

# Pandat

状態図計算ソフトウェア

Version 5.0

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	14
計算機能2 ライン計算	16
計算機能3 状態図	19
計算機能4 液相面図	24
計算機能5 凝固計算	26
バッチ機能	28
単位の設定	29
ファイル操作	30
テーブル機能	31
グラフ機能1 グラフオプション	32
グラフ機能2 ラベルモード	35
グラフ機能3 ズームモード	37
グラフ機能4 グラフコピー	38
お勧めの操作方法	39
データベース	50
メニュー一覧	52
平衡計算モデル	53
問合せ先	54

## 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 2000/ 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、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。

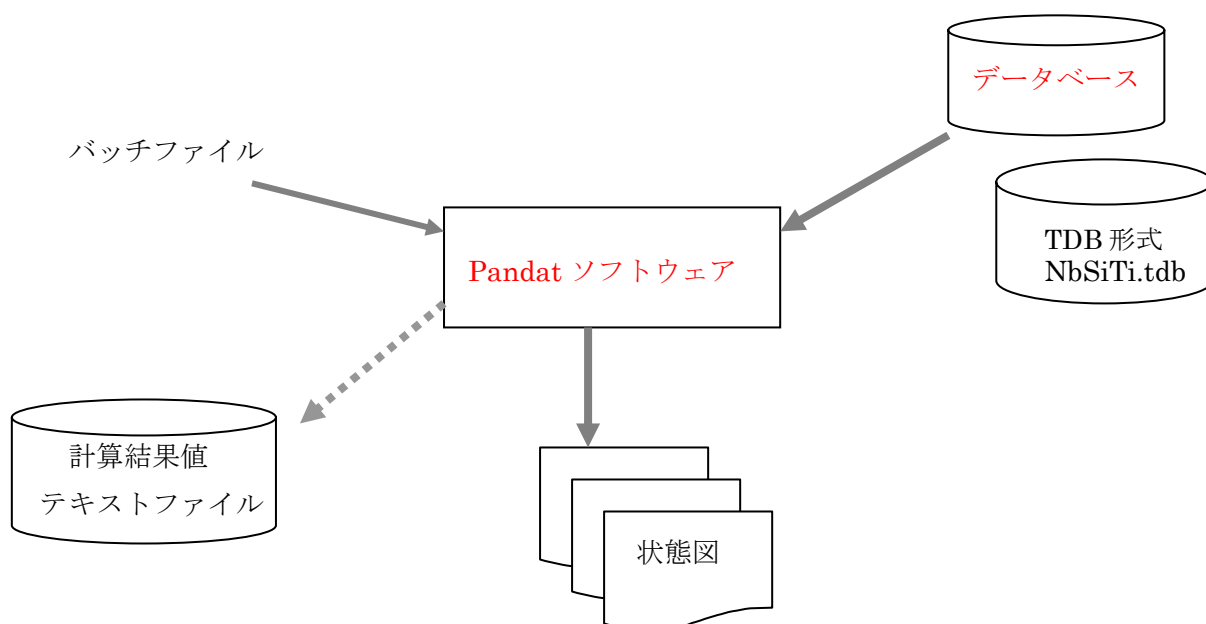
### ・ REFERENCE 句

本ユーザーズガイドの中では、操作説明のために、元素 Nb, Si, Ti を用います。

**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みことが可能です。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。

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。本システムでは、計算結果を画面表示させると同時に、計算結果を常時外部ファイルに書き出します。この数値データ（テキストファイル）は簡単に見ることが出来ます。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。

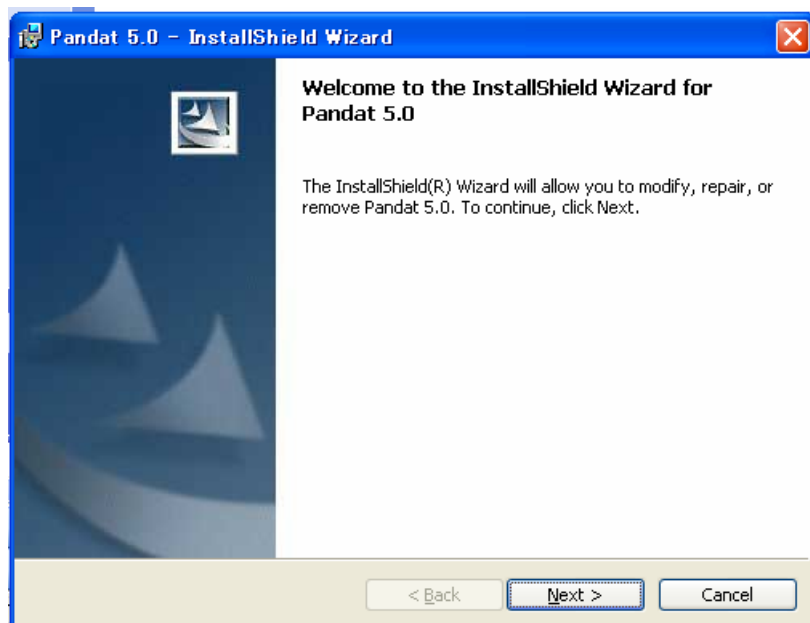


## Pandat 5.0 インストール

古いバージョンの ADAMIS もしくは 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。

1. インストールCDを起動させます。

dongle (プロテクション・キー) は外しておきます。



2. Pandat 5.0 InstallShield Wizard が起動し、Welcome 画面になります。

ボタン

3. License Agreement 画面になります。

ラジオボタンが最初 I do not accept になっています。

承認される場合、I accept を選択してください。

ボタン

4. Readme Information 画面になります。

ボタン

5. Customer Information 画面になります。

ラジオボタンが最初 Anyone になっています。

UserName と Organization を適当に入力します。

ボタン

6. Destination Folder 画面になります。

標準の場所であれば Next ボタンをクリックして

ください。 インストール処理が開始されます。

希望の場所にインストールしたい場合は  ボタンをクリックしてください。

標準

C:\Program Files\CompuThermLLC\Pandat5.0  ボタン

7. インストール処理実行

8. InstallShield Wizard Completed 画面になります。  ボタン

9. ドングルをUSBポートに装着します。

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続行できません。

(ドングルはパラレルポート (プリンターポート) 版も用意しています。)

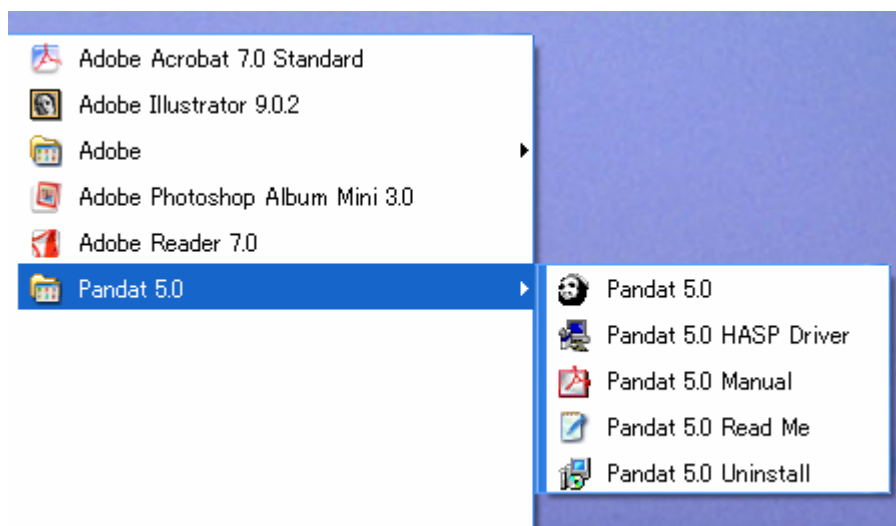
## アンインストール

Pandat 5.0 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 5.0」の「Pandat5.0 Uninstall」を選択します。 計算を一度も実行していない場合、インストール先の

Pandat5.0 フォルダ

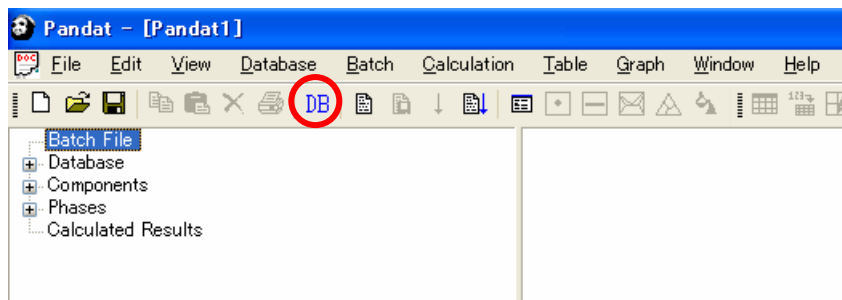
全て削除されます。



## まず使ってみよう

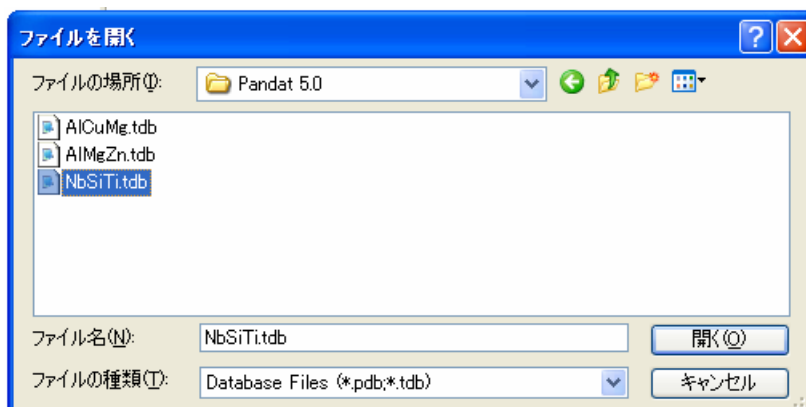
- 1) ソフトウェアを起動しましょう。  
「スタート」→「プログラム」→「Pandat 5.0」→「Pandat 5.0」を選択します。

- 2) DBアイコンを選択します。



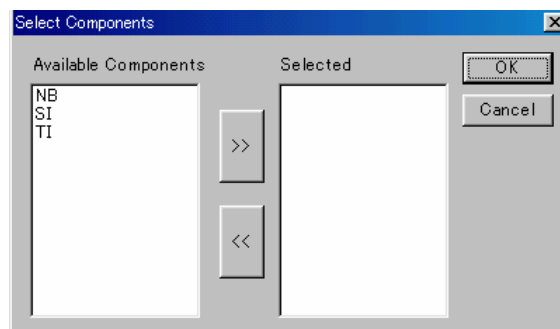
本ユーザーズガイドの中では、操作説明のために、元素 Nb, Si, Ti を用います。  
NbSiTi.tdb ファイルを選択します。

ADAMIS の場合は adamis8.pdb を選択します。





- 3) 元素を選択する画面が表示されます。

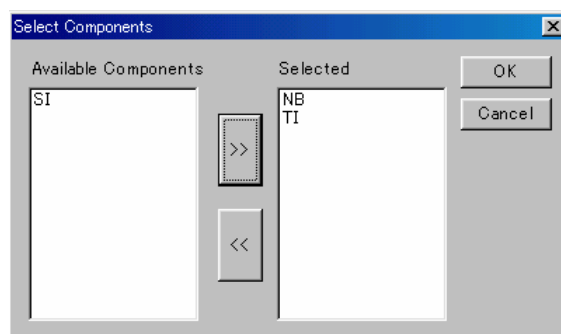
ここで **Cancel** ボタンをクリックすると元素を選択することなく先に進めます。しかし何も計算できません。この場合後で、メニューから「Database」→「Select components」を選択することにより、上記画面を再表示できます。



