

# Pandat

状態図計算ソフトウェア

Version 6.0

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	21
計算機能4 液相面図	26
計算機能5 凝固計算	28
バッチ機能	30
単位の設定	40
ファイル操作	41
テーブル機能	42
グラフ機能1 グラフオプション	51
グラフ機能2 ラベルモード	54
グラフ機能3 ズームモード	56
グラフ機能4 グラフコピー	57
お勧めの操作方法	58
データベース	69
メニュー一覧	72
平衡計算モデル	73
バッチファイルPBFの例	74
問合せ先	78

## 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。  
HD は **100MB** でインストール可能です。

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
- 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。

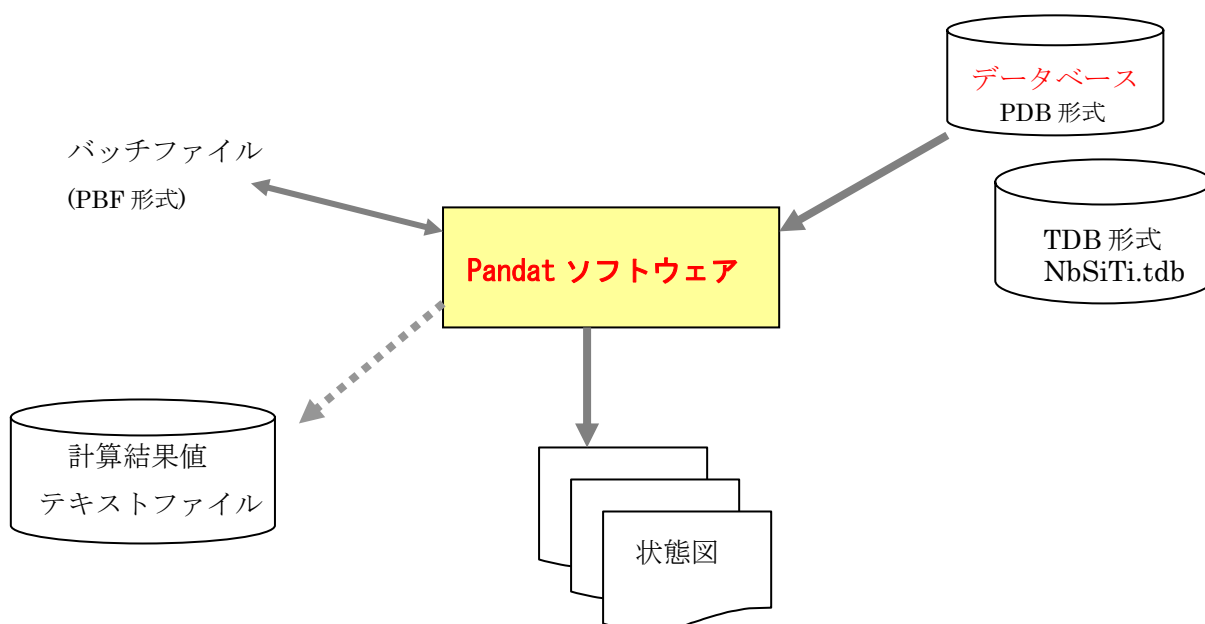
### ・REFERENCE 句

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ばれます。

一方、文献等に公表されているTDB形式のファイルを読み込むことが可能です。TDB形式のファイルを別途用意すれば計算に利用できます。

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。本システムは、計算結果を画面表示させると同時に、計算結果値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。



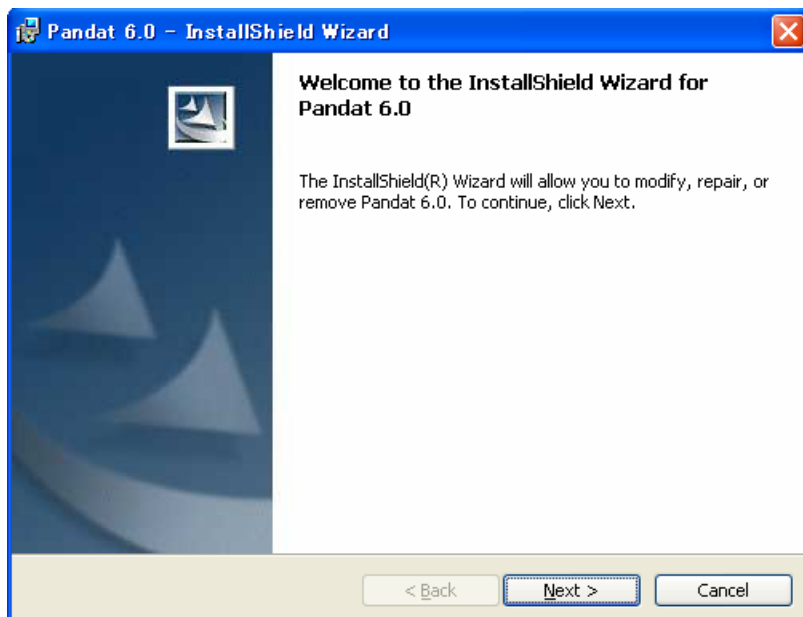
多元系合金状態図の計算をし易いように、操作性が優先されています。このため標準の計算結果表示画面には各種熱力学データが表示されません。バージョン 6 では各種熱力学量を表示させるためにテーブル機能が強化されました。テーブル機能を利用して各種熱力学量を取り出せます。

**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400点を計算し、これらの平衡点をもとに状態図を計算する。4) 計算範囲の全ての相境界を網羅することである。

## Pandat 6.0 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。

1. インストールCDをセットします。  
ドングル（プロテクト・キー）は外しておきます。



2. Pandat 6.0 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 **Change..** ボタンをクリックしてください。

標準

C:\Program Files\CompuThermLLC\Pandat6.0 **Next** 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。 **Finish** 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ト・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。)

10 熱力学データベースを導入された場合、

CD 中にある PanFe6.pdb ファイルを  
インストール先の

C:\Program Files\CompuThermLLC\Pandat 6.0

にコピーします。もしくは HD 上の適当なフォルダーにコピーします。

このファイルはドングルキーにより暗号化されています。

(Pandat DataBase file)

この PDB ファイルはソフトウェア Pandat から読み込み可能となります。

## アンインストール

Pandat 6.0 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 6.0」の「Pandat6.0 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

Pandat6.0 フォルダ

全てが削除されます。

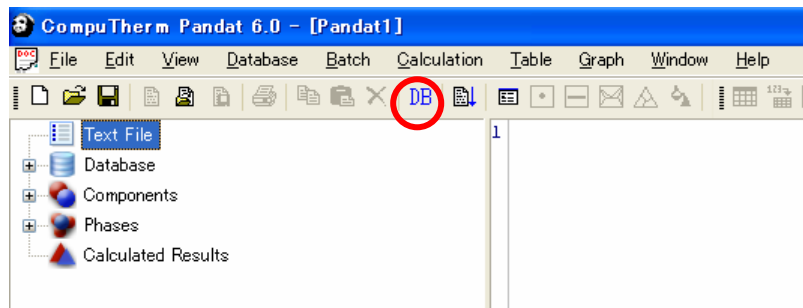


## まず使ってみよう

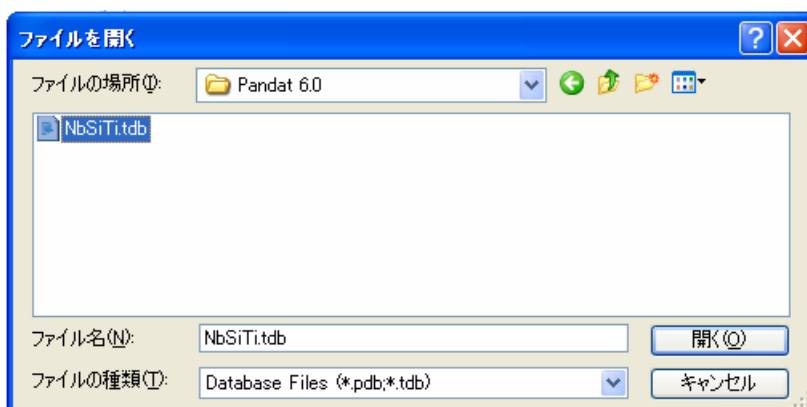
- 1) ソフトウェアを起動しましょう。

「スタート」 → 「プログラム」 → 「Pandat 6.0」 → 「Pandat 6.0」 を選択します。

- 2) DBアイコンを選択します。

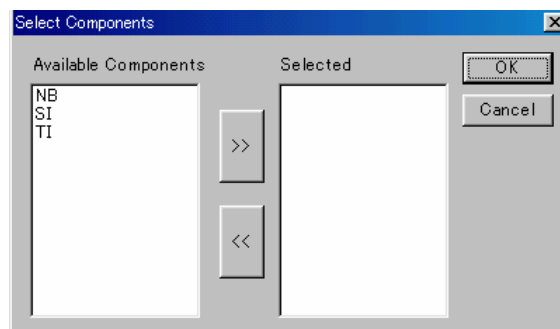


本ユーザーズガイドの中では、操作説明のために、元素 Nb, Si, Ti を用います。  
NbSiTi.tdb ファイルを選択します。




- 3) 元素を選択する画面が表示されます。

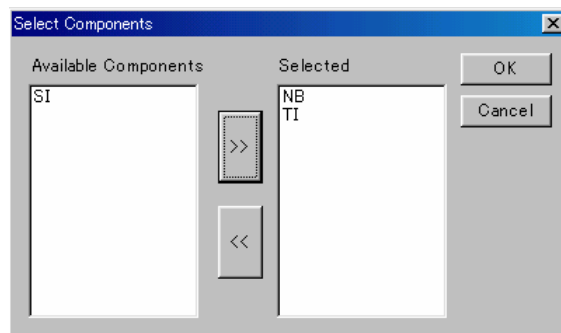
ここで **Cancel** ボタンをクリックすると元素を選択することなく先に進めます。しかし何も計算できません。この場合後で、メニューから 「Database」 → 「Select components」 を選択することにより、上記画面を再表示できます。



