000E+03 Y
+30169.902-10.964695*T-1.528238E+32*T**(-9)+GHSENRB#;
6.00000E+03 N REF: 0 !

```

以下省略

## メニュー一覧

File	Edit	View	Database
New	Undo	Toolbar	Load Database
Close	Cut	Status Bar	
Save	Copy		
Open	Paste		Select Components
Print	Copy WMF Format		
Print Preview			
Print Setup			
Exit			

Calculation
Options
Point (0D)
Line (1D)
Section (2D)
Liquidus
Solidification Simulation
Batch Calculatio

Graph	Window	Help
Configure	New Window	Help Topics
Label Mode	Cascade	About
Zoom Mode	Tile	
Display Full Range	Arrange Icons	
Copy BMP Format	Split	
Copy WMF Format	Window 1,2,...	

## 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。

### **Gibbs Energy Models for a $n$ component system:**

#### **Stoichiometric compound**

The Gibbs energy of a stoichiometric phase is expressed as:

$$G = \sum_{i=1}^n x_i \cdot G_i^{o,\phi} + G_f$$

Where  $x_i$  is the mole fraction of component  $i$ ,  $G_i^{o,\phi}$  is the Gibbs energy of pure component  $i$  with structure  $\phi$ , and  $G_f$  is the Gibbs energy of formation of the stoichiometric phase refer to structure  $\phi$  of each component  $i$ .

#### **Disordered solution phase**

The Gibbs energy of a disordered solution phase is expressed as:

$$G^\phi = \sum_{i=1}^n x_i \cdot G_i^{o,\phi} + RT \sum_{i=1}^n x_i \cdot \ln(x_i) + G^{ex,\phi}$$

Where  $x_i$  is the mole fraction of component  $i$ ,  $G_i^{o,\phi}$  is the Gibbs energy of pure component  $i$  with structure  $\phi$ ,  $R$  is gas constant, and  $T$  is temperature.  $G^{ex,\phi}$  is the excess Gibbs energy of the phase, defined as,

$$G^{ex,\phi} = \sum_{i,j=1(i \neq j)}^n x_i \cdot x_j \cdot \sum_{k=0}^m L_{(i,j)}^k \cdot (x_i - x_j)^k + \sum_{i,j,l=1(i \neq j \neq l)}^n x_i \cdot x_j \cdot x_l \cdot \sum_{k=i,j,l} L_k \cdot V_k$$

Where the first term represent the binary interaction terms, the second represent ternary interactions.  $L_{(i,j)}^k$ 's are binary interaction parameters for  $i$ - $j$  binary.  $L_k$ 's are ternary interaction parameters.  $V_k$  is defined as:

$$V_k = x_k - \frac{1 - \sum_{p=i,j,l} x_p}{n}$$

## Ordered intermetallic phase with compound energy formalism

The Gibbs energy of an ordered intermetallic phase is described as:

$$G = G^{ref} + G^{id} + G^{ex}$$

Where  $G^{ref}$  is expressed in terms of compound energies (which are constant at constant temperature) and their associated sublattice species concentrations,  $y_p^i$ :

$$G^{ref} = \sum y_p^i \cdot y_q^j \cdots y_s^l G_{(p:q:\dots:s)}^o$$

$G^{id}$  is the ideal mixing term, assuming random mixing of species in each sublattice

$$G^{id} = \sum_{i=1}^l f_i \cdot \sum_{p=1}^m y_p^i \cdot \ln(y_p^i)$$

$G^{ex}$  is also expressed as a function of species concentrations with the sublattice L parameters being the numerical coefficients in the contributing terms:

$$G^{ex} = \sum y_p^i \cdot y_q^j \cdot y_r^k L_{(p,q:r)}$$

Where  $L_{(p,q:r)} = \sum_{\nu} L_{(p,q:r)}^{\nu} \cdot (y_p^i - y_q^j)^{\nu}$ .

お問い合わせ先

株式会社 材料設計技術研究所

材料科学研究部

電話 : 03-3660-5080

F A X : 03-3660-5080

電子メール : [info@materials-design.co.jp](mailto:info@materials-design.co.jp)

住所 : 〒103-0011

東京都中央区日本橋大伝馬町 2 - 5

平成 1 6 年 8 月 1 日

Software Version 4-0-M