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。

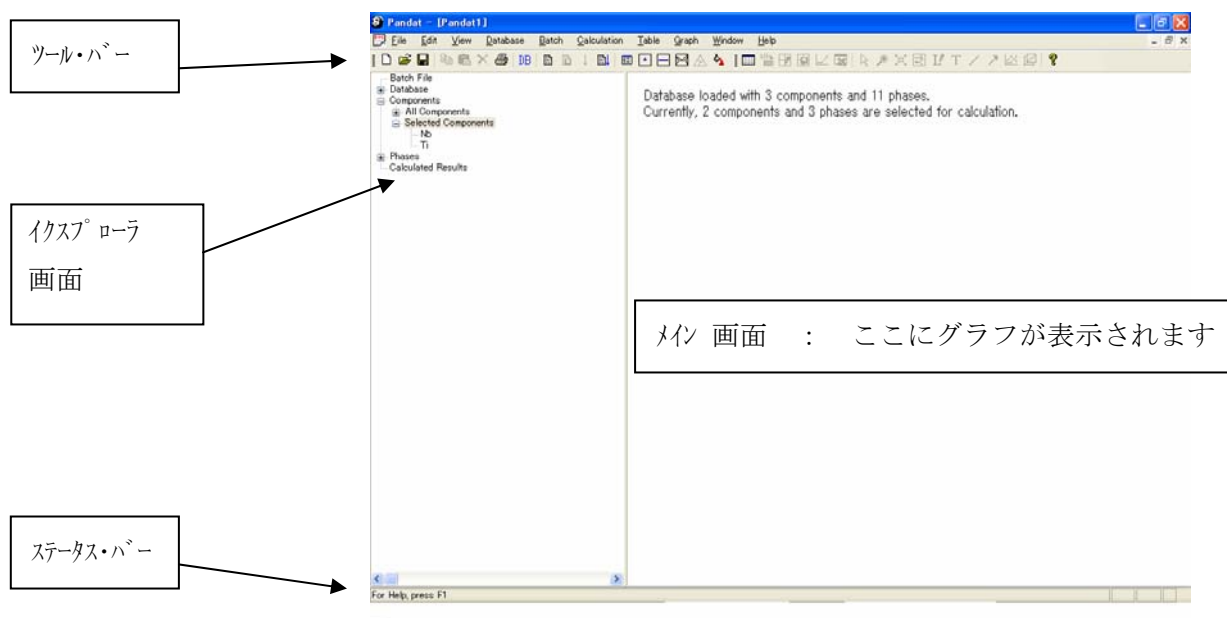
選択を解除するには  ボタンを利用します。

 ボタンをクリックします。



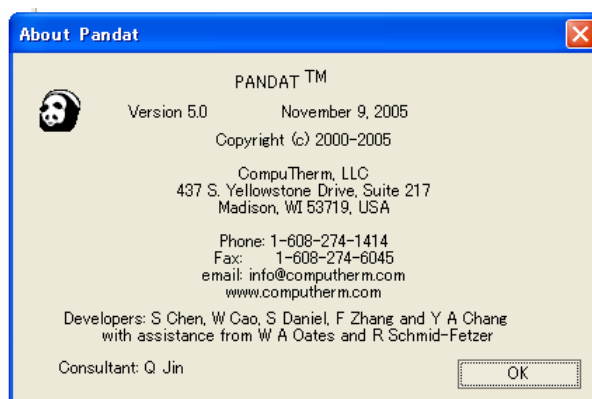
ここではNbとTiの2元素を選択することになります。

#### 4) 起動初画面



#### 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。



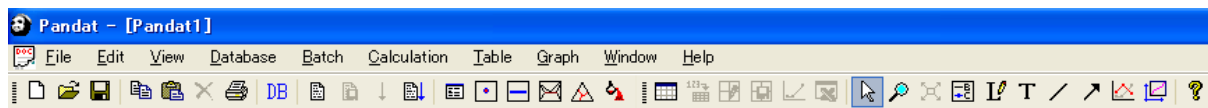
ここでは計算に用いる「圧力」「温度」「組成」単位を設定します。

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。



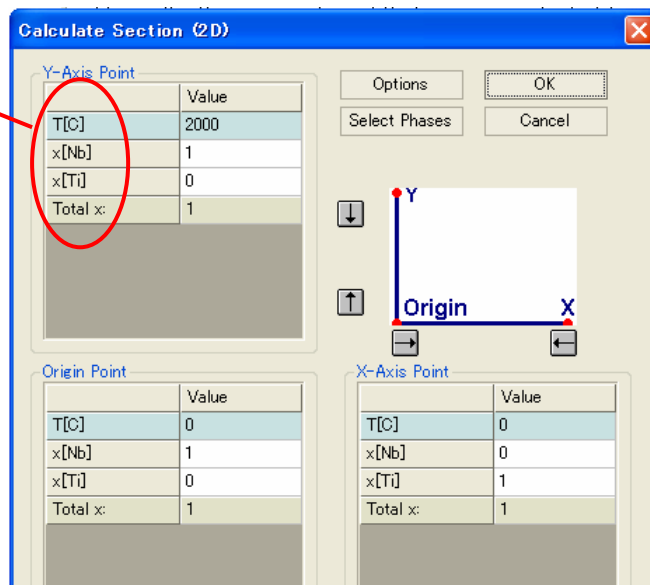
それぞれ

	新規 (作業領域) 作成		テーブルフォーマット
	開く		テーブル読み込み
	保存		テーブル編集
	コピー編集		テーブル保存
	貼り付け		選択した列よりグラフ作成
	印刷		EXCEL ファイル保存
	DB 選択		グラフテキスト・ポインター
	バッチファイル読み込み		ズーム・イン
	バッチファイル実行		ズーム・アウト
	単位設定		凡例
	計算 1点計算		ラベル・モード
	計算 ライン計算		テキスト追加
	計算 2次元状態図		線描画
	多元系縦断面図		矢印描画
	等温断面図計算		プロットセットアップ (変数選択)
	計算 液相面図計算		グラフオプション
	計算 凝固計算		ヘルプ (PDF ファイル表示)

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。

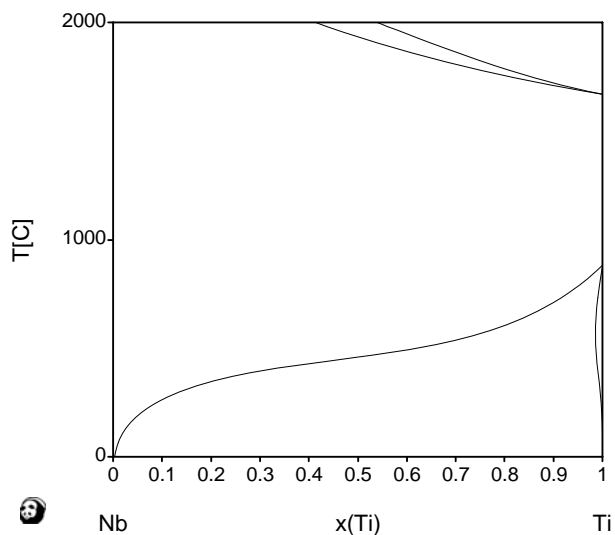
ここでは温度単位が°C、組成濃度単位がモル比率であることに注意します。これは本章6)に起因します。単位を変更すればこの画面の単位表示も自動的に変わります。



- 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。

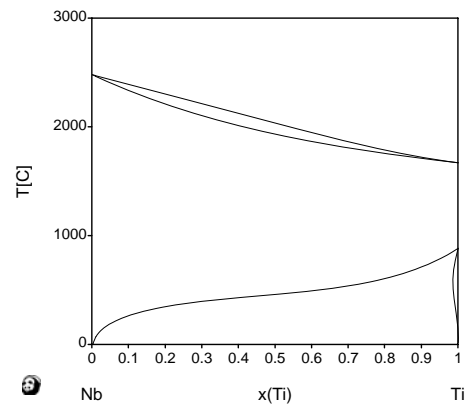
Y軸タイトル : T[C]  
Y軸値範囲 : 0 ~ 2000




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。

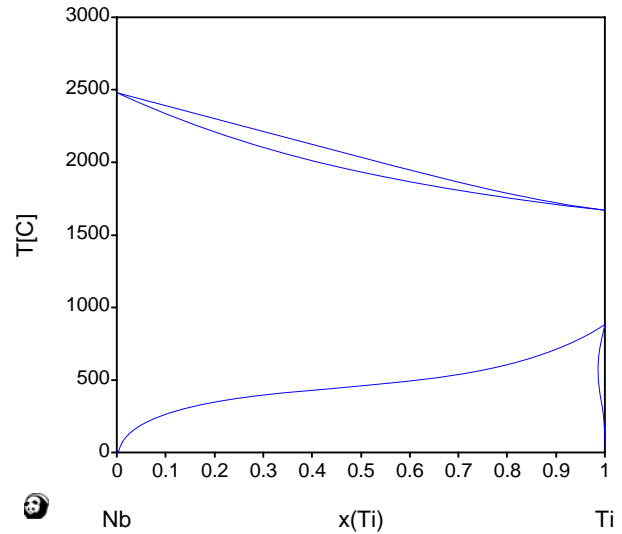



- ④ 表示範囲を変更するには、図上を1度クリック後、アイコン  をクリックします。

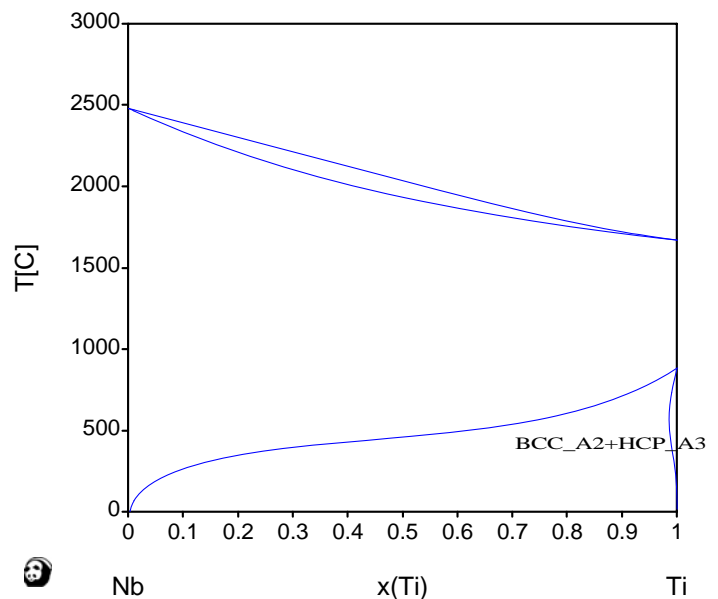
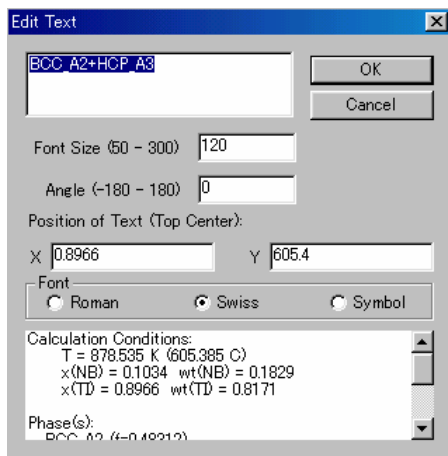
Graph Options 画面が表示されます。この画面には2つのサブ画面があります。


[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  三角図表示の指定。
[Graph Options]	線色の指定。 線幅太さの指定。 タイライン（共役線）の表示指定。

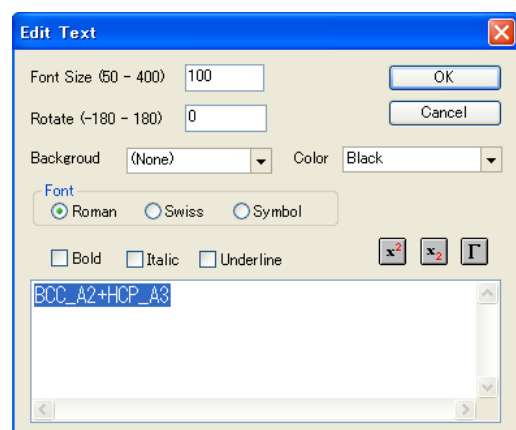
6 に変更 ←



- 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。



表示位置を変更するには、アイコン  を選択し、そしてラベルを選択して移動させます。名前を (たとえば HCP\_A3 を  $\alpha$  に) 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 Word 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、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 `pnd` 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。

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。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
	x(Nb)	wt(Nb)	mu(Nb)	x(Ti)	wt(Ti)	mu(Ti)	T(K)	T(C)		Nb Ti
1										
2										
3										
4										
5										
6	0.99	0.994821	-199335	0.01	0.005179	-307285	2741.14	2467.99	Liquid-BCC(1)-(0)	
7	0.988082	0.993822	-199190	0.011918	0.006178	-303041	2739.44	2466.29	Liquid-BCC(1)-(0)	
8	0.984246	0.991818	-198898	0.015754	0.008182	-296203	2736.04	2462.89	Liquid-BCC(1)-(0)	
9	0.976573	0.987788	-198316	0.023427	0.012212	-286237	2729.24	2456.09	Liquid-BCC(1)-(0)	
10	0.961229	0.979636	-197153	0.038771	0.020364	-272981	2715.65	2442.5	Liquid-BCC(1)-(0)	
11	0.945884	0.97136	-195994	0.054116	0.02864	-263669	2702.05	2428.9	Liquid-BCC(1)-(0)	
12	0.93054	0.962956	-194839	0.06946	0.037044	-256307	2688.45	2415.3	Liquid-BCC(1)-(0)	
13	0.915196	0.954422	-193686	0.084804	0.045578	-250115	2674.85	2401.7	Liquid-BCC(1)-(0)	
14	0.899852	0.945755	-192538	0.100148	0.054245	-244707	2661.24	2388.09	Liquid-BCC(1)-(0)	
15	0.884508	0.936951	-191393	0.115492	0.063049	-239861	2647.63	2374.48	Liquid-BCC(1)-(0)	
16	0.869165	0.928008	-190252	0.130835	0.071992	-235438	2634.02	2360.87	Liquid-BCC(1)-(0)	
17	0.853822	0.918922	-189114	0.146178	0.081078	-231347	2620.41	2347.26	Liquid-BCC(1)-(0)	
18	0.83848	0.90969	-187981	0.16152	0.09031	-227523	2606.79	2333.64	Liquid-BCC(1)-(0)	
19	0.823138	0.900307	-186852	0.176862	0.099693	-223917	2593.16	2320.01	Liquid-BCC(1)-(0)	