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。

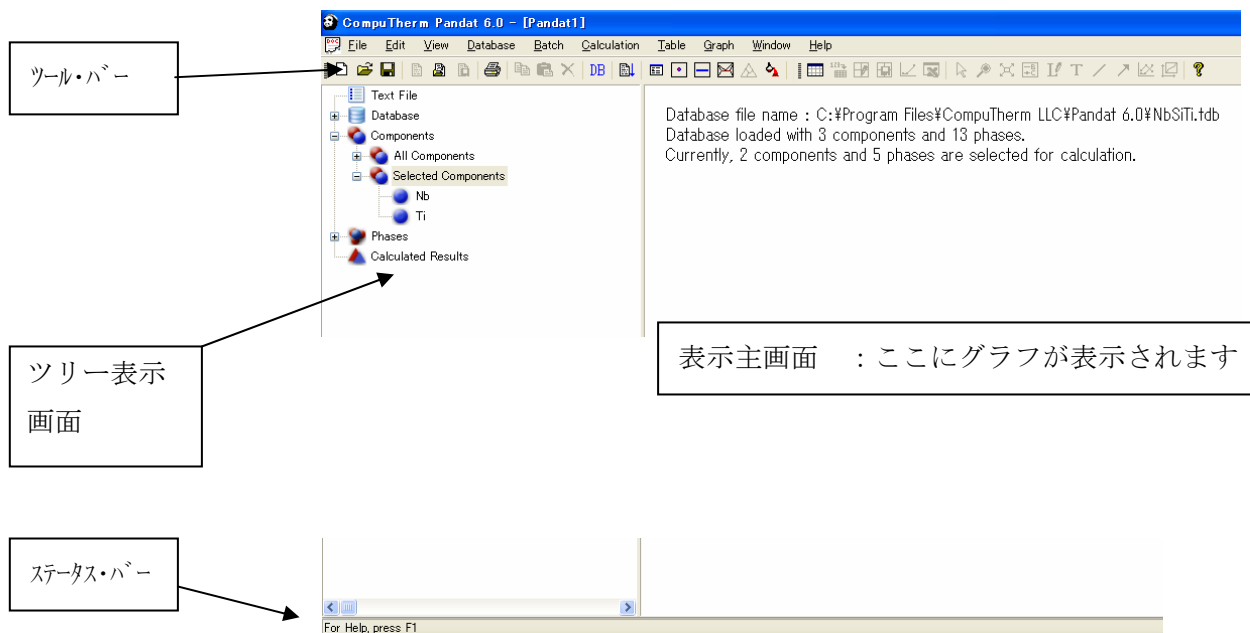
選択を解除するには  ボタンを利用します。

 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。  
ガス相を含まない金属合金系の場合、圧力は1気圧と固定されます。  
計算結果の図表示に関しは、**計算後にその都度**、 $^{\circ}\text{C}$ か $\text{K}$ 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。



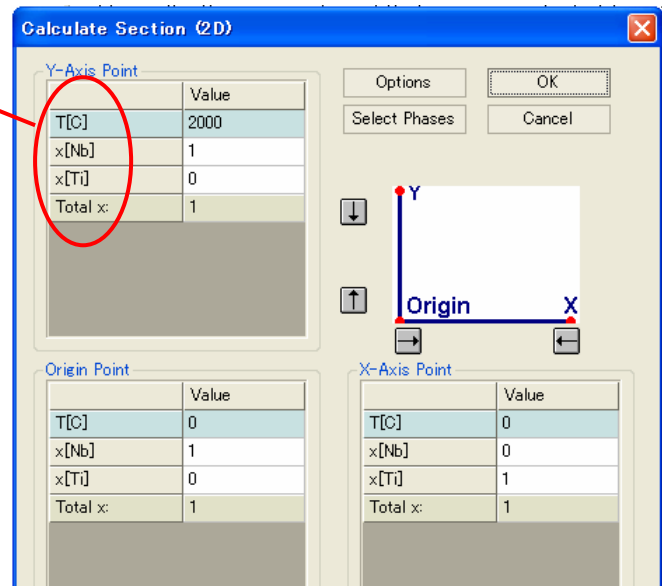
それぞれ

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

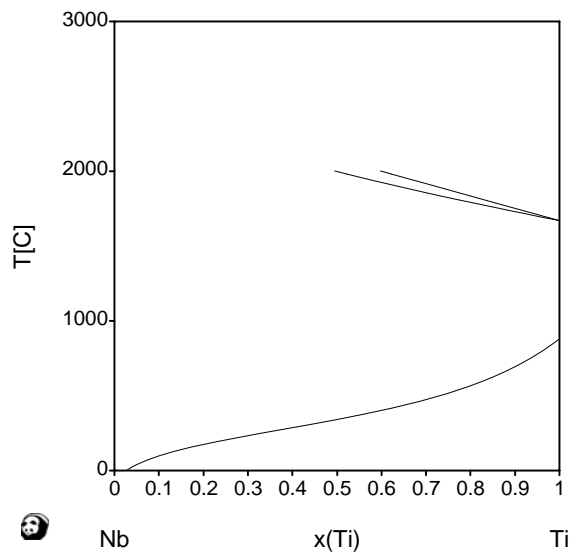
ここでは温度単位が°C、組成濃度単位がモル比率であることに注意します。これは本章6)に起因します。単位を変更すればこの画面の単位表示も自動的に変わります。



- 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]

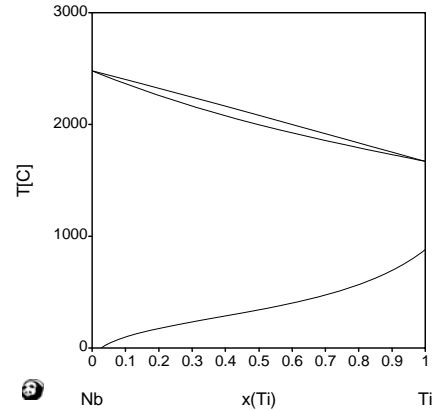



X軸タイトル: X(Ti)

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。

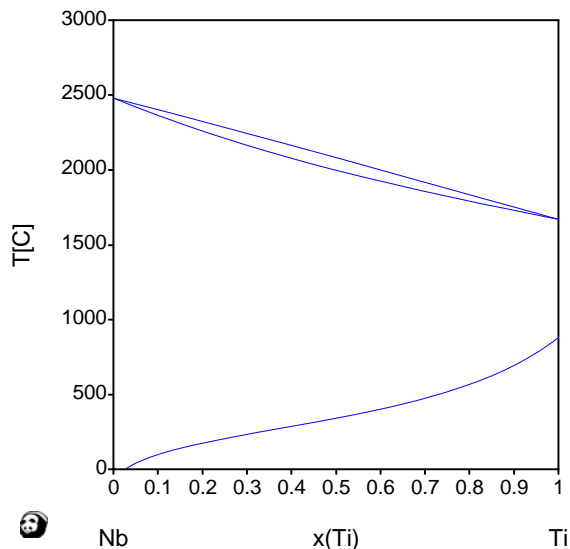



④ 表示範囲を変更するには、図上を1度クリック後、アイコン  をクリックします。

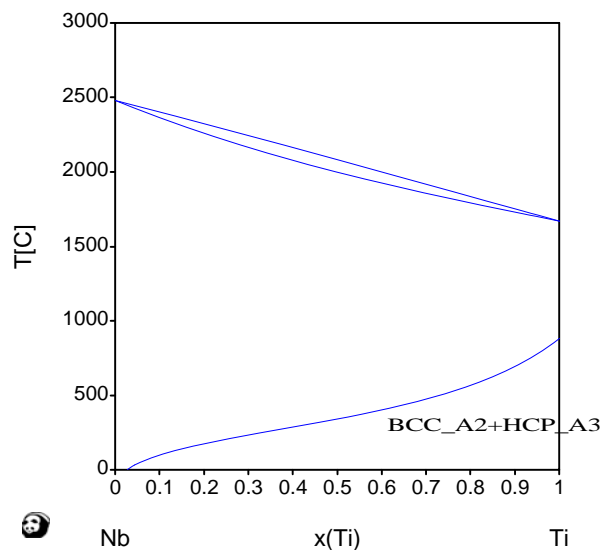
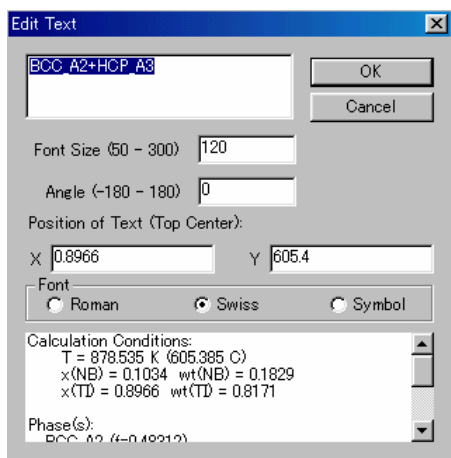
Graph Options 画面が表示されます。この画面には2つのサブ画面があります。


[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。

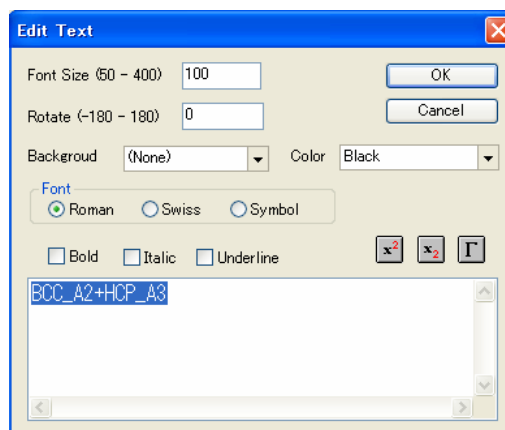
6 に変更 ←



- 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。

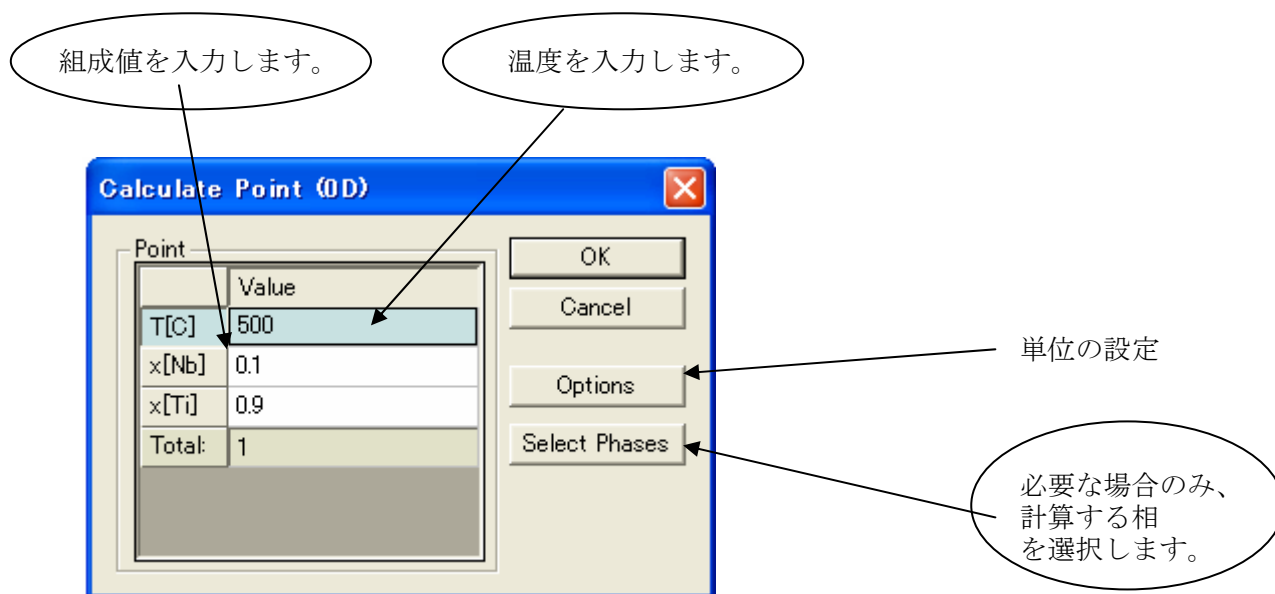
たとえば、Excel から Diagram.dat ファイルを開きます。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	x(Nb)	wt(Nb)	mu(Nb)	x(Ti)	wt(Ti)	mu(Ti)	T(K)	T(C)		Nb Ti
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。