## 計算機能 1 1点計算

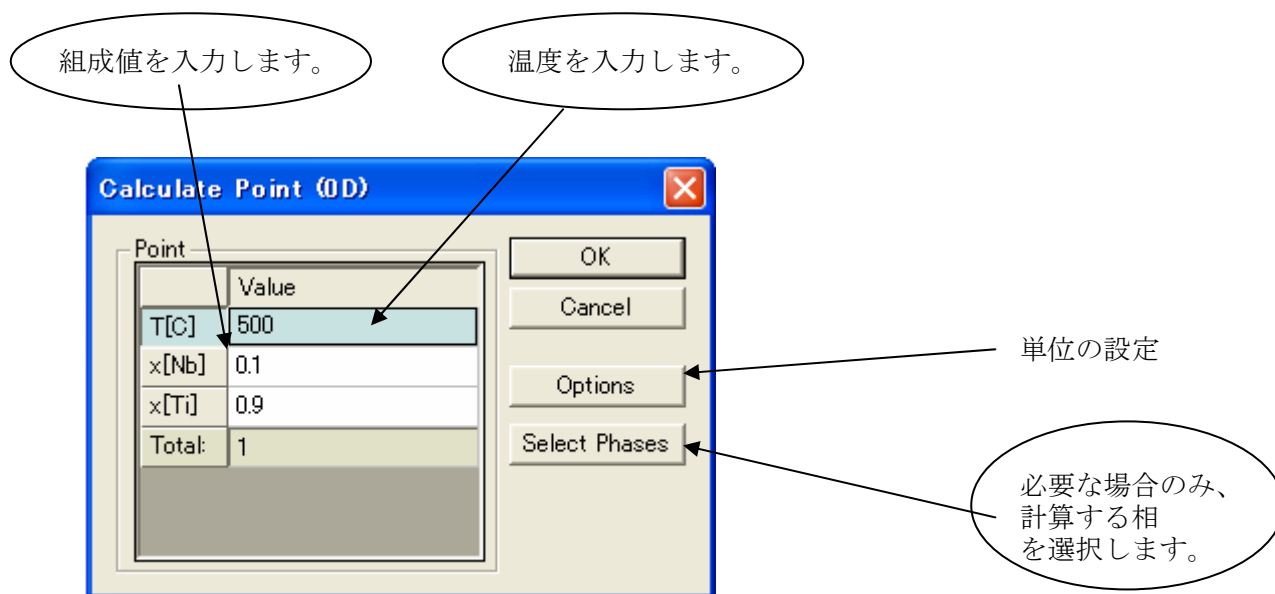


指定条件下における平衡計算を実行します。通常、温度と組成値を指定します。

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。

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

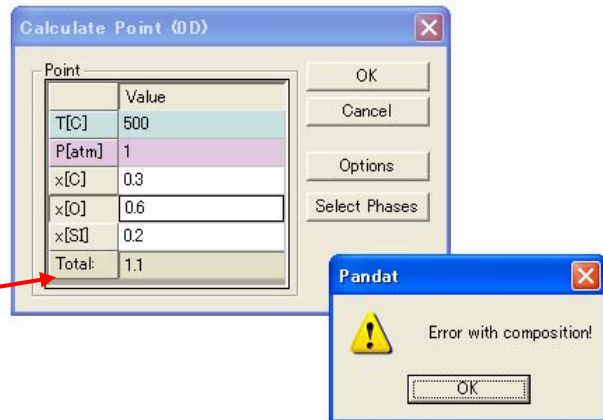
Cp = 30.7046

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。

## 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。

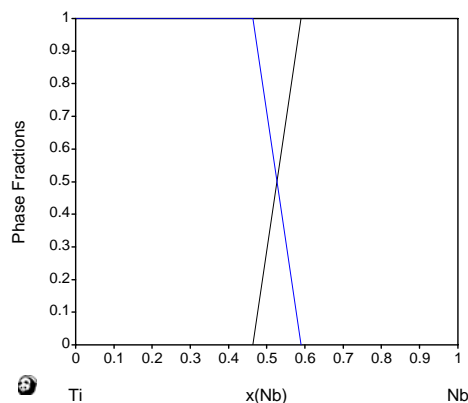
計算回数を指示します。  
Ti 組成値を 1%刻みで  
100 回計算します

必要な場合のみ、  
計算する相を選択します。

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



計算結果表示例

この部分を  
クリックし  
ます

T [C]	x(Nb)	x(Ti)	G [J]	phaseName	f(BCC_A2)	f(Liquid)
2000.00	0.630000	0.370000	-163208.96	BCC_A2	1.000000	
2000.00	0.620000	0.380000	-163259.21	BCC_A2	1.000000	
2000.00	0.610000	0.390000	-163303.20	BCC_A2	1.000000	
2000.00	0.600000	0.400000	-163341.04	BCC_A2	1.000000	
2000.00	0.590000	0.410000	-163372.78	BCC_A2	1.000000	
2000.00	0.588895	0.411105	-163375.91	BCC_A2+Liquid	1.000000	0.000000
2000.00	0.580000	0.420000	-163400.86	BCC_A2+Liquid	0.929342	0.070658
2000.00	0.570000	0.430000	-163428.90	BCC_A2+Liquid	0.849906	0.150094
2000.00	0.560000	0.440000	-163456.95	BCC_A2+Liquid	0.770469	0.229531
2000.00	0.550000	0.450000	-163484.99	BCC_A2+Liquid	0.691032	0.308968
2000.00	0.540000	0.460000	-163513.04	BCC_A2+Liquid	0.611596	0.388404
2000.00	0.530000	0.470000	-163541.08	BCC_A2+Liquid	0.532159	0.467841
2000.00	0.520000	0.480000	-163569.13	BCC_A2+Liquid	0.452722	0.547278
2000.00	0.510000	0.490000	-163597.17	BCC_A2+Liquid	0.373286	0.626714
2000.00	0.500000	0.500000	-163625.22	BCC_A2+Liquid	0.293849	0.706151
2000.00	0.490000	0.510000	-163653.26	BCC_A2+Liquid	0.214412	0.785588
2000.00	0.480000	0.520000	-163681.31	BCC_A2+Liquid	0.134976	0.865024
2000.00	0.470000	0.530000	-163709.35	BCC_A2+Liquid	0.055539	0.944461
2000.00	0.463008	0.536992	-163728.96	BCC_A2+Liquid	0.000000	1.000000
2000.00	0.460000	0.540000	-163737.08	Liquid		1.000000
2000.00	0.450000	0.550000	-163759.51	Liquid		1.000000
2000.00	0.440000	0.560000	-163774.90	Liquid		1.000000

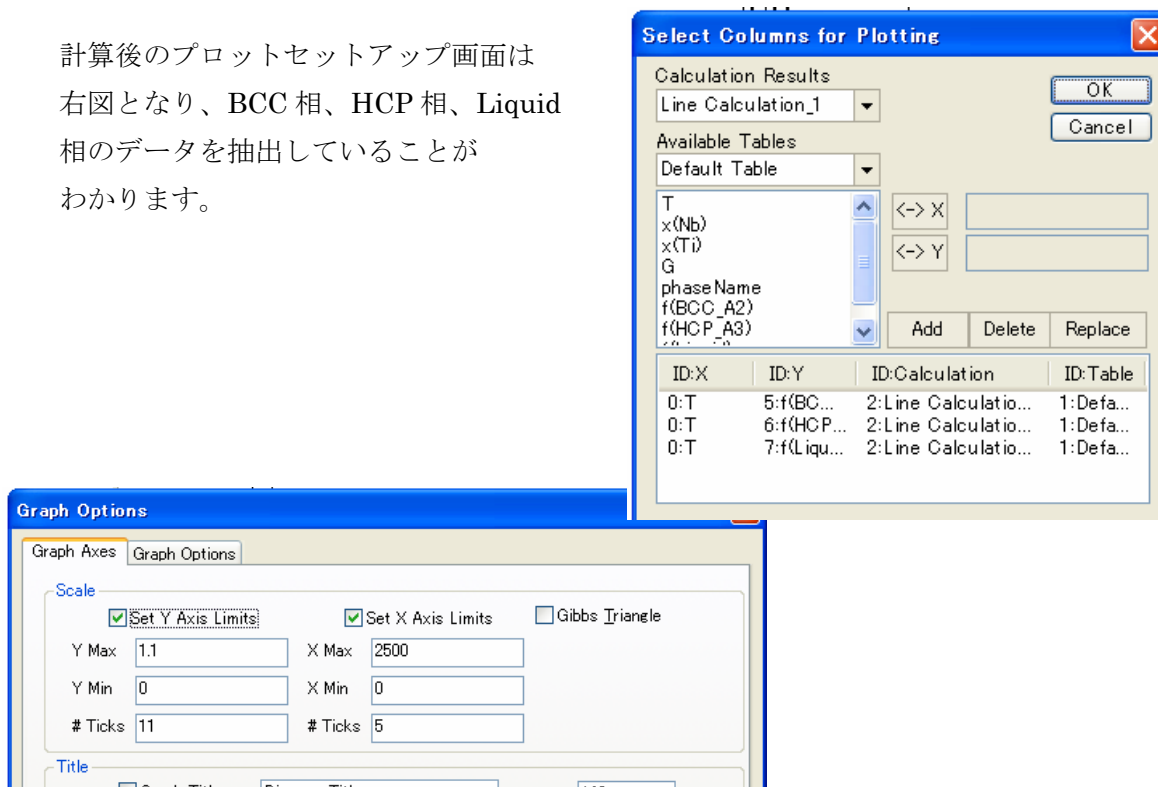
相境界点も計算し  
表示します。

line.dat  
ファイルの内容

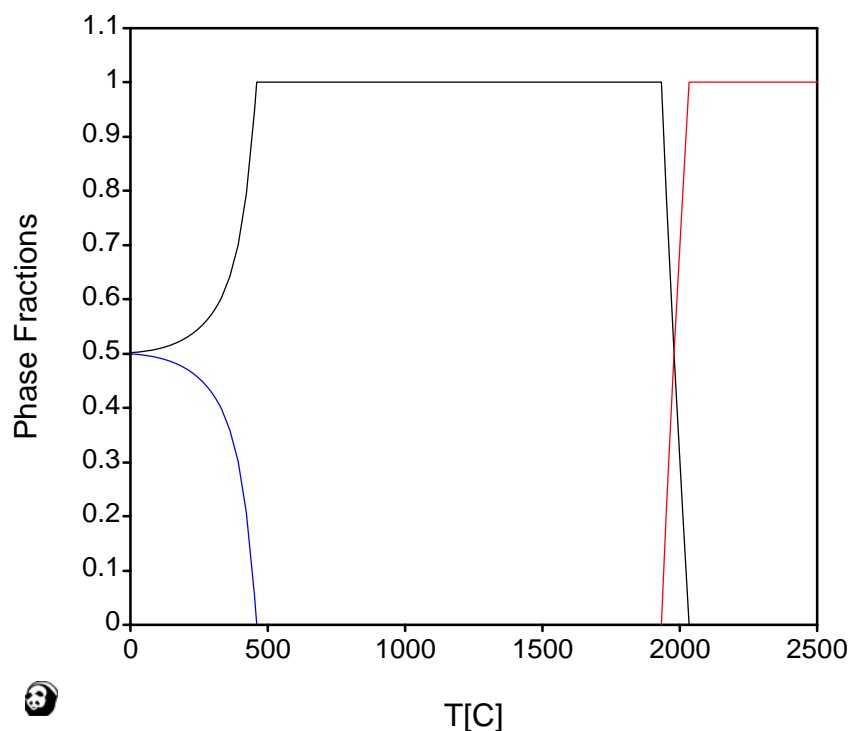
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1	x(Nb)	wt(Nb)	mu(Nb)	x(Ti)	wt(Ti)	mu(Ti)	G(total)	T(K)	T(C)		Line Calculation			
2														
35	0.68	0.804815	-160097	0.32	0.195185	-168734	-162861	2273.15	2000		BCC_A2(1)			
36	0.67	0.797554	-160319	0.33	0.202446	-168272	-162944	2273.15	2000		BCC_A2(1)			
37	0.66	0.790209	-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	0.7752167	-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)			

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

計算後のプロットセットアップ画面は右図となり、BCC相、HCP相、Liquid相のデータを抽出していることがわかります。



Y軸の表示範囲は 0～1.1 とし、X軸の表示範囲は 0～2500℃とします。赤線が液相、黒線が BCC 相、青線が 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。

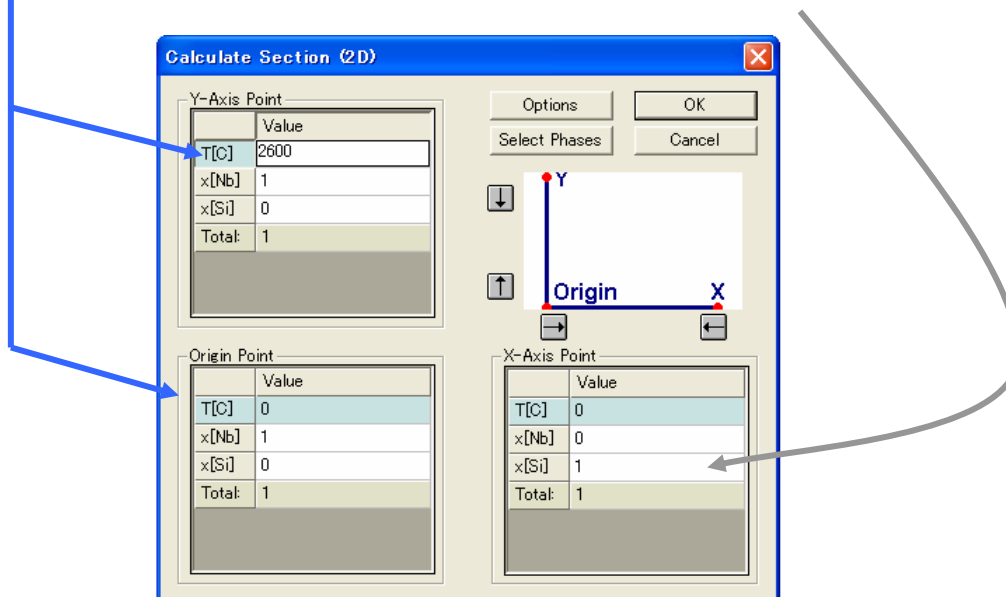
3点 (Y点、O点 (Origin)、X点) の条件値を考えます。

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、

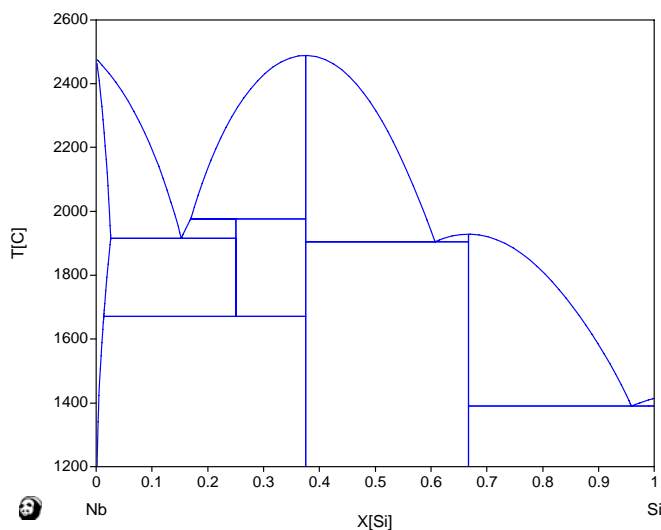
O点では Si がゼロで Nb が 100at% の断面とします。

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

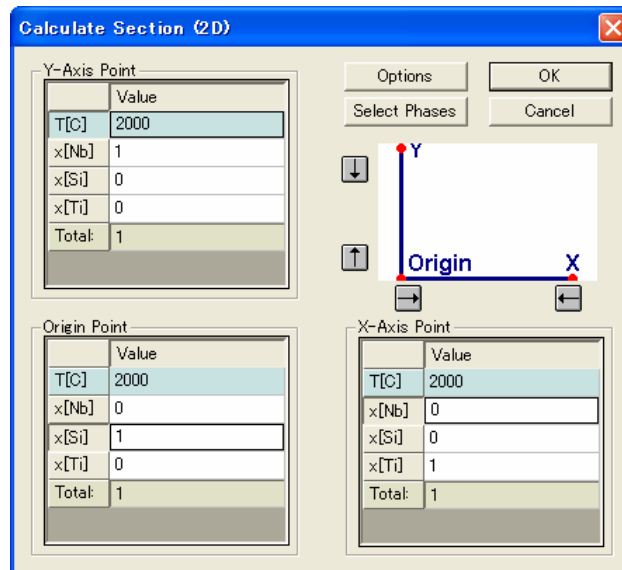


## 等温断面図の計算指示

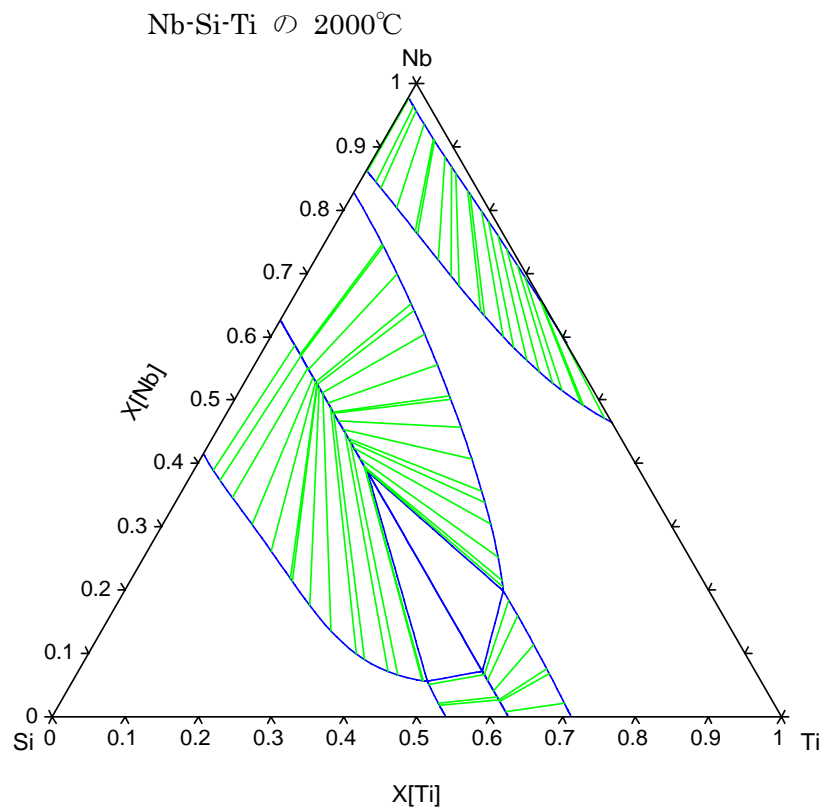
温度を3箇所（Y点、O点、X点）とも同じにします。

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。

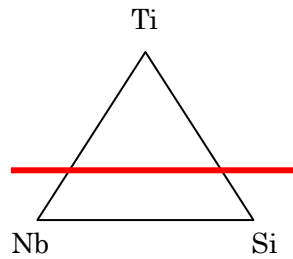
多元系の場合は、組成を固定する元素の組成値を3箇所とも同じにします。（例えば a ）  
3角コーナーの組成値をそれぞれ（1 - a）にします。



## 計算結果例



多元系の場合も同じ指示画面を uses。



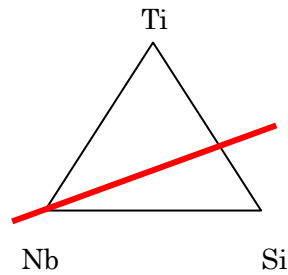
Ti の組成を固定した縦断面を計算する。

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

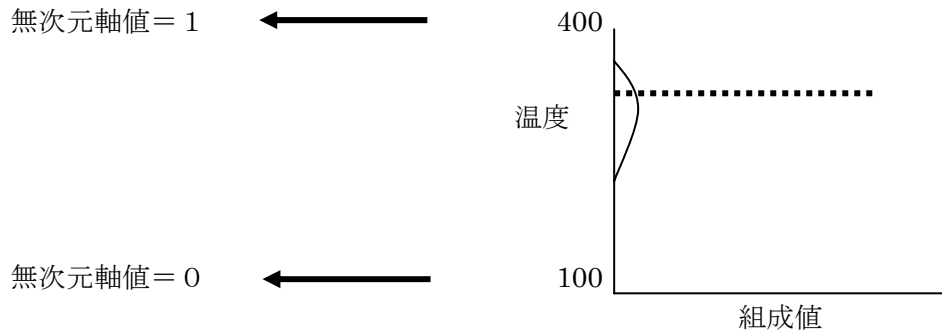
Origin Point	
	Value
T[C]	0
x[Nb]	1
x[Si]	0
x[Ti]	0
Total:	1

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



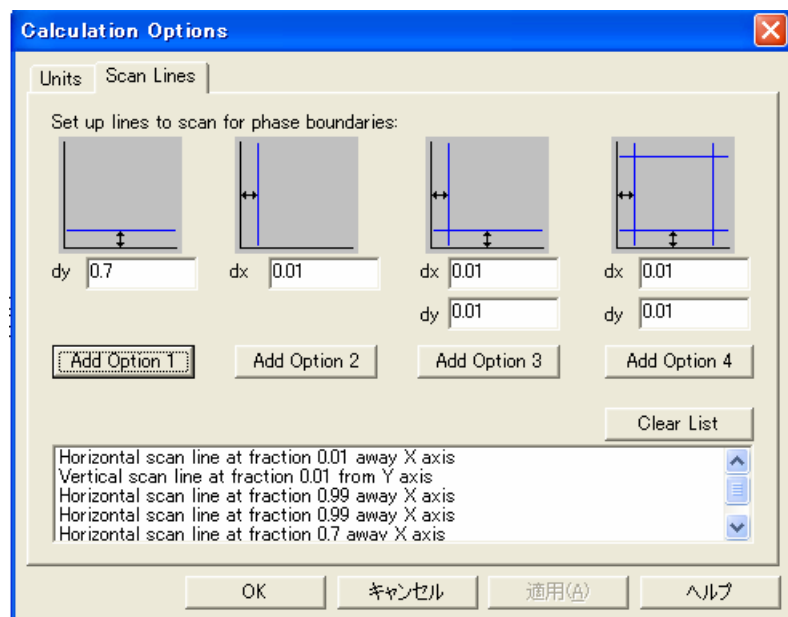
**Scan Lines** の利用

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。

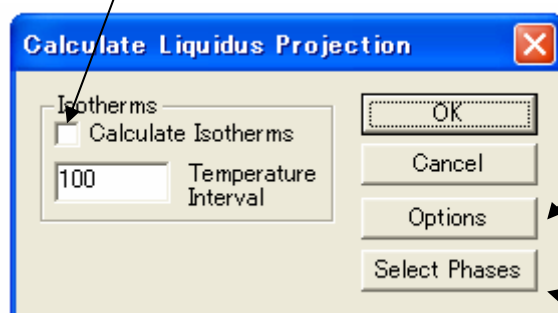
計算結果が画面に表示されます。

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。

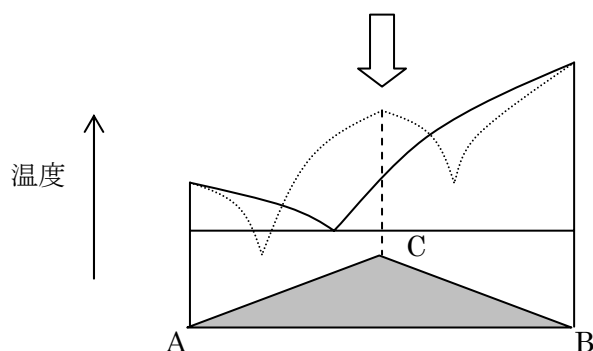
等温度の補助線が必要な場合チェックします。



必要な場合のみ、計算する相を選択します。

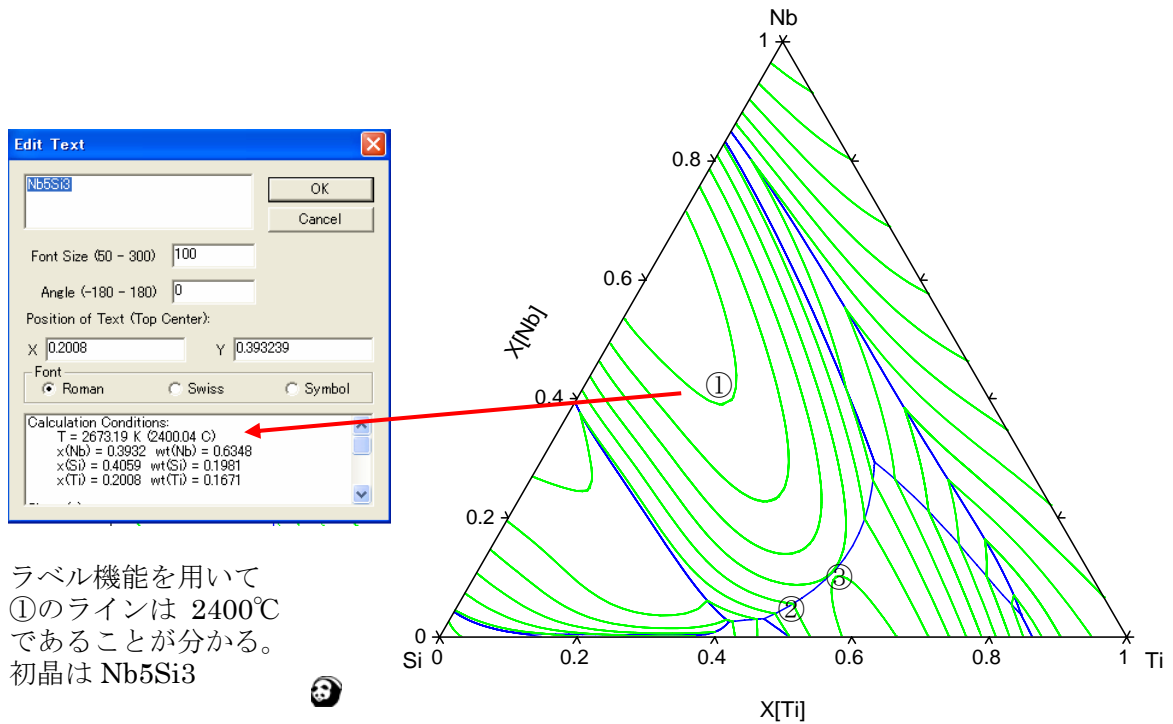
液相面図とは、

上部からの投射 = 液相面図

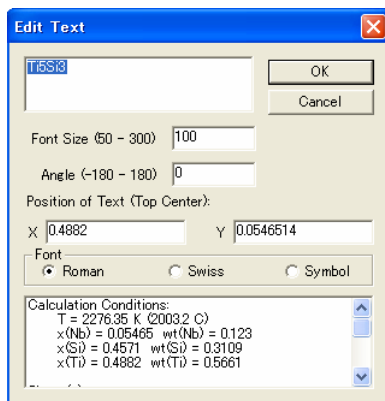


計算結果例

Nb-Si-Ti の液相面図

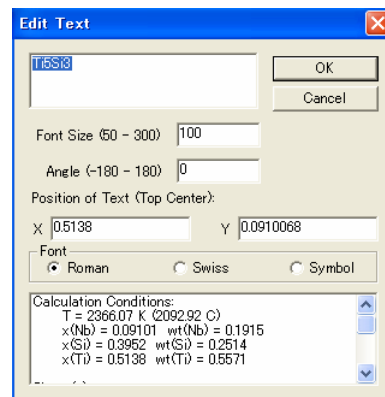


谷がどちらに傾斜しているのか図から判断できないので、  
ラベル機能を用いて温度を2点以上調べます。  
②の点では



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

③の点では



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。

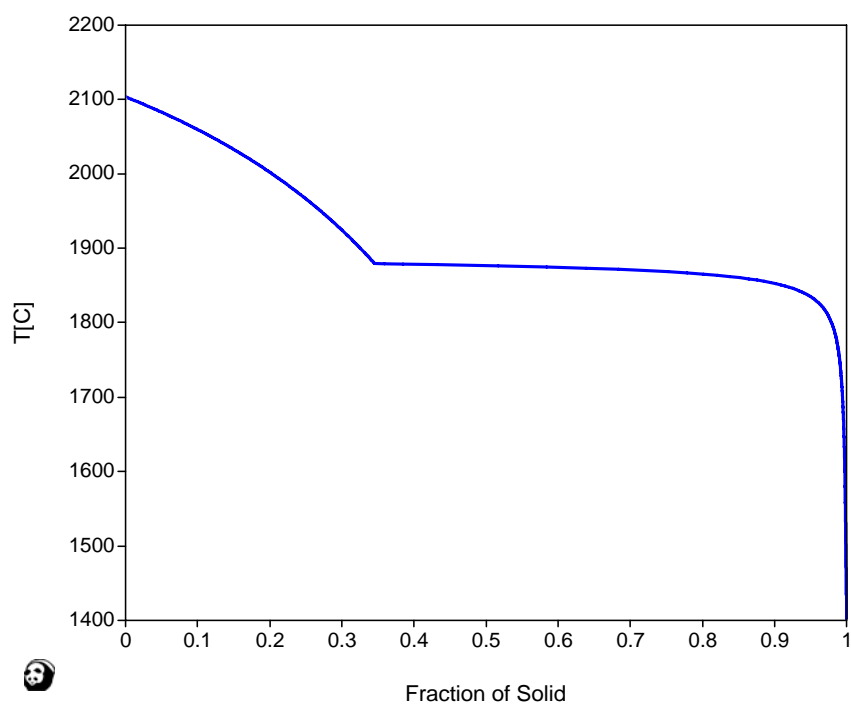
かつ、solidification.dat ファイルを自動作成し、この外部ファイルにも計算結果を書き出します。