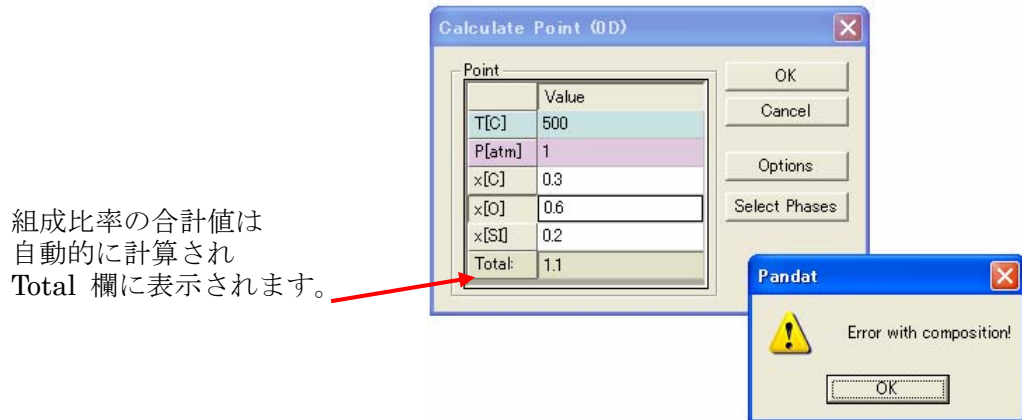


### 計算結果表示例

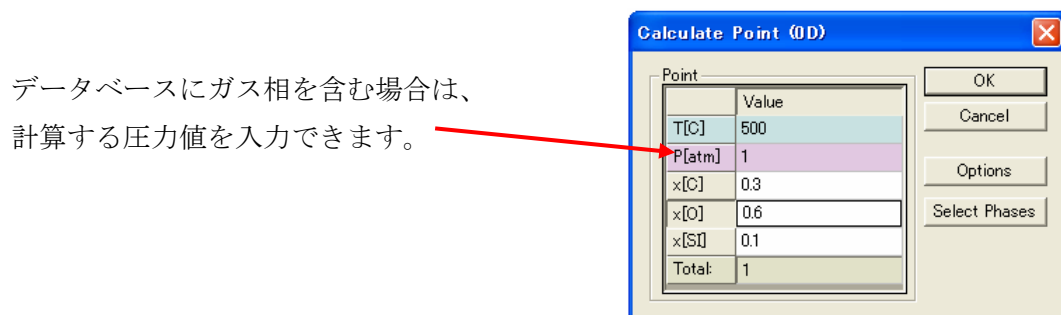
温度 500 °C 、  
Nb-90at%Ti の  
点を計算しました。

CompuTherm Pandat 6.0 - [Pandat1]

Title = Point Calculation  
Time: 0 second(s)  
Equilibrium found  
Calculated Point  
Temperature = 773.15 K (500 C)  
Pressure = 1 [atm]  
System composition and chemical potential:  
Nb : x = 0.1, wt = 0.17736, mu = -41193.9  
Ti : x = 0.9, wt = 0.82264, mu = -30830.7  
G = -31867  
There are 2 stable phases:  
Phase BCC\_A2: fraction = 0.354091  
G = -33611.6 (J/mol)  
H = 18084.4 (J/mol)  
S = 66.8641 (J/K.mol)  
Cp = 27.4505 (J/K.mol)  
T = 773.15 K  
x[Nb] = 0.26834 (wt[Nb] = 0.415768)  
x[Ti] = 0.73166 (wt[Ti] = 0.584232)  
Phase HCP\_A3: fraction = 0.645909  
G = -30910.7 (J/mol)  
H = 13605.6 (J/mol)



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。

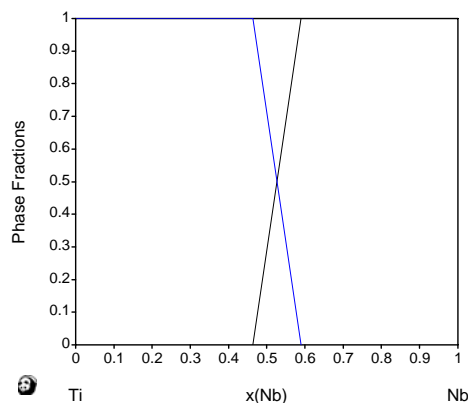
中央の ボタンを用いると便利です。

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

2000°Cで組成を変化させた場合

Ti 側は Liquid 相、Nb 側は BCC 相  
となる。



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

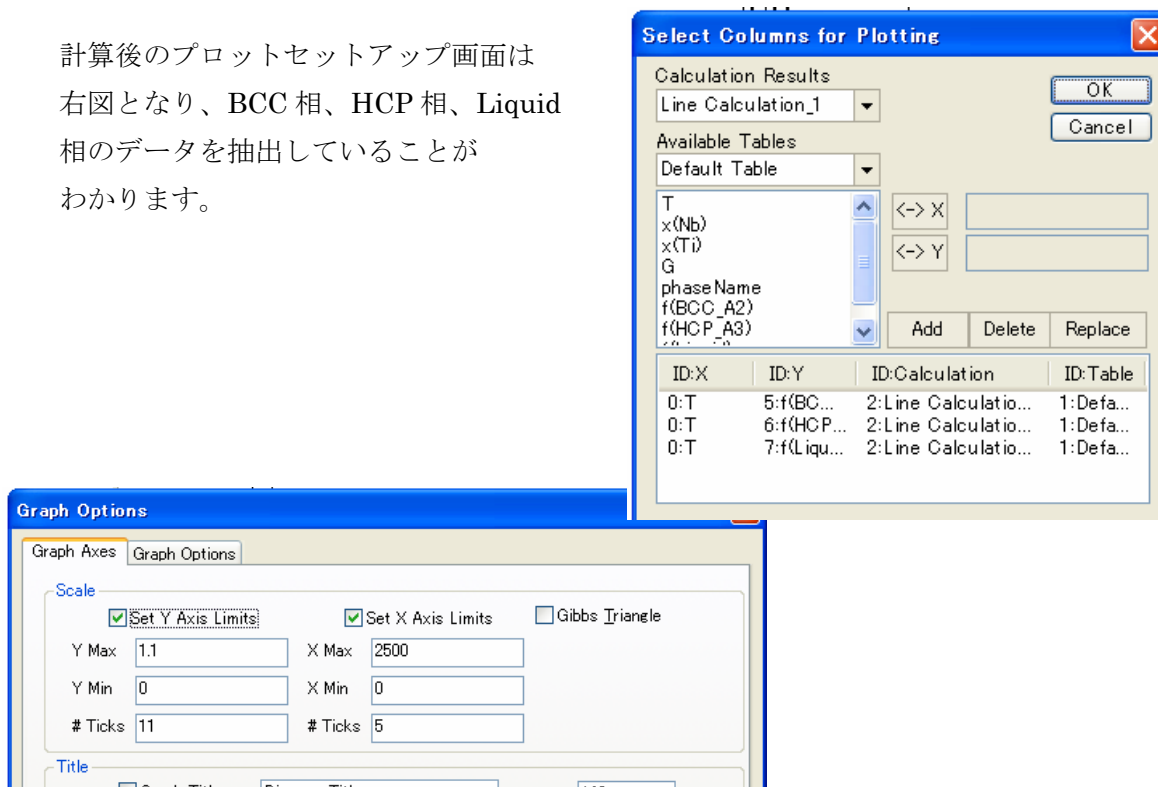
相境界点も計算し  
表示します。

line.dat  
ファイルの内容

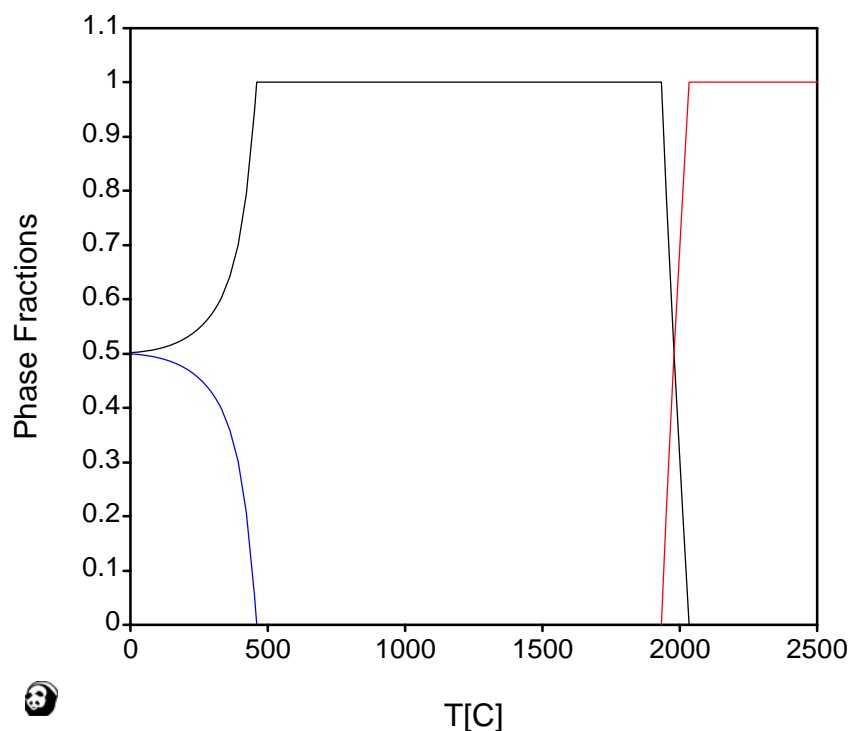
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1	x(Nb)	wt(Nb)	mu(Nb)	x(Ti)	wt(Ti)	mu(Ti)	G(total)	T(K)	T(C)		Line Calculation			
2														
35	0.68	0.804815	-160097	0.32	0.195185	-168734	-162861	2273.15	2000		BCC_A2(1)			
36	0.67	0.797554	-160319	0.33	0.202446	-168272	-162944	2273.15	2000		BCC_A2(1)			
37	0.66	0.790209	-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	-163309	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。

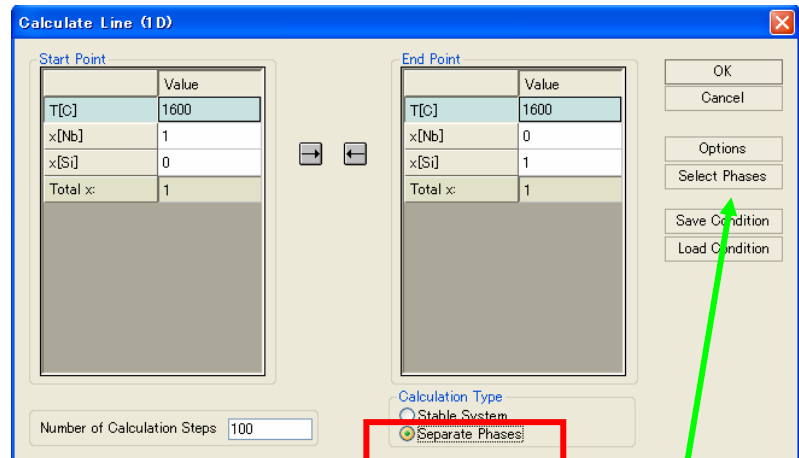


Y軸の表示範囲は 0～1.1 とし、X軸の表示範囲は 0～2500℃とします。赤線が液相、黒線が BCC 相、青線が HCP ( $\alpha$  Ti) 相です。