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。

画面以上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(K)	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	0.739568
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		49223.7	-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	0.726947
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		44368.8	-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	-32627.7	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	f(Liquid)	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			

バッチ機能を利用することで次のような数値を出力できます。

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

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	
1	T(K)	T(C)	fs	Hm	f(Liquid)	x(Nb@Liquid)	x(Si@Liquid)	x(Ti@Liquid)	f(BCC_A2)	x(Nb@BCC)	x(Si@BCC)	x(Ti@BCC)	f(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			

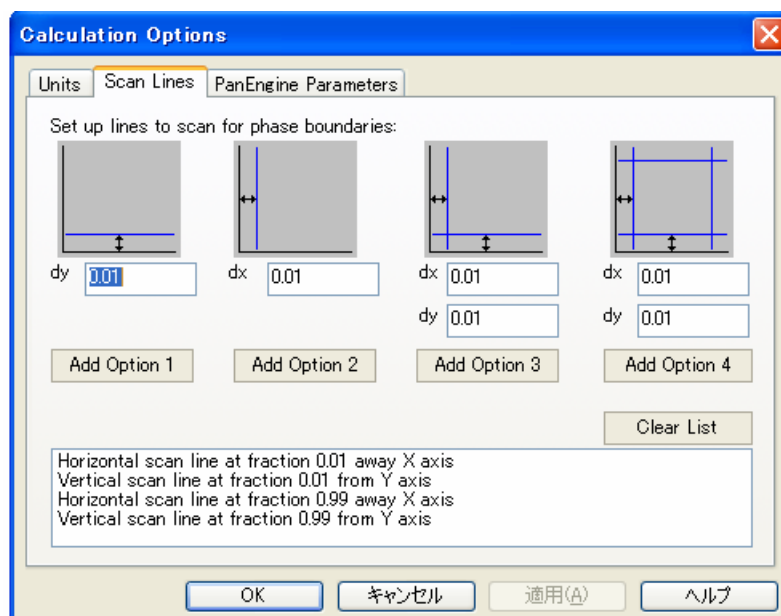
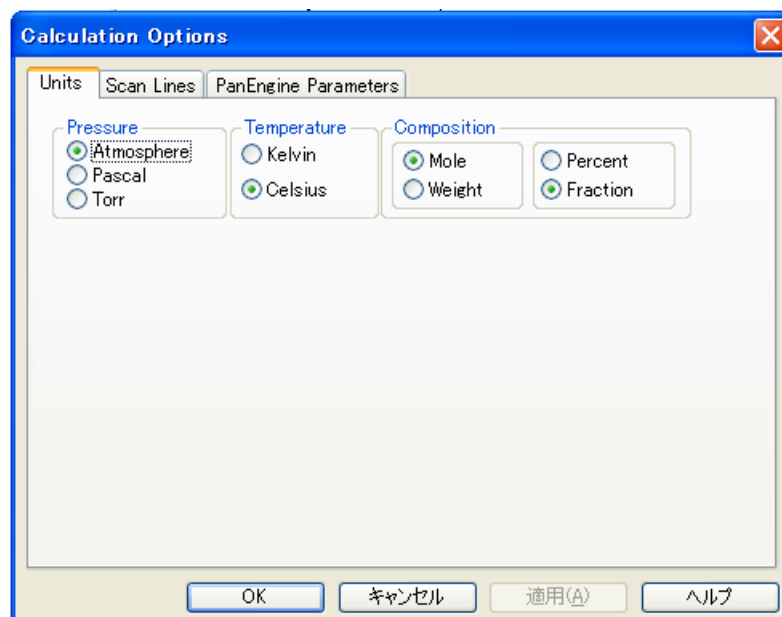
## バッチ機能

和文 バッチ機能の説明 をご参照ください。(次ページ添付)

## 単位の設定

メニュー「Calculation」→「Options」を選択します。

ここでは計算に用いる単位を「圧力」「温度」「組成」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、°CかKか、モル組成か重量組成か、別途指示できます。



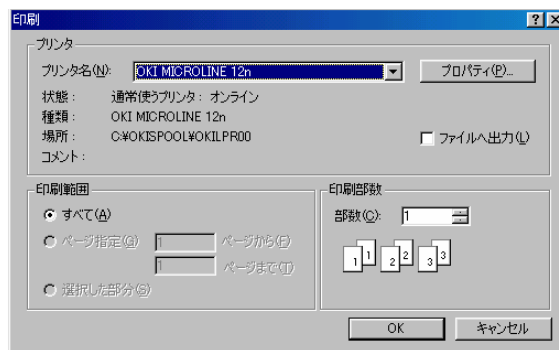
この画面では、23ページで説明した「必ずスキャンして欲しい場所」を手動で指示できます。

## ファイル操作

Pandat ではメニュー「 New 」, 「 Close 」, 「 Save 」, 「 Open 」を使用できます。

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。

## テーブル機能

和文 テーブル機能の説明 をご参照ください。(次ページ添付)

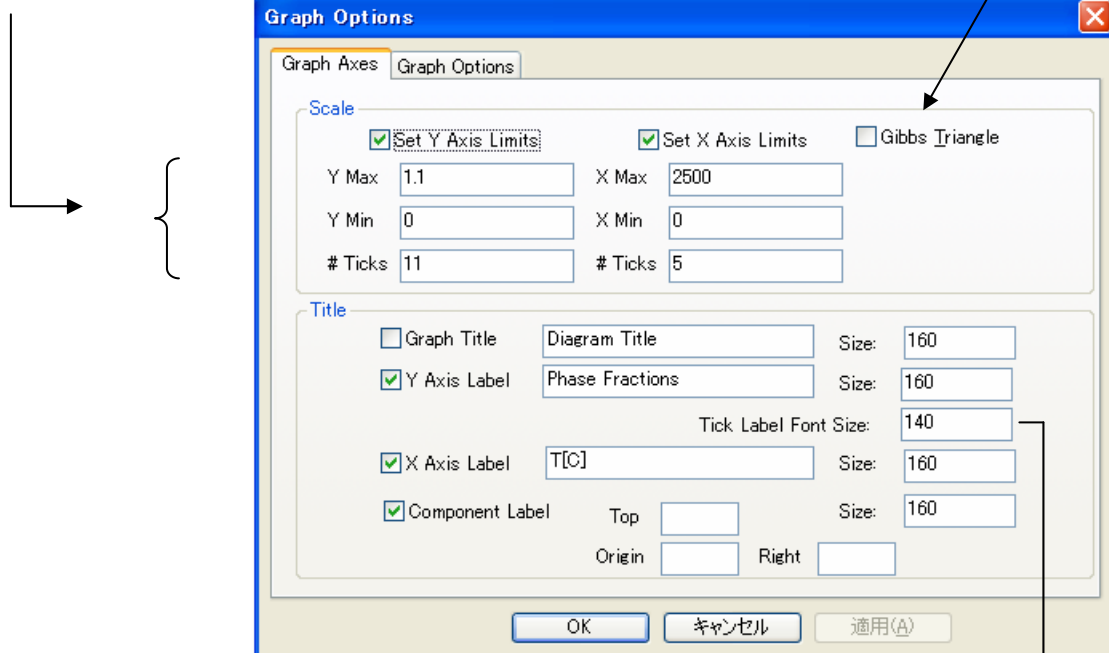
## グラフ機能1 グラフオプション



計算結果の図をカスタマイズできます。

1. 軸値の範囲を変更する。

2. 三角状態図表示を指示する。



3. グラフのタイトルを入力できます。(日本語入力可)

タイトルのサイズ

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

5. 軸値のサイズを変更できます。

Graph Options

Graph Axes Graph Options

Plot Details

X	Y	Calculation	Table
T	f(BCC_...	Line Calculation_1	Defaul..
T	f(HCP_...	Line Calculation_1	Defaul..
T	f(Liquid)	Line Calculation_1	Defaul..

Line

Solid Line Style

Black Line Color

1 Line Width

Symbol

▲ Symbol Type

Black Symbol Color

5 Symbol Size

Plot Style

Line  Symbol  Line + Symbol

Tie or Isotherm Lines

Display Tie/Isotherm Lines Tie/Isotherm Line Style Solid

Tie Line Frequency (1-10) 4 Tie/Isotherm Line Color Light Green

OK キャンセル 適用(A)

それぞれの線の色、線幅を変更  
できます。  
計算点上にシンボルマークを  
表示できます。

タイライン（共役線）の表示

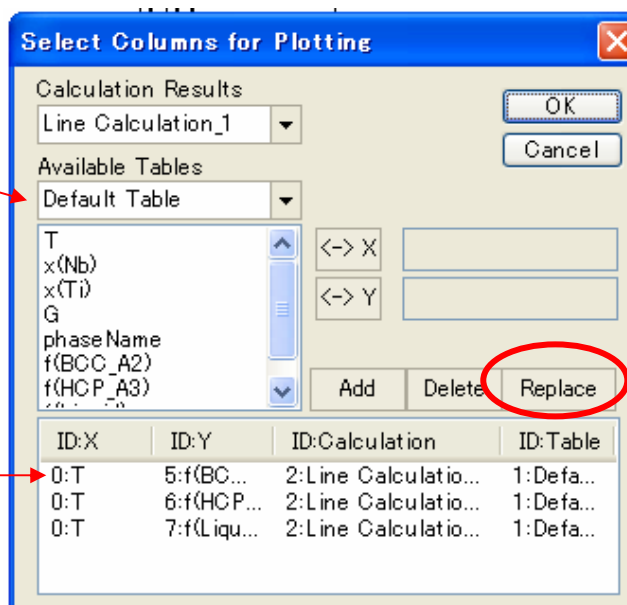
## プロットセットアップ画面

X軸とY軸の変数を変更できます。

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

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

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




表示したい変数がテーブルに存在しない場合、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。操作例は44ページを参照ください。

## グラフ機能2 ラベルモード

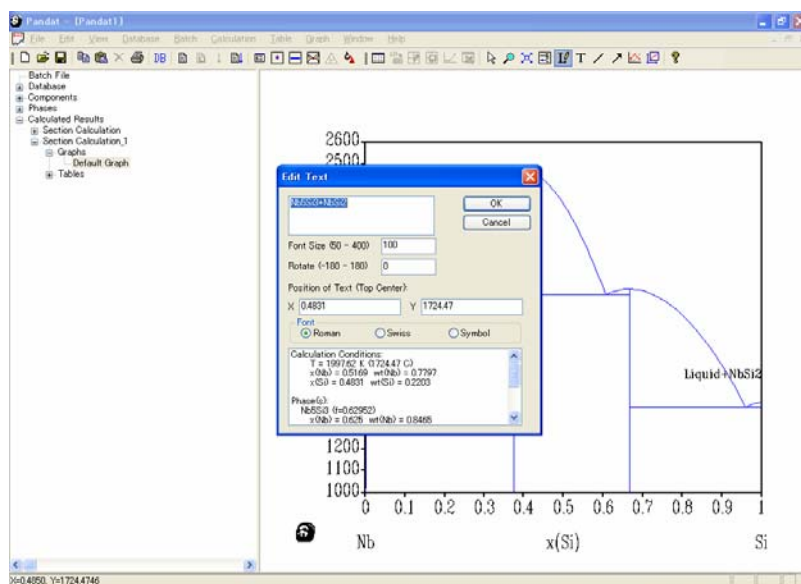


2元系状態図、多元系縦断面図、多元系等温断面図、3元系液相面図、3元系表面張力図、3元系粘性図において領域のラベルを付けることができます。ラベルモードをオンにすると、マウス形状が+印になります。

 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。

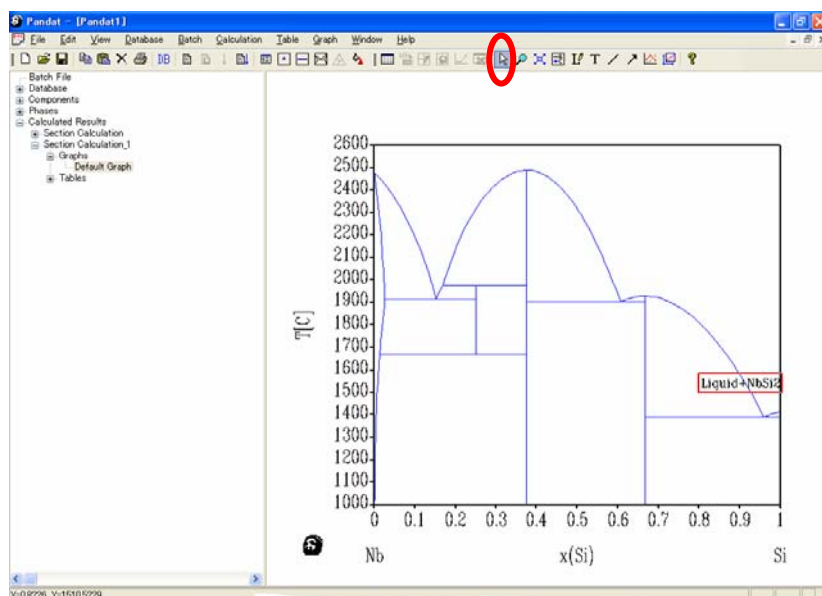
- ② 平衡計算した後、Edit Text 画面が表示されます。



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、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。