組成—自由エネルギー—曲線を計算し表示できます。

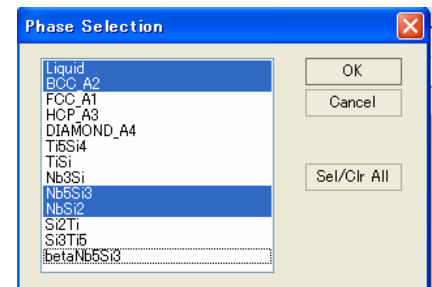
Nb-Si 2 元系  
温度 1600°Cの断面を  
計算します。



下段の計算タイプを選びます。

全ての相を選択すると図が複雑になるので  
注目したい相だけにします。

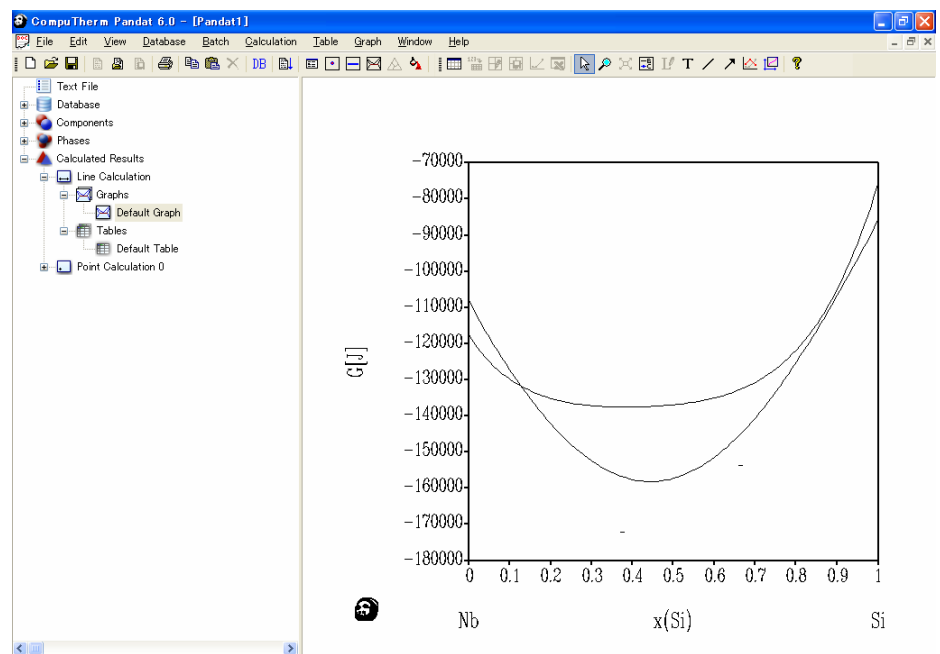
選択した相の背景  
色は青色です。  
ここでは  
4 個の相とします。



この計算タイプでは平衡計算を行わず、それぞれの相に  
対して全組成域の自由エネルギー値を求めます。

組成幅を持たない

ラインコンパウンド  
化合物相は短い横線  
で表されます。

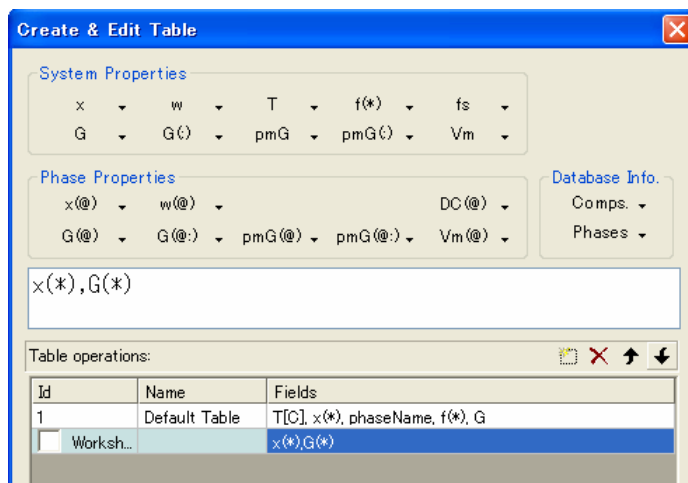


それぞれの曲線がどの相に対応するのか表示させるためには、テーブル機能を利用します。

まず、Table -> Create&Edit Table

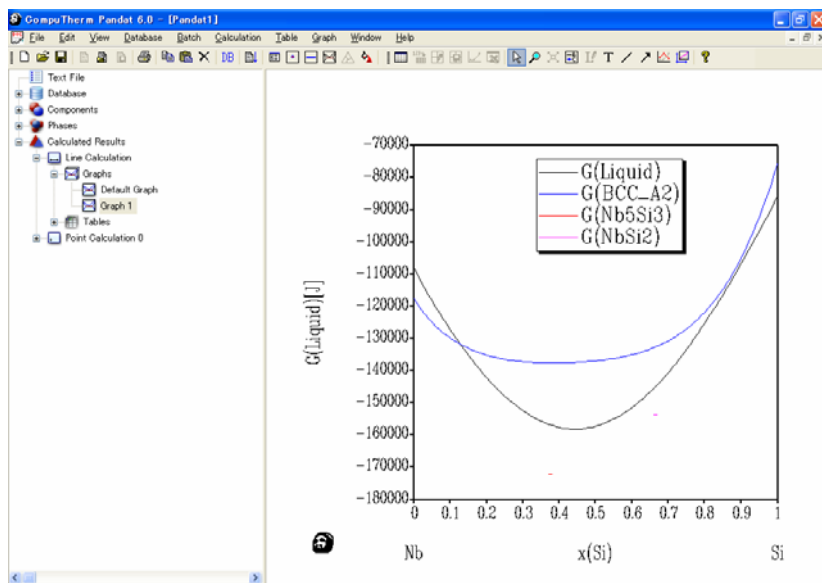
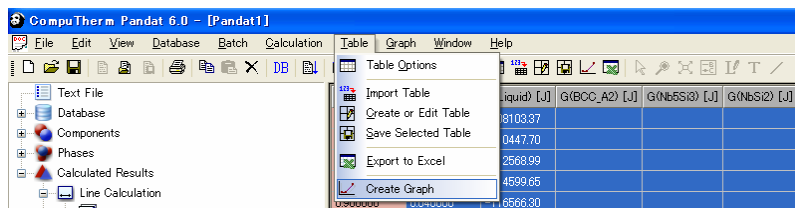
画面を表示させます。

右図の変数を持つテーブルを新規に作ります。



x(Nb)	x(Si)	G(Liquid) [J]	G(BCC_A2) [J]	G(Nb5Si3) [J]	G(NbSi2) [J]
1.000000	1.0000e-020	-108103.37			
0.990000	0.010000	-110447.70			
0.980000	0.020000	-112968.99			
0.970000	0.030000	-115599.65			

表形式の列を Ctrl キーを利用して複数選択し、メニューから Create Graph を選択すると、各相に色を付けてグラフ表示されます。さらに Legend を付加できます。