### 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：

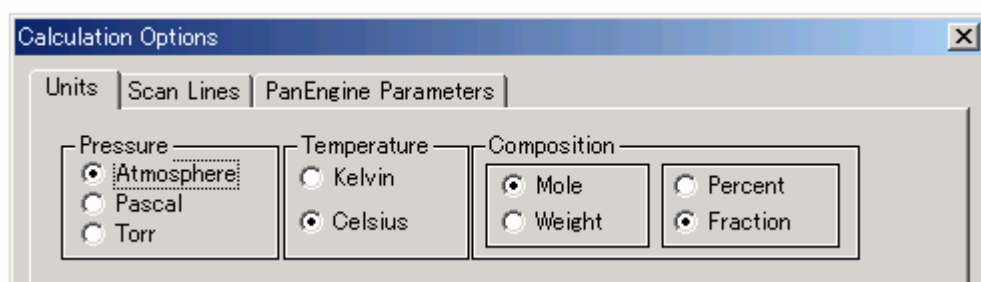
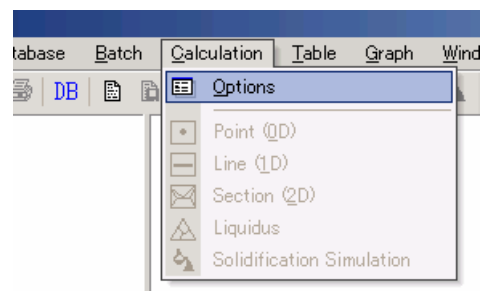
**Windows** のポストスクリプト・プリンター・ドライバーを経由させ、印刷イメージをファイルに保存します。「**File**」→「**Print**」→ ポストスクリプト・プリンターを選択し、「ファイルへ出力」をチェックします→「**OK**」を選択します。ファイル名を指定し、ポストスクリプトファイルを作成します。

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。

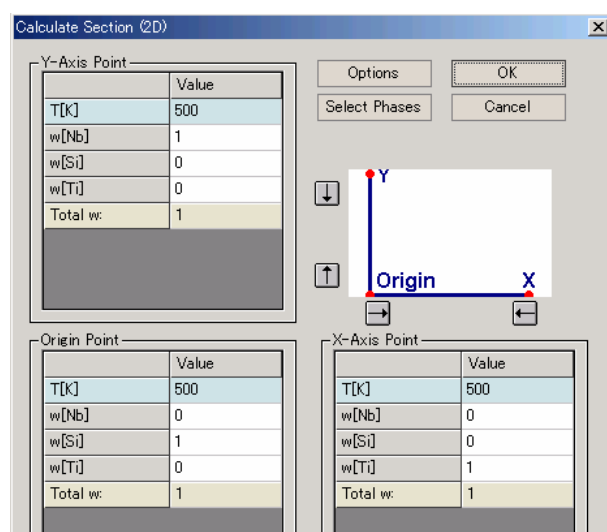
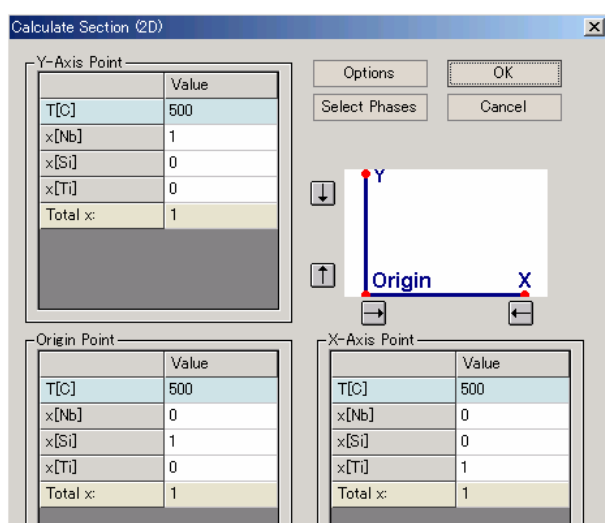
## お勧めの操作方法

1. Pandat 5.0 を起動したら、  
単位を決めましょう。

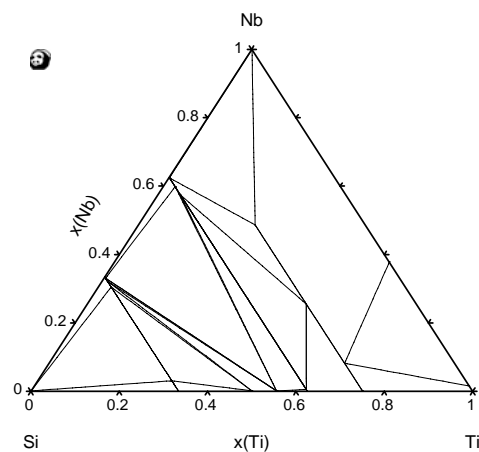
計算状態図をイメージし、  
温度はケルビンか°Cか、  
濃度は mol か mass か、  
選択して OK ボタンをクリックします。



選択したオプションにより、計算指示画面の単位が変わります。

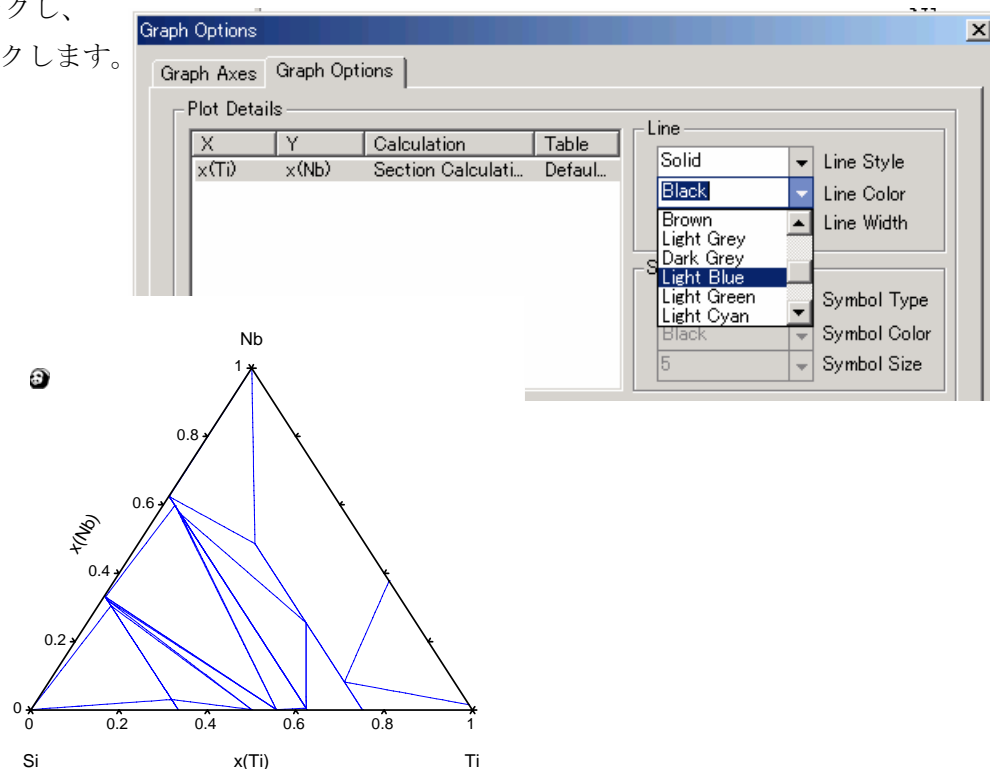


2. Nb-Si-Ti 3元系 500°C  
等温断面図の計算結果



## 2-1 境界線を青色にする方法

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



## 2-2 軸の単位をモル比率から重量比率に変える方法 $x \rightarrow w$

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

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

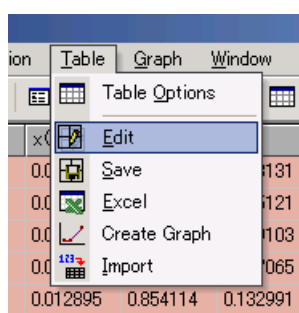
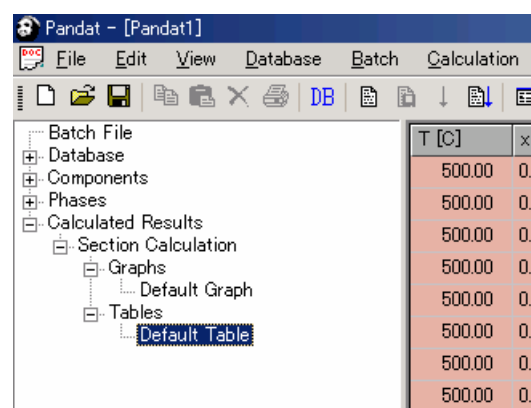



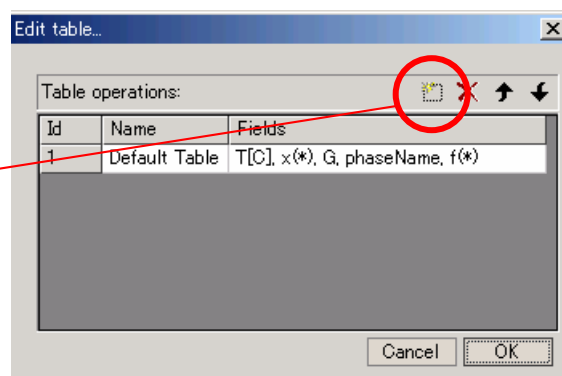
Table	Graph	Window
Table Options		
Edit		
Save		131
Excel		121
Create Graph		103
Import		065
0.012895	0.854114	0.132991



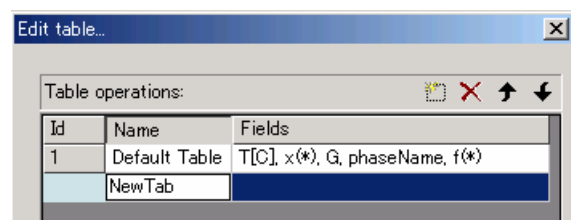
T [C]	x
500.00	0.0
500.00	0.0
500.00	0.0
500.00	0.0
500.00	0.0
500.00	0.0
500.00	0.0

Table → Edit を選択します。  
Default Table のみが存在します。

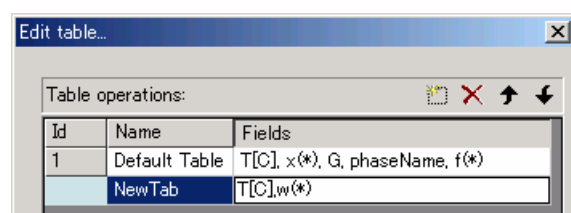
New  ボタンをクリックします。



テーブルの名前を適当に入力します。  
右の例では “NewTab” です。



Fields に、温度°Cと重量比率  
“ T[C], w(\*) ”  
を入力します。



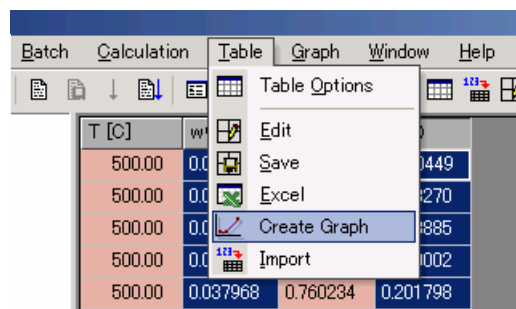
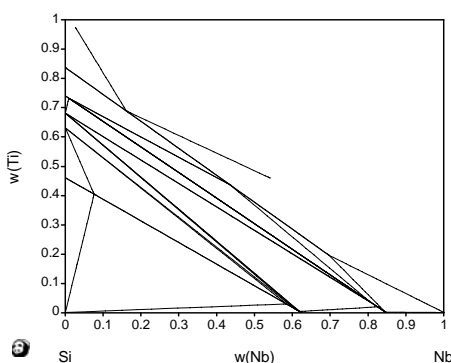
OK ボタンをクリックすると、  
NewTab テーブルの数値が表示されます。


グラフ表示させる  
2列を Ctrl キーを  
利用して選びます。

T [C]	w(Nb)	w(Si)	w(Ti)
500.00	0.030188	0.809363	0.160449
500.00	0.030719	0.806011	0.163270
500.00	0.031776	0.799340	0.168885
500.00	0.033867	0.786131	0.180002
500.00	0.037968	0.760234	0.201798
500.00	0.041962	0.735010	0.223027
500.00	0.045854	0.710434	0.243712


T [C]	w(Nb)	w(Si)	w(Ti)
500.00	0.030188	0.809363	0.160449
500.00	0.030719	0.806011	0.163270
500.00	0.031776	0.799340	0.168885
500.00	0.033867	0.786131	0.180002
500.00	0.037968	0.760234	0.201798
500.00	0.041962	0.735010	0.223027
500.00	0.045854	0.710434	0.243712
500.00	0.049647	0.686480	0.263873
500.00	0.053346	0.663124	0.283530