### 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。

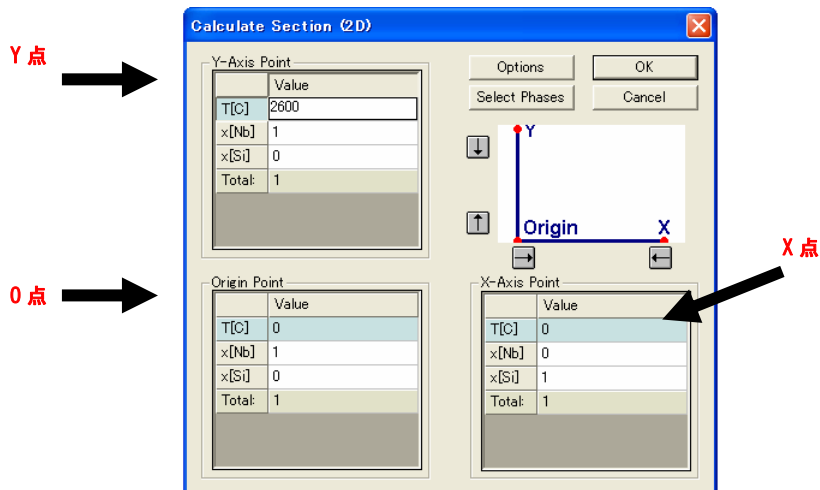
3点 (Y点、O点 (Origin)、X点) の値を与えます。

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、

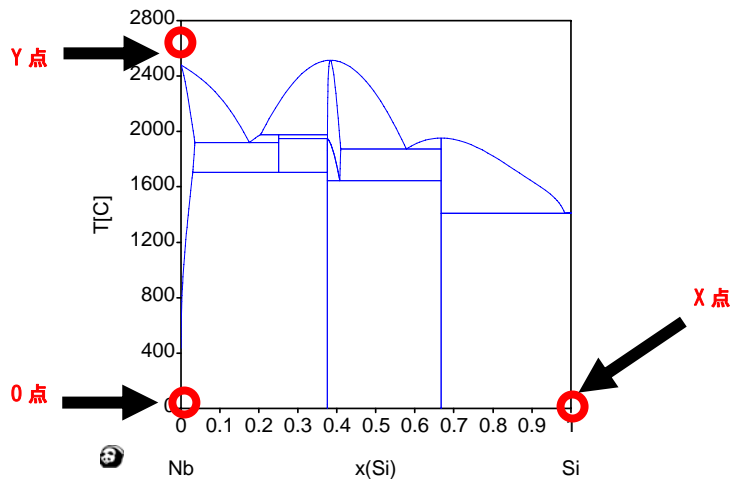
O点では Si がゼロで Nb が 100at% の断面とします。

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



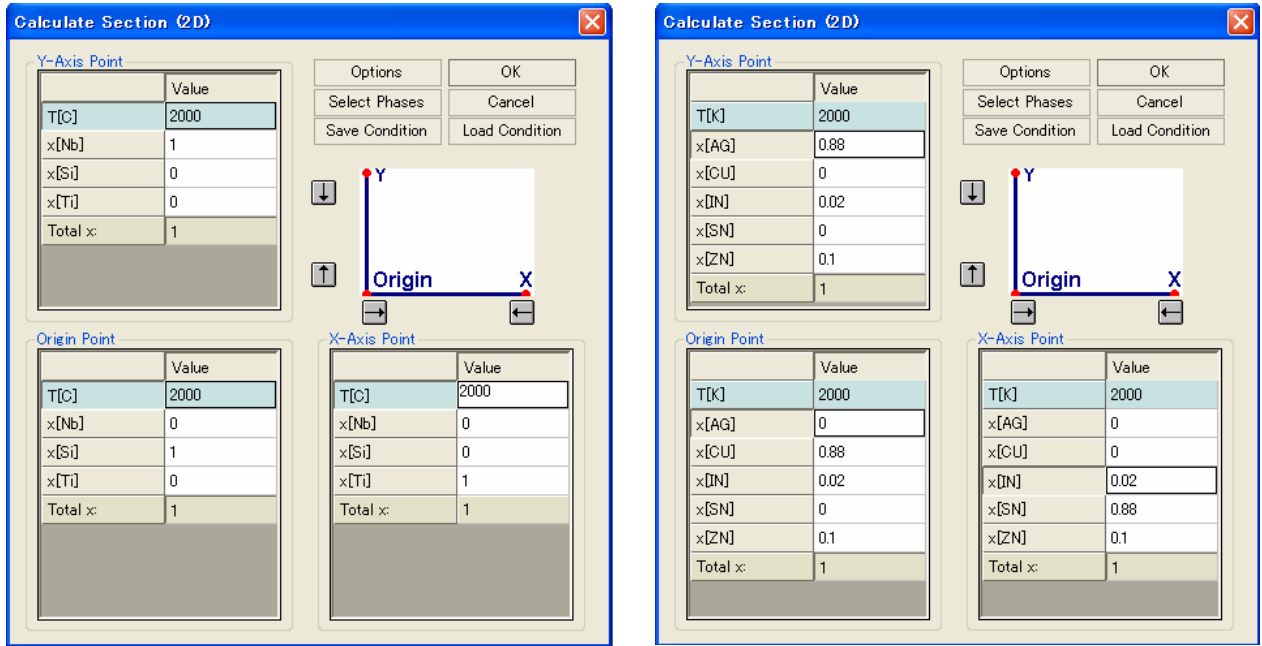
### 等温断面図の計算指示

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。

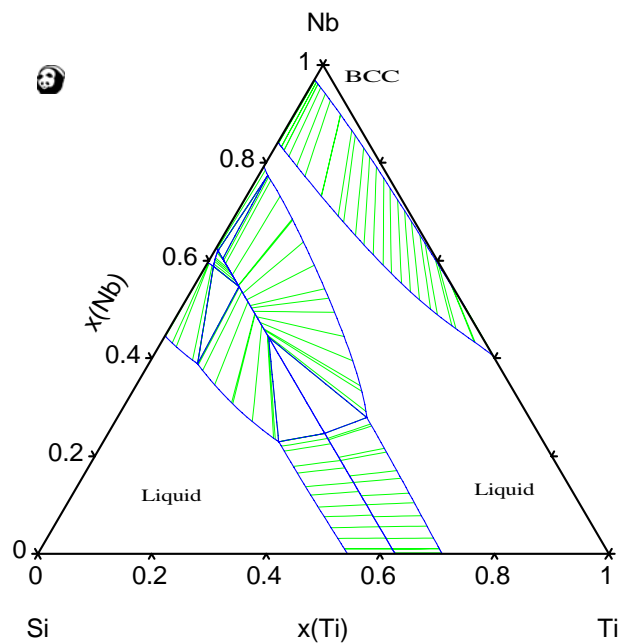
多元系の場合は、組成を固定する元素の組成値を3箇所とも同じにします。

3角コーナーの組成値をそれぞれ残量にします。



計算結果例

Nb-Si-Ti の 2000°C



### 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 Ti の値を3箇所とも同じにします。 10at%Ti = 0.1 mole fraction

残り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。

**Calculate Section (2D)**

Y-Axis Point

	Value
T[C]	2600
x[Nb]	0.9
x[Si]	0
x[Ti]	0.1
Total	1

Origin Point

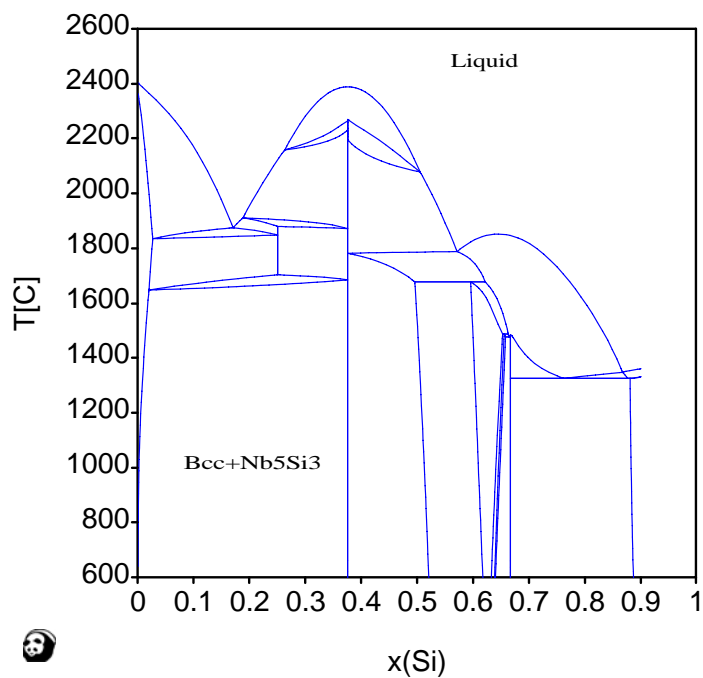
	Value
T[C]	1000
x[Nb]	0.9
x[Si]	0
x[Ti]	0.1
Total	1

X-Axis Point

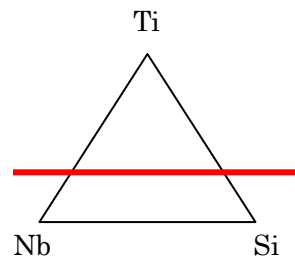
	Value
T[C]	1000
x[Nb]	0
x[Si]	0.9
x[Ti]	0.1
Total	1

計算結果例

Nb-10at%Ti-Si の縦断面図



多元系の場合も同じ指示画面を uses。



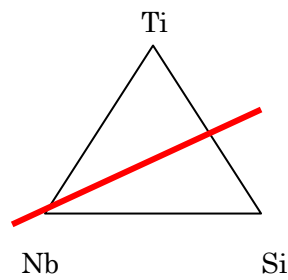
Ti の組成を固定した縦断面を計算する。

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



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

**Si:Ti = 5:5**

指示画面は

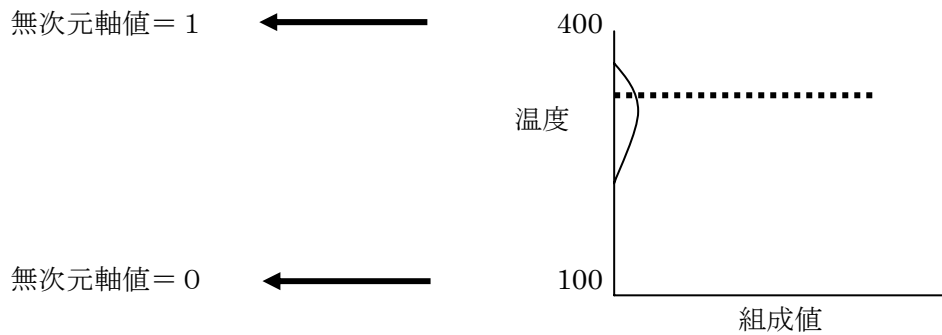
Y-Axis Point	
	Value
T[C]	2600
x[Nb]	1
x[Si]	0
x[Ti]	0
Total:	1

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

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

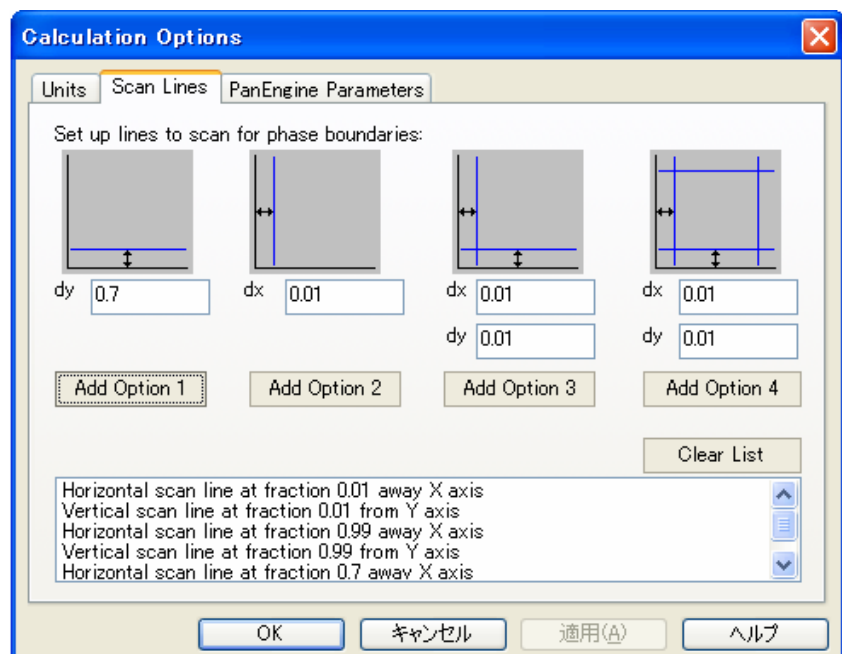
**Scan Lines** の利用

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。

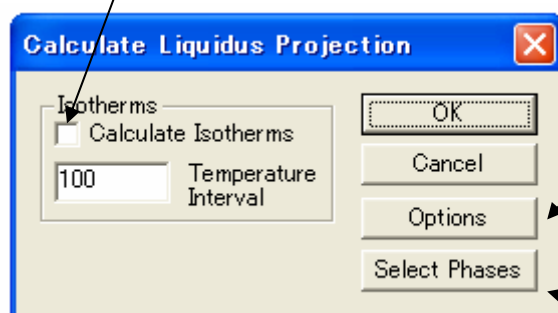
計算結果が画面に表示されます。

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。

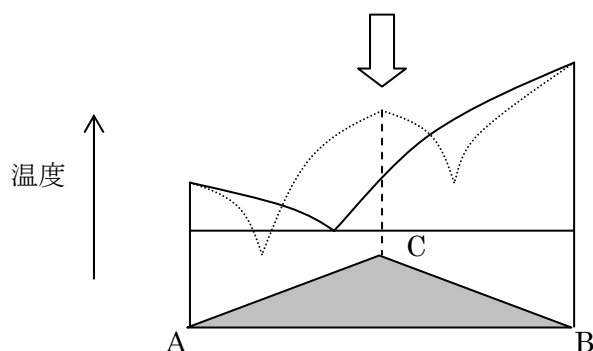
等温度の補助線が必要な場合チェックします。



必要な場合のみ、計算する相を選択します。

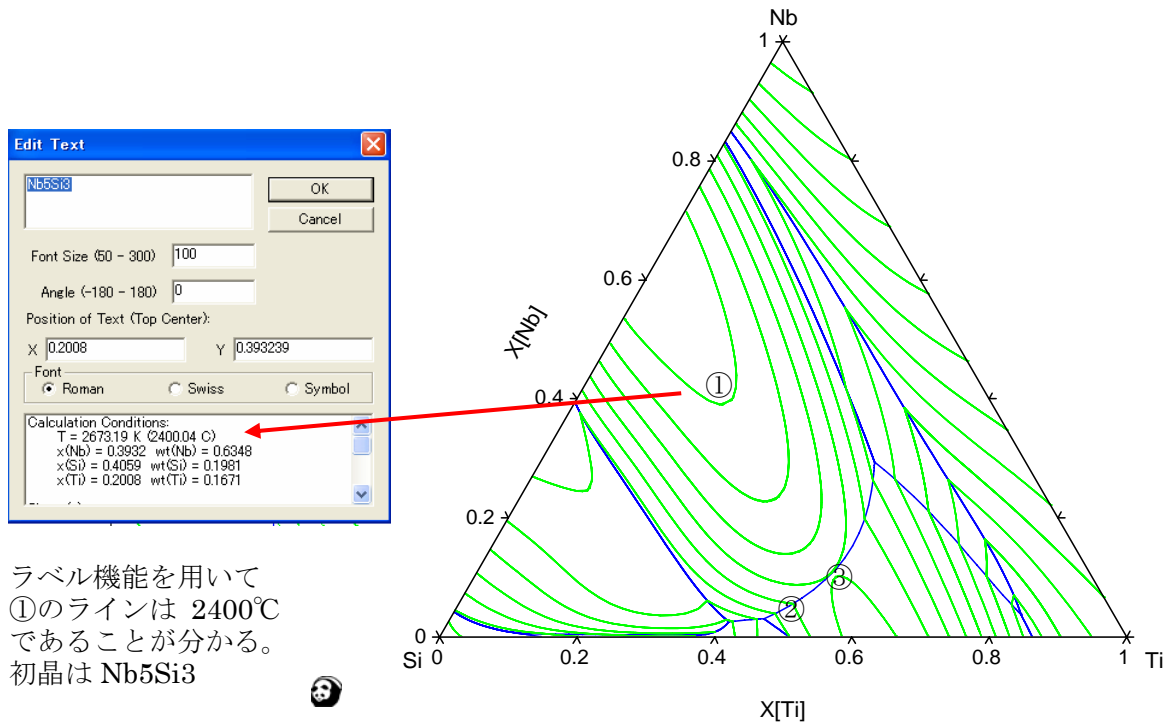
液相面図とは、

上部からの投射 = 液相面図



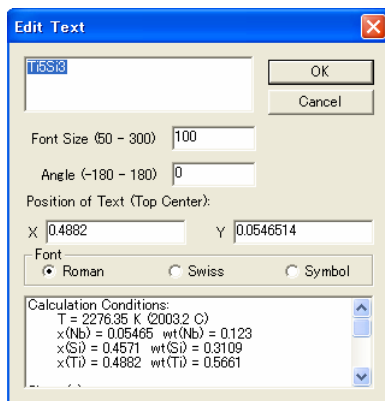
計算結果例

Nb-Si-Ti の液相面図



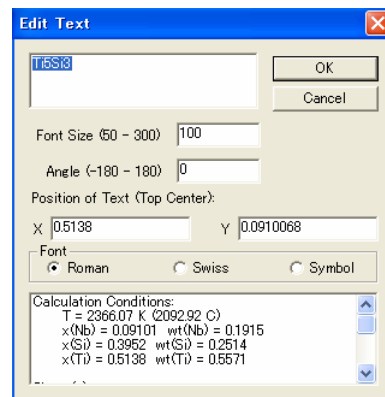
ラベル機能を用いて  
①のラインは 2400°C  
であることが分かる。  
初晶は Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>

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



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。

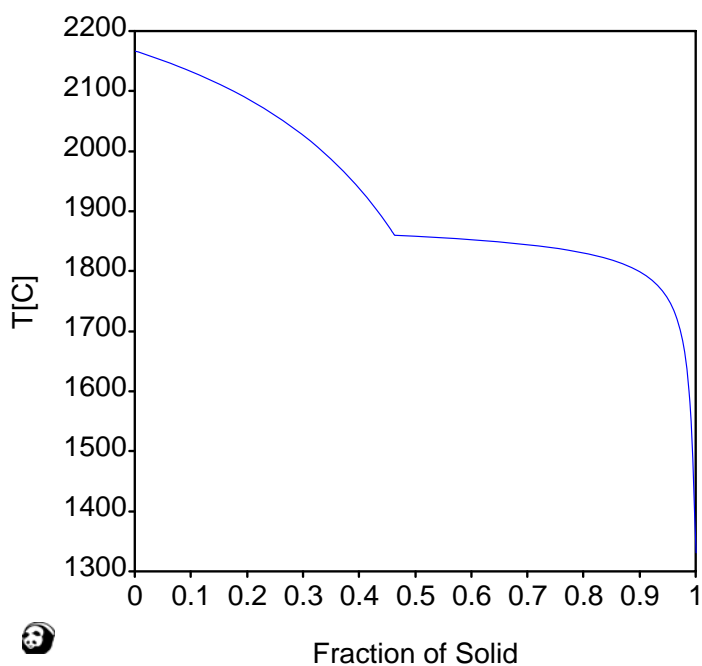
かつ、solidification.dat ファイルを自動作成し、この外部ファイルにも計算結果を書き出します。

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 [C]	x(Nb)	x(Si)	x(Ti)	phaseName	f <sub>l</sub>	f <sub>s</sub>	ftot(Liquid)	ftot(BCC_A2)
1865.45	0.706053	0.167694	0.126253	Liquid+BCC_A2	0.541991	0.458009	0.541991	0.458009
1862.25	0.705226	0.168283	0.126491	Liquid+BCC_A2	0.539711	0.460289	0.539711	0.460289
1860.65	0.704814	0.168576	0.126610	Liquid+BCC_A2	0.538580	0.461420	0.538580	0.461420
1859.85	0.704608	0.168723	0.126689	Liquid+BCC_A2	0.538017	0.461983	0.538017	0.461983
1859.45	0.704505	0.168796	0.126699	Liquid+BCC_A2	0.537736	0.462264	0.537736	0.462264
1859.35	0.704479	0.168814	0.126706	Liquid+BCC_A2	0.537666	0.462334	0.537666	0.462334
1859.35	0.704479	0.168815	0.126706	Liquid+BCC_A2+Nb3Si	0.537665	0.462335	0.537665	0.462335
1859.25	0.704295	0.168806	0.126899	Liquid+BCC_A2+Nb3Si	0.535443	0.464557	0.535443	0.463129
1859.05	0.703927	0.168789	0.127284	Liquid+BCC_A2+Nb3Si	0.531033	0.468967	0.531033	0.464704
1858.65	0.703192	0.168754	0.128053	Liquid+BCC_A2+Nb3Si	0.522352	0.477648	0.522352	0.467805
1857.85	0.701725	0.168686	0.129589	Liquid+BCC_A2+Nb3Si	0.505528	0.494472	0.505528	0.473817
1856.25	0.698799	0.168550	0.132651	Liquid+BCC_A2+Nb3Si	0.473908	0.526092	0.473908	0.485120
1853.05	0.692985	0.168280	0.138735	Liquid+BCC_A2+Nb3Si	0.417882	0.582118	0.417882	0.505161
1849.85	0.687219	0.168014	0.144767	Liquid+BCC_A2+Nb3Si	0.371164	0.628836	0.371164	0.521885
1846.65	0.681500	0.167751	0.150749	Liquid+BCC_A2+Nb3Si	0.331821	0.668179	0.331821	0.535980
1843.45	0.675826	0.167491	0.156683	Liquid+BCC_A2+Nb3Si	0.298302	0.701608	0.298302	0.547985

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				
fs	H(total)	Cp(total)	x(L,Nb)	wt(L,Nb)	mu(L,Nb)	x(L,Si)	wt(L,Si)	mu(L,Si)	x(L,Ti)	wt(L,Ti)	mu(L,Ti)	T(K)	T(C)		Nb	Si	Ti	(liquid)	Nb	O
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		
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		
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		
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		
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		
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		
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		
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		
0.019876	73233.4	37.1757	0.797479	0.906032	-90284	0.101674	0.03492	-226008	0.100847	0.059047	-120827	2367.98	2094.83					Liquid - BCC_A2		
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		
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		
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		
0.035312	72651.8	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		
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		

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

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

1	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R		
2	T(K)	T(C)	fs	Hm	f(Liquid)	x(Nb@Liquid)	x(Si@Liquid)	x(Ti@Liquid)	f(BCC_A2)	x(Nb@BCC_A2)	x(Si@BCC_A2)	x(Ti@BCC_A2)	f(Nb3Si)	x(Nb@Nb3Si)	x(Si@Nb3Si)	x(Ti@Nb3Si)	f(T5Si3)	x(Nb@T5Si3)	x(Si@T5Si3)	x(Ti@T5Si3)
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	0.361869	0.722641	0.140077	0.137822	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	0.31689	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	0.526822	0.887234	0.02807	0.084696	0.193638	0.619622	0.25	0.130378				
159	2141.06	1867.91	0.751759	44366.8	0.248241	0.709906	0.139291	0.150804	0.542119	0.88488	0.028086	0.087034	0.20964	0.616283	0.25	0.133717				

## バッチ機能

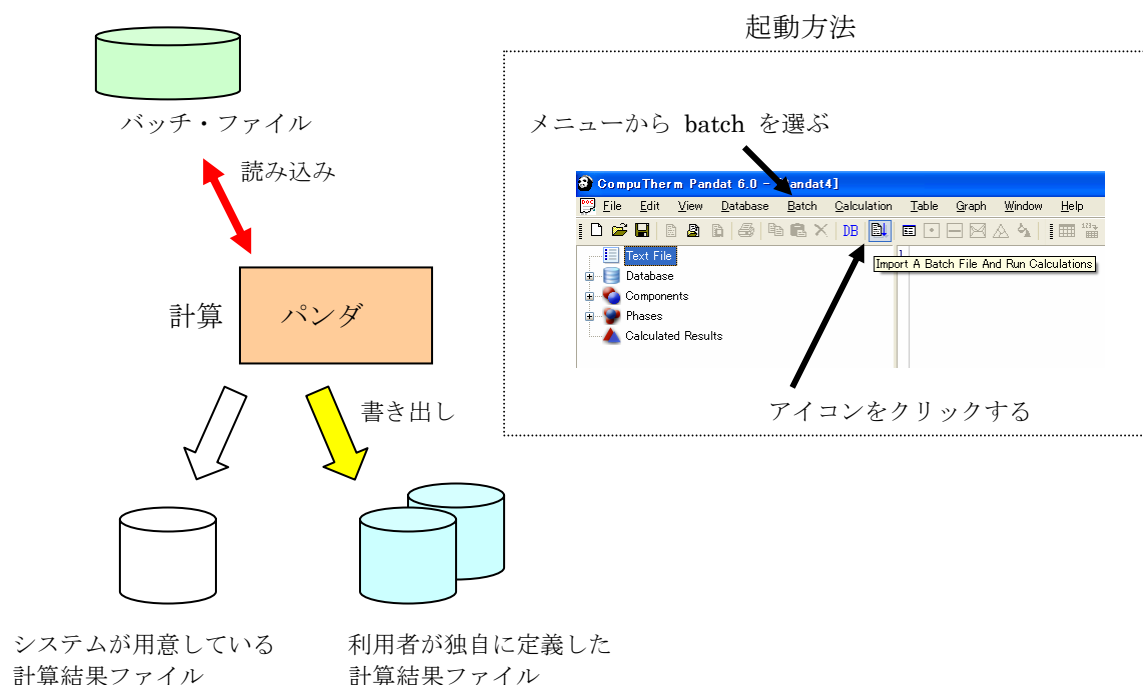
なぜこの機能を作ったのか：

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容易にしたい。特に多元系の合金を計算する場合、合金濃度値を毎度画面入力するのは面倒でした。そこで、画面に入力した値を保存できるようにしました。