Table → Create Graph を選択します。

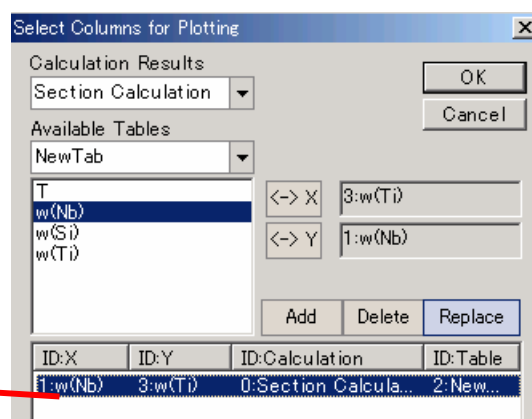
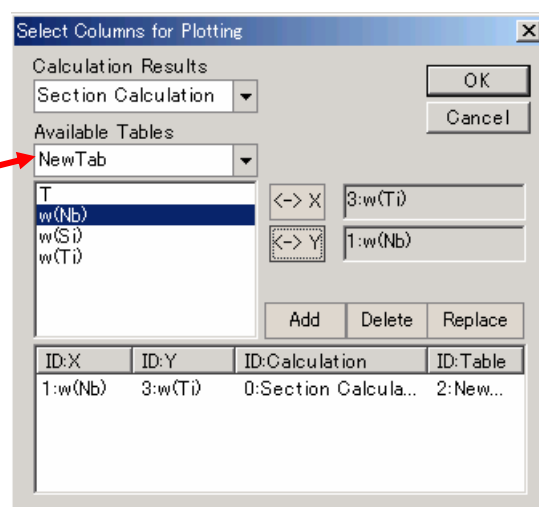



 ボタンもしくは Graph → Plots Setup を選択し、表示させる軸変数を決めます。

Available Tables から NewTab を選択します。

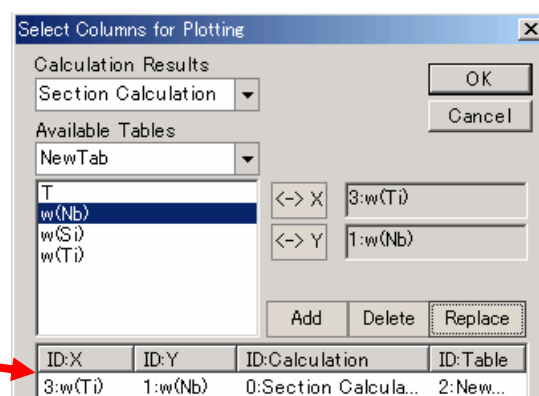
W(Ti) を選択し、中央の  ボタンをクリックします。

W(Nb) を選択し、中央の  ボタンをクリックします。

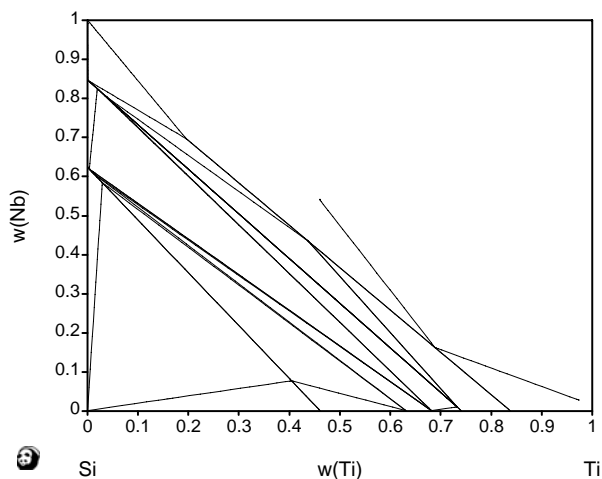


表示中の行を選択し、 ボタンをクリックします。

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

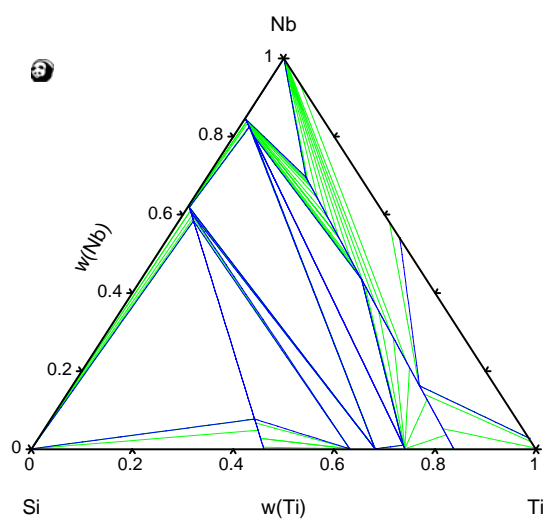
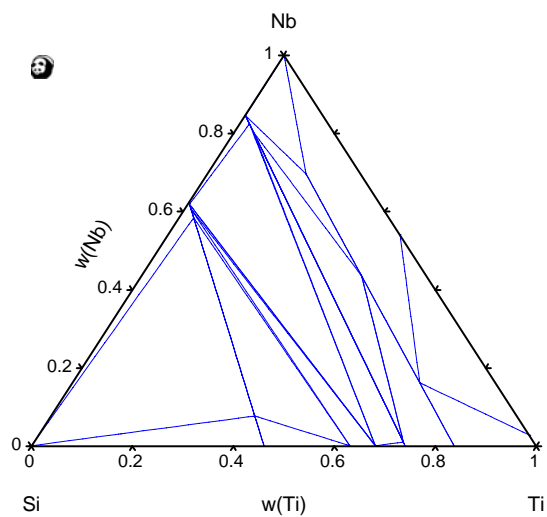


OK ボタンをクリックすると  
 X 軸が mass fraction of Ti  
 Y 軸が mass fraction of Nb の  
 図が得られます。



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

さらにタイラインを表示させ、  
 Nb-Si-Ti 3元系 500°Cの  
 重量比率による  
 等温断面図が得られます。



## 2-3 計算状態図上に印を付ける方法

テキストファイルに数値を入力します。

第1行目は列名とします。

タブで列を揃えます。

2列で1組とします。

右の例では3組あります。

数値は ti と nb の濃度 (mass fraction) を意味します。

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

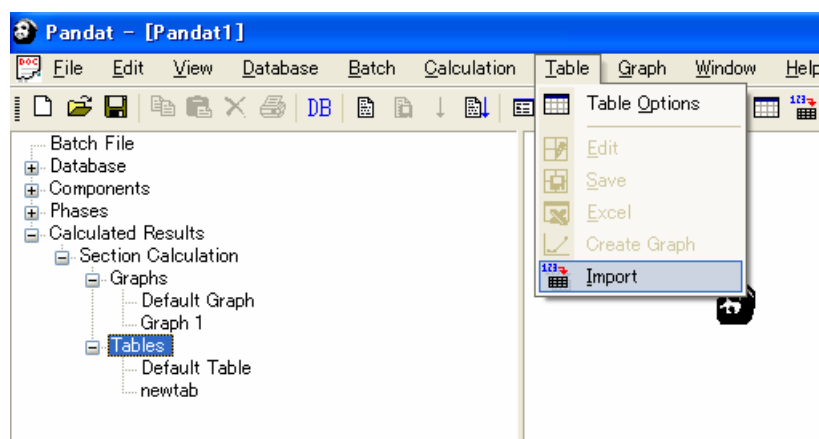
計算状態図を表示後に

画面左側の Tables を

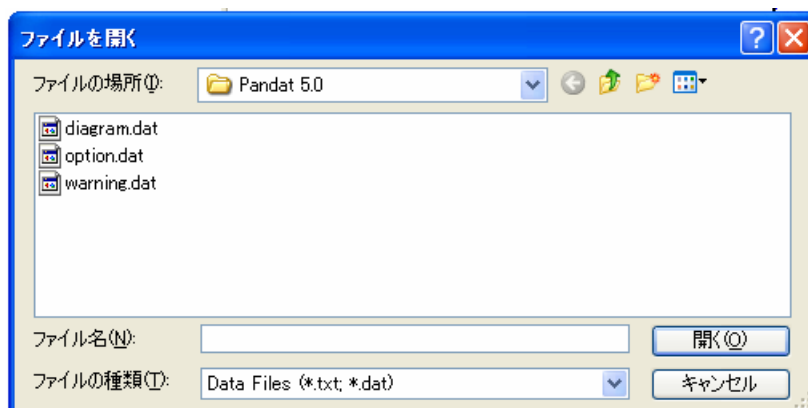
クリックし、その後、図上を再度クリックします。

Table → Import メニュー

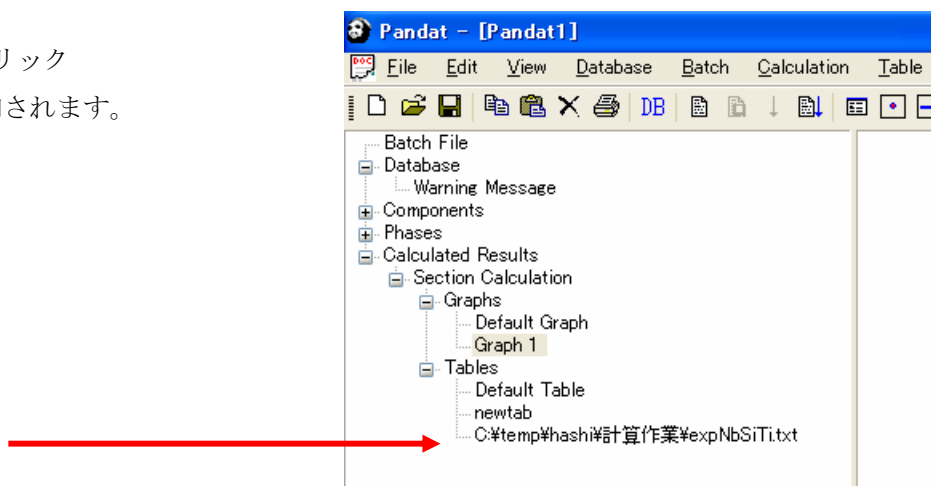
が利用可能となります。



テーブル数値表を読み込むために、ファイルを選択します。



「開く」ボタンをクリックすると、Tables に追加されます。



画面左側の  
Calculated Results  
Section Calculation  
Graphs  
Default Graph

を選択すると、先ほどの  
計算結果図が表示されます。

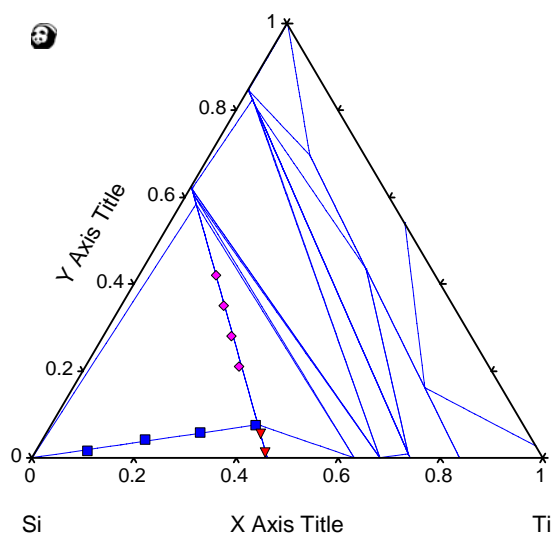
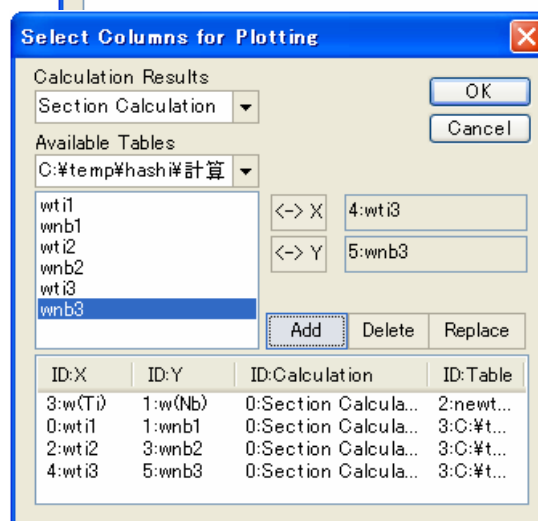
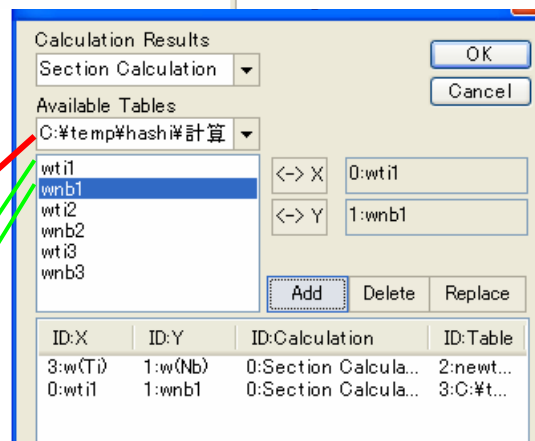
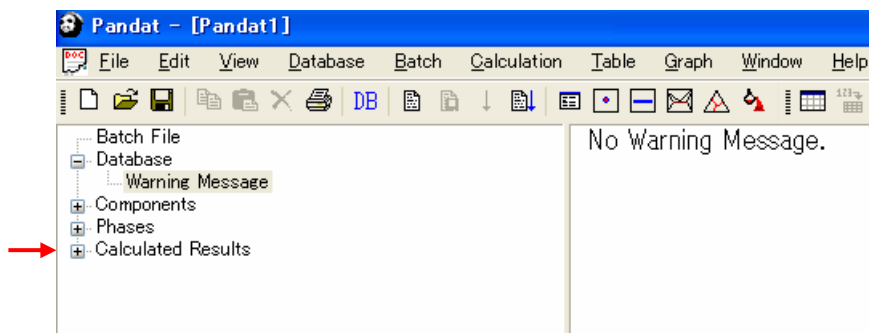
画面上を一度クリックした後、  
Graph → Plots Setup メニュー  
を選択します。

Available Tables から  
自作のファイル（テーブル）を選択し、  
第1組目として、  
wti1 列を選び  ボタンをクリックし、  
wnb1 列を選び  ボタンをクリックします。  
そして Add ボタンをクリックします。

続けて第2組目を追加します。  
wti2 列を選び  ボタンをクリックし、  
wnb2 列を選び  ボタンをクリックします。  
そして Add ボタンをクリックします。