何ができるのか：

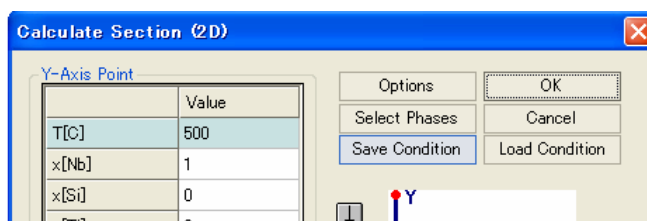
画面入力と同じ計算ができます。この他、画面入計算では得られない熱力学データを外部ファイルに書き出すことが出来ます。例えば、凝固時の分配係数を知りたい場合、晶出相中の元素濃度値を書き出すことが出来ます。さらに、大量の計算を一括して処理出来ます。

動作環境：

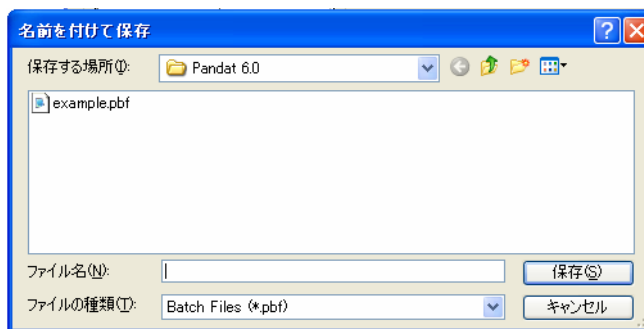


操作例：

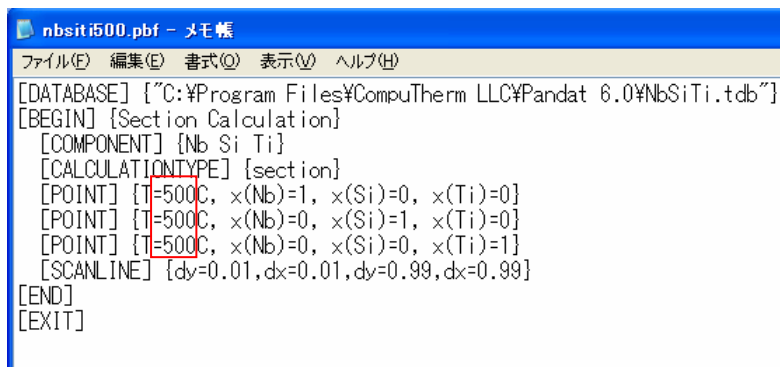
- 1) 例： Nb-Si-Ti 3元系 500℃の等温断面図を通常に計算します。  
単位は、℃、モル fraction とします。
- 2) 計算指示画面の Save Condition ボタンを選択します。



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

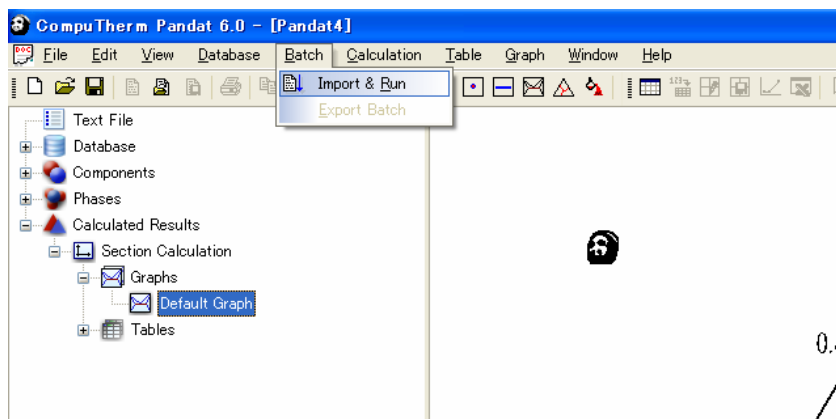


- 4) メモ帳などを  
利用して、この  
テキストファイル  
を開きます。



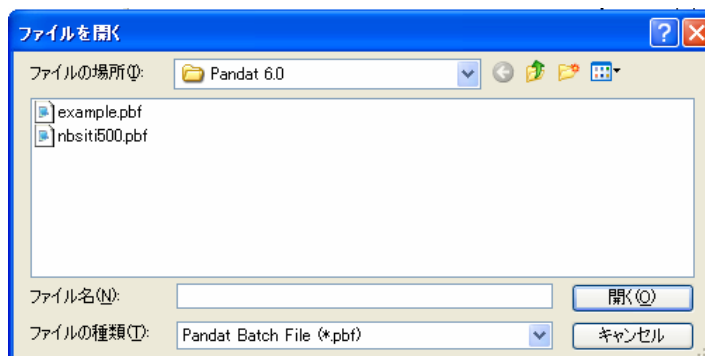
これがバッチ・ファイルの中身です。 500°Cを 800°Cに変えてみましょう。  
500C が3箇所ありますので、800C に変えて上書き保存します。

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



0.8

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



バッチ・ファイル：

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

表 1

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

(続く)

表 1

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

(続く)

表 1

[キーワード]	{値}	説明
[ Output ]	{ fileName="hashi01.dat", format = "T, phaseName, fs, fl, H_Latent" }	<p>必要な場合、 利用者が独自に定義する計算結果ファイルを作れます。</p> <p>作成するファイル名を記述します。もし既に同じ名前のファイルが在れば、上書きされます。</p> <p>一方、ファイル名に ## を含めれば、例えば、hashi##.dat とすれば、##の部分は自動的に2桁の番号が付けられ、上書きを防止します。</p> <p>hashi00.dat hahsi01.dat hashi02.dat ⋮</p> <p>T: 温度 (ケルビン) T(C): 温度 (°C) phaseName: 平衡相の名前</p> <p>fs: 固相率 fl: 液相率 H_Latent: 凝固中の系の潜熱</p>

表2 テーブル入力形式

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

(続く)

表2 テーブル入力形式

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

(続く)

表2 テーブル入力形式

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

記述の注意点：

ライン計算：[CalculationType] {Line} の場合、

[Point] キーワードは2行になります。

1行目は計算開始点を、2行目は計算終了点を記述します。

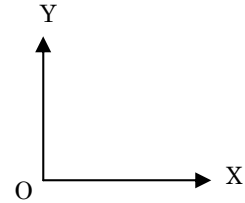
状態図計算：[CalculationType] {Section} の場合、

[Point] キーワードは3行になります。

1行目 Y点の値

2行目 O点の値

3行目 X点の値



バッチファイルに記述する内容は、画面上に入力する内容と一致しています。

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

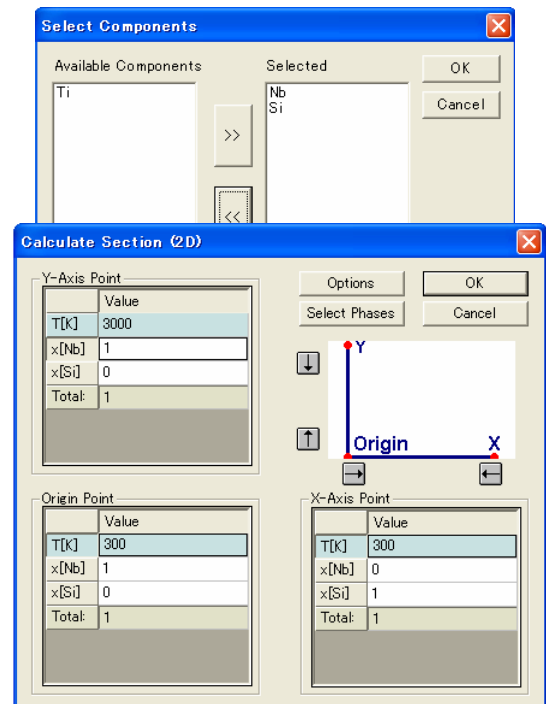
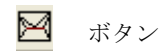
```
[COMPONENT] {Nb Si}
```