続けて第3組目を追加します。  
wti3 列を選び  ボタンをクリックし、  
wnb3 列を選び  ボタンをクリックします。  
そして Add ボタンをクリックします。

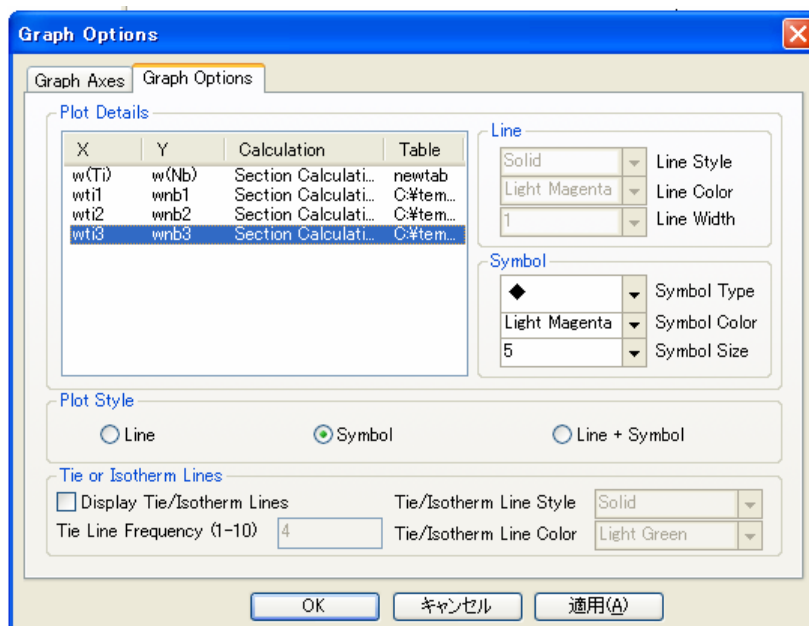
OK ボタンをクリックすると  
計算状態図上に、  
1組目の4個のデータが青色の■印で、  
2組目の2個のデータが赤色の▼印で、  
3組目の4個のデータが桃色の◆印で、  
表示されます。



印の色や大きさは

Graph → Configure

Graph Options 画面にて指定（変更）できます。



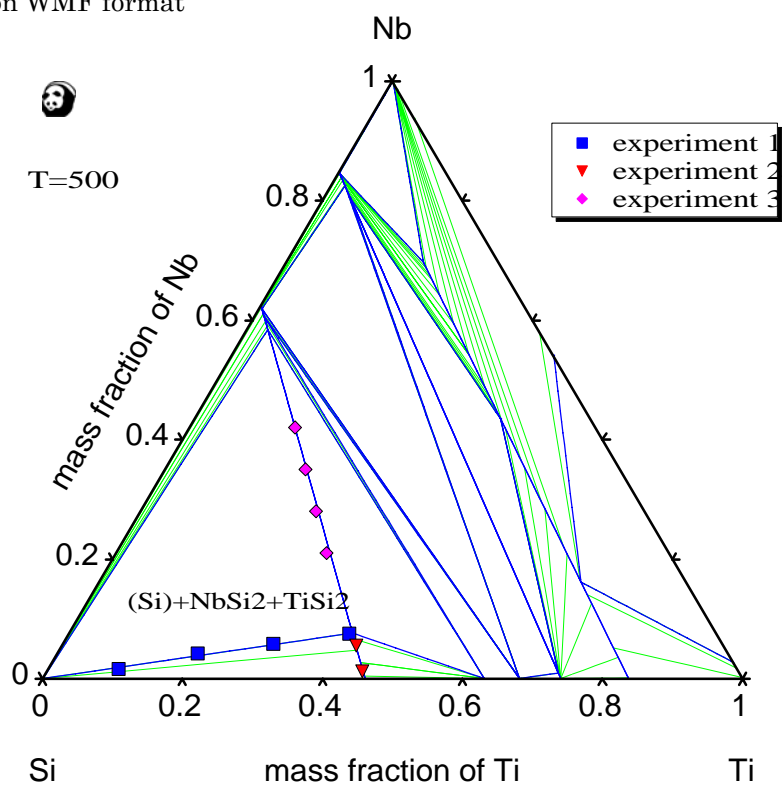
凡例は

Graph → Legend により表示できます。

図をワードファイルに貼り付ける場合、

Graph → “Copy high resolution WMF format”

を選択します。



### 3. 画面表示されている表の値をコピーする方法

(例： Nb-Si-Ti 3元系

500°Cの等温断面図を計算後)

計算後の Tables の Default Table  
を表示させます。

コピーしたい部分を選択します。  
Shift キーを利用します。

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

コピー操作は  
Shift + 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。

T [C]	wNb	wSi	wTi	phaseName
500.00	0.010000	0.886869	0.103131	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.010193	0.884686	0.105121	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.010579	0.880218	0.109103	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.011351	0.871584	0.117065	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.012895	0.854114	0.132991	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.014440	0.836645	0.148916	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.015984	0.819175	0.164841	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.017528	0.801706	0.180766	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.019072	0.784236	0.196692	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.020616	0.766767	0.212617	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.022160	0.749297	0.228542	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.023705	0.731828	0.244468	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.025249	0.714358	0.260393	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.026793	0.696889	0.276318	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.028337	0.679419	0.292244	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.029109	0.670684	0.300206	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.029302	0.668501	0.302197	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.029399	0.667409	0.303192	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.029464	0.666667	0.303869	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.029464	0.666667	0.303869	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.029618	0.666667	0.303515	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.031232	0.666667	0.302101	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52

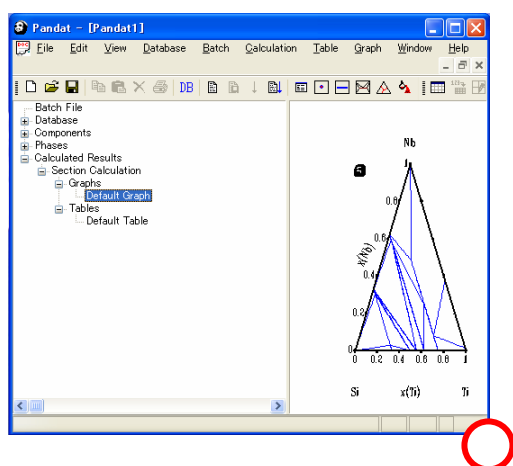
T [C]	wNb	wSi	wTi	phaseName
500.00	0.010000	0.886869	0.103131	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.010193	0.884686	0.105121	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.010579	0.880218	0.109103	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.011351	0.871584	0.117065	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.012895	0.854114	0.132991	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.014440	0.836645	0.148916	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.015984	0.819175	0.164841	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.017528	0.801706	0.180766	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.019072	0.784236	0.196692	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.020616	0.766767	0.212617	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.022160	0.749297	0.228542	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.023705	0.731828	0.244468	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.025249	0.714358	0.260393	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.026793	0.696889	0.276318	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.028337	0.679419	0.292244	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.029109	0.670684	0.300206	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.029302	0.668501	0.302197	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.029399	0.667409	0.303192	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.029464	0.666667	0.303869	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.029464	0.666667	0.303869	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.029618	0.666667	0.303515	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52
500.00	0.031232	0.666667	0.302101	DIAMOND_A4+TiS2+Nb52

	A	B	C	D	E	F	G
1							
2		500	0.01	0.886869	0.103131		
3		500	0.010193	0.884686	0.105121		
4		500	0.010579	0.880318	0.109103		
5		500	0.011351	0.871584	0.117065		
6		500	0.012895	0.854114	0.132991		
7		500	0.014440	0.836645	0.148916		
8		500	0.015984	0.819175	0.164841		
9		500	0.017528	0.801706	0.180766		
10		500	0.019072	0.784236	0.196692		
11		500	0.020616	0.766767	0.212617		
12		500	0.022160	0.749297	0.228542		
13		500	0.023705	0.731828	0.244468		
14		500	0.025249	0.714358	0.260393		
15		500	0.026793	0.696889	0.276318		
16		500	0.028337	0.679419	0.292244		
17		500	0.029109	0.670684	0.300206		
18		500	0.029302	0.668501	0.302197		
19		500	0.029399	0.667409	0.303192		
20		500	0.029464	0.666667	0.303869		
21							

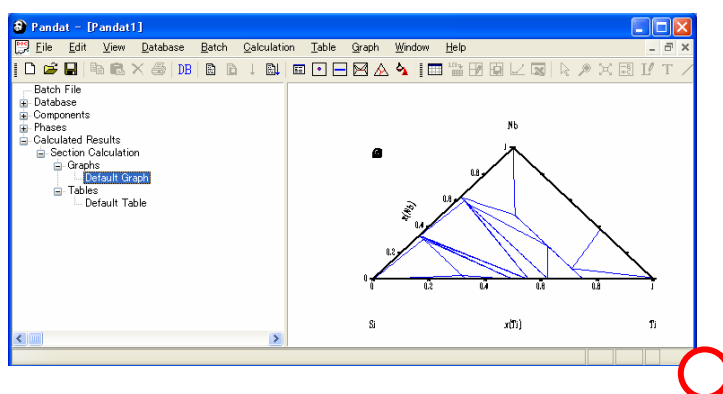
#### 4. 正三角形の図を表示させる方法

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。

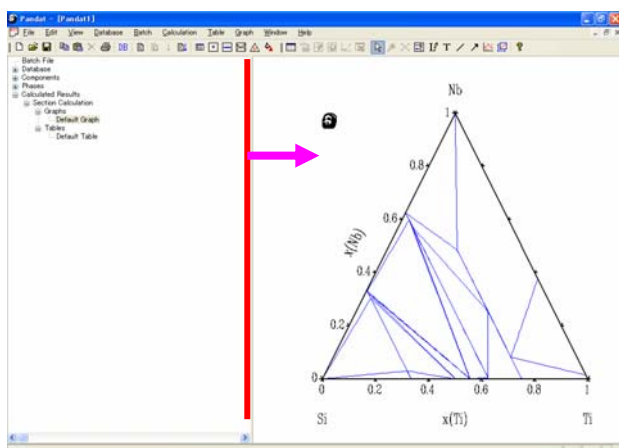
- 4-1 Windows 枠の右下を  
左（もしくは下）に移動させると  
図全体が横に縮小します。  
(これは Windows の機能)



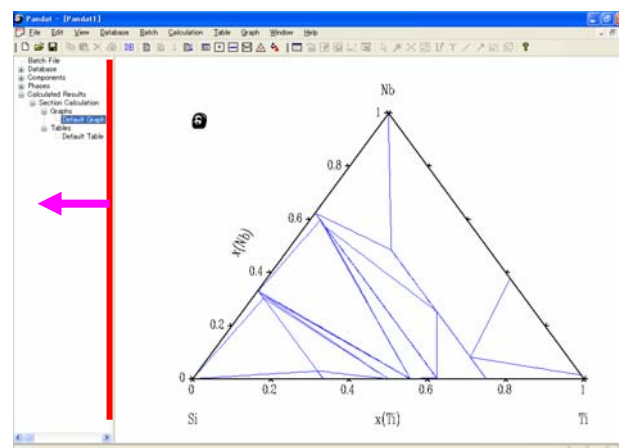
- Windows 枠の右下を  
右（もしくは上）に移動させると  
図全体が横に拡大します。  
(これは Windows の機能)



- 4-2 Pandat 内の領域バーを  
右に移動させると  
図全体が横に縮小します。



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



## お勧めの操作

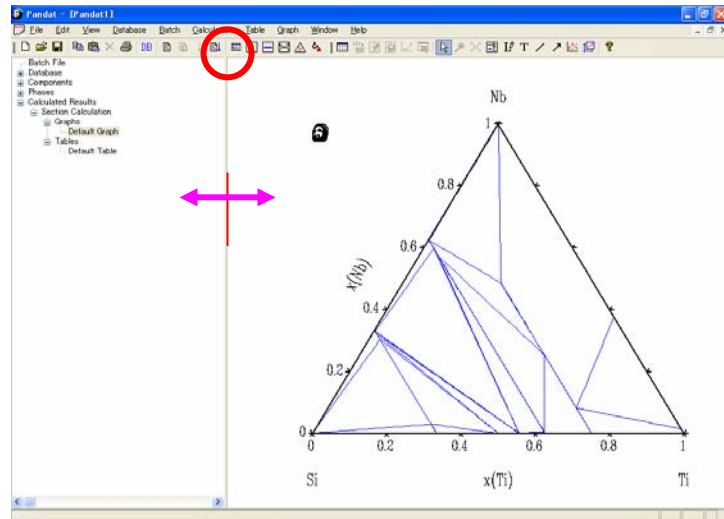
Pandat をフルスクリーン（最大化）表示させます。

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。



## 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 VA  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 GHSERNB 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 -8162.809+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);
3.60000E+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**2-9.0878E-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
-1477660*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 VA !

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+GHSERNB#; 2.75000E+03 Y
+30169.902-10.964695*T-1.528238E+32*T**(-9)+GHSERNB#;
6.00000E+03 N REF: 0 !

```

## 熱力学データベース作成例

hashiABC.tdb

```

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

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

PHASE LIQUID  %  1  1.0  !
CONSTITUENT LIQUID :A, B, C: !

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

PHASE SOLID  %  1  1.0  !
CONSTITUENT SOLID  :A,B,C:  !

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

```

## メニュー一覧

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

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

Graph	Window	Help
Plot Setup	Cascade	Pandat Help
Configure	Tile	Dongle Info
Copy WMF Format	Arrange Icons	About Pandat
Delete	Split	
Select	Window 1,2,...	
Zoom Mode		
Display Full Range		
Legend		
Label Mode		
Text		
Line		
Arrow		

## 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。  
英文 Help の 4.1 章をご参照ください。

### 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) pp265-503

"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.

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 : 03-3660-5080

FAX : 03-3660-5330

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 17 年 11 月 30 日