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

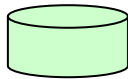
```
[POINT] {T = 300, x(Nb) = 1}
```

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

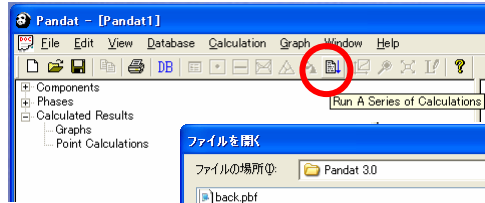
```
[end]
```



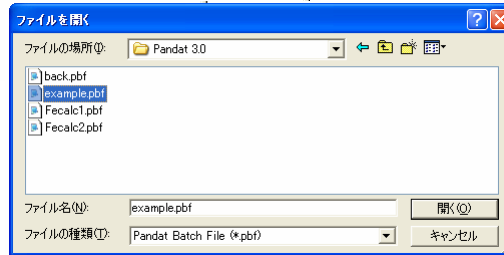
操作の流れ：



① バッチファイルを作成する。

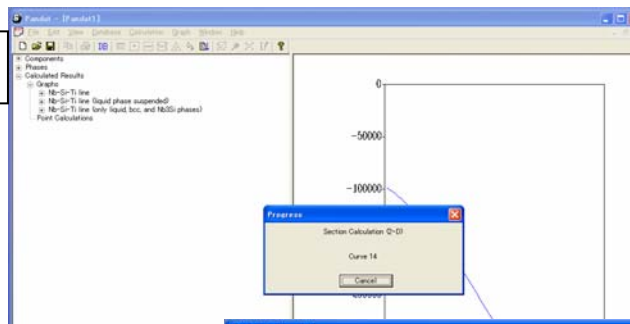


② Pandat から  
バッチファイルを選択する。

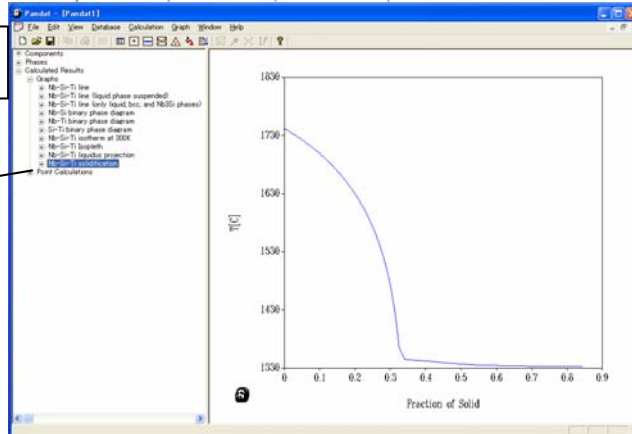


「開く」をクリックすると計算処理を始めます。

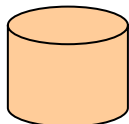
計算処理中



計算終了後



③ 計算タイトルをクリックし、その計算結果図を見る。



④ 利用者が独自に定義した計算結果ファイルを見る。  
ファイル名や各欄にどの値を出力させるかを利用者が指示できます。

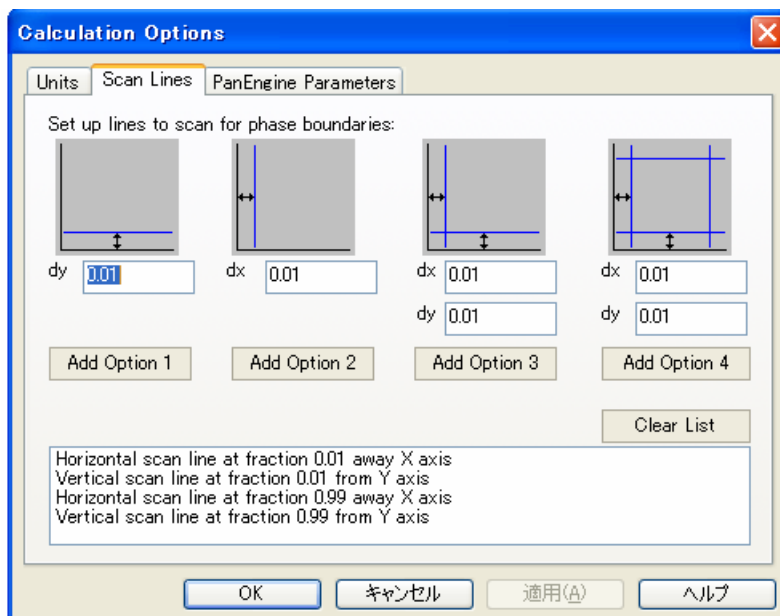
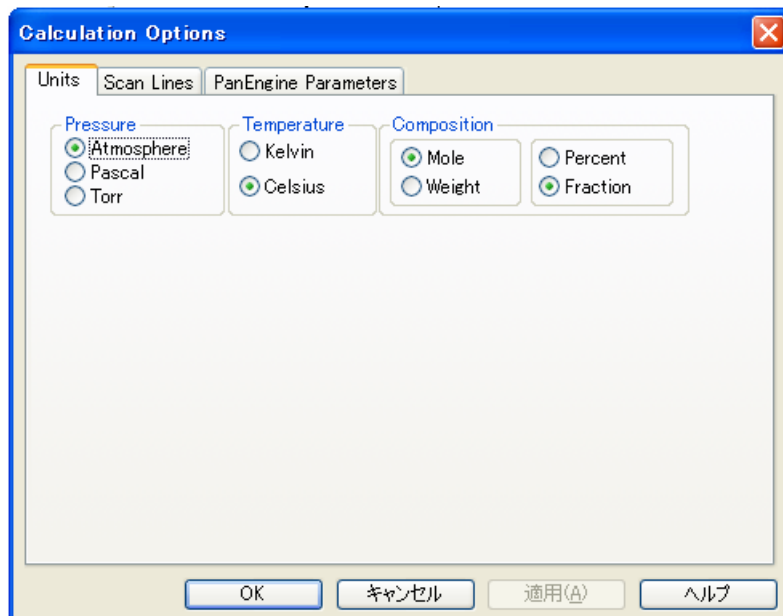
1	phaseName	T	B	fs	fi	D	E	F	G	H	I
225	Liquid+NiSi2	1648.18	0.322123	0.677877	37462.1	0.677877	0.322123				
226	Liquid+NiSi2	1646.58	0.322378	0.677622	37419.9	0.677622	0.322378				
227	Liquid+NiSi2	1644.98	0.322629	0.677371	37366.1	0.677371	0.322629				
228	Liquid+NiSi2	1643.38	0.322877	0.677123	37292.4	0.677123	0.322877				
229	Liquid+NiSi2	1641.78	0.323122	0.676878	37209.9	0.676878	0.323122				
240	Liquid+NiSi2	1640.18	0.323384	0.676636	37168.6	0.676636	0.323384				
241	Liquid+NiSi2	1639.58	0.323644	0.676396	37144.0	0.676396	0.323644				
242	Liquid+NiSi2	1638.98	0.323911	0.676159	37122.7	0.676159	0.323911				
243	Liquid+NiSi2	1638.38	0.324183	0.675927	37104.7	0.675927	0.324183				
244	Liquid+NiSi2	1638.78	0.324461	0.675699	37089.8	0.675699	0.324461				
245	Liquid+NiSi2	1638.63	0.324744	0.675476	37076.3	0.675476	0.324744				
246	Liquid+NiSi2	1638.43	0.325032	0.675258	37064.2	0.675258	0.325032				
247	Liquid+NiSi2	1638.18	0.325325	0.675045	37053.4	0.675045	0.325325				
248	Liquid+NiSi2	1637.88	0.325623	0.674837	37043.8	0.674837	0.325623				
249	Liquid+NiSi2	1637.53	0.325926	0.674634	37035.4	0.674634	0.325926				
250	Liquid+NiSi2	1637.13	0.326233	0.674437	37028.1	0.674437	0.326233				
251	Liquid+NiSi2	1636.68	0.326544	0.674246	37021.8	0.674246	0.326544				
252	Liquid+NiSi2	1636.18	0.326859	0.674061	37016.5	0.674061	0.326859				
253	Liquid+NiSi2	1635.63	0.327178	0.673881	37011.2	0.673881	0.327178				
254	Liquid+NiSi2	1635.03	0.327501	0.673706	37006.8	0.673706	0.327501				
255	Liquid+NiSi2	1634.38	0.327828	0.673536	37003.4	0.673536	0.327828				
256	Liquid+NiSi2	1633.68	0.328159	0.673371	37000.9	0.673371	0.328159				
257	Liquid+NiSi2	1632.93	0.328494	0.673211	36999.4	0.673211	0.328494				
258	Liquid+NiSi2	1632.13	0.328833	0.673056	36998.8	0.673056	0.328833				
259	Liquid+NiSi2	1631.28	0.329176	0.672906	36999.1	0.672906	0.329176				
260	Liquid+NiSi2	1630.38	0.329523	0.672761	36999.2	0.672761	0.329523				
261	Liquid+NiSi2	1629.43	0.329874	0.672621	36999.0	0.672621	0.329874				
262	Liquid+NiSi2	1628.43	0.330228	0.672486	36998.5	0.672486	0.330228				
263	Liquid+NiSi2	1627.38	0.330586	0.672356	36998.2	0.672356	0.330586				
264	Liquid+NiSi2	1626.28	0.330948	0.672231	36997.9	0.672231	0.330948				
265	Liquid+NiSi2	1625.13	0.331315	0.672111	36997.6	0.672111	0.331315				
266	Liquid+NiSi2	1623.93	0.331687	0.672006	36997.1	0.672006	0.331687				

Excel 画面

## 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、℃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、25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 」, 「 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。

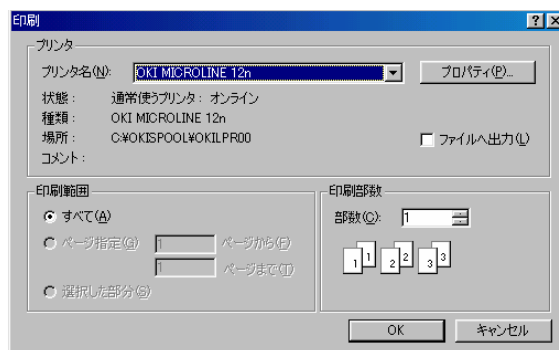
計算結果の作業ファイルを **Workspace** と呼びます。このファイルは Pandat 独自のファイル形式であり、テキストファイルではありません。

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 Ctrl+N」を選択します。

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。



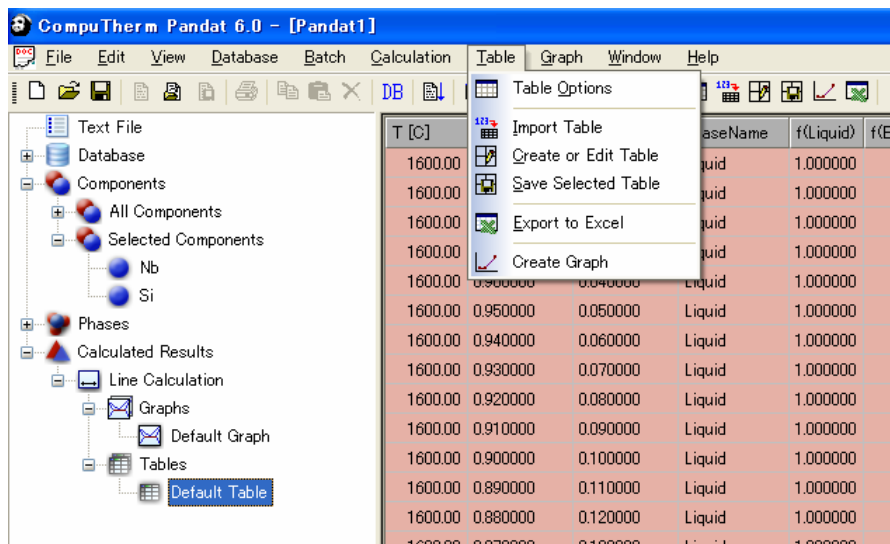
Print Preview を選択すると、プレビューが表示されます。

Close ボタンをクリックすると元に戻れます。

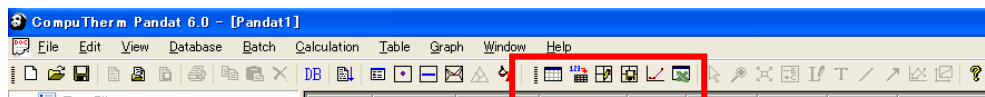
Print Setup を選択すると、「プリンターの設定」画面が表示されます。

## テーブル機能

Pandat 5.0 からテーブル機能が新規に追加されました。Pandat 6.0 では各種熱力学データを Table 機能を用いて表示することができるようになりました。Table メニューには Table Options, Import, Edit, Save, Excel, Create Graph が用意されています。Table メニューは下図の通りです。



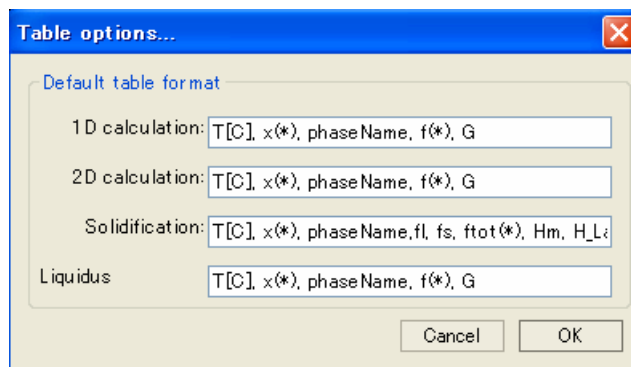
ツールバーにも各アイコンが用意されています。但し、Table メニューとツールバーともに、Explorer window において Tables が選択された時にのみ有効となります。



### 1. Table Options

Pandat は下記の計算を行うと自動的にテーブルを作ります。

ライン計算 (1D)、状態図計算 (2D)、液相面計算、凝固計算  
各計算時のテーブル内容 (format) を Table Options で定義できます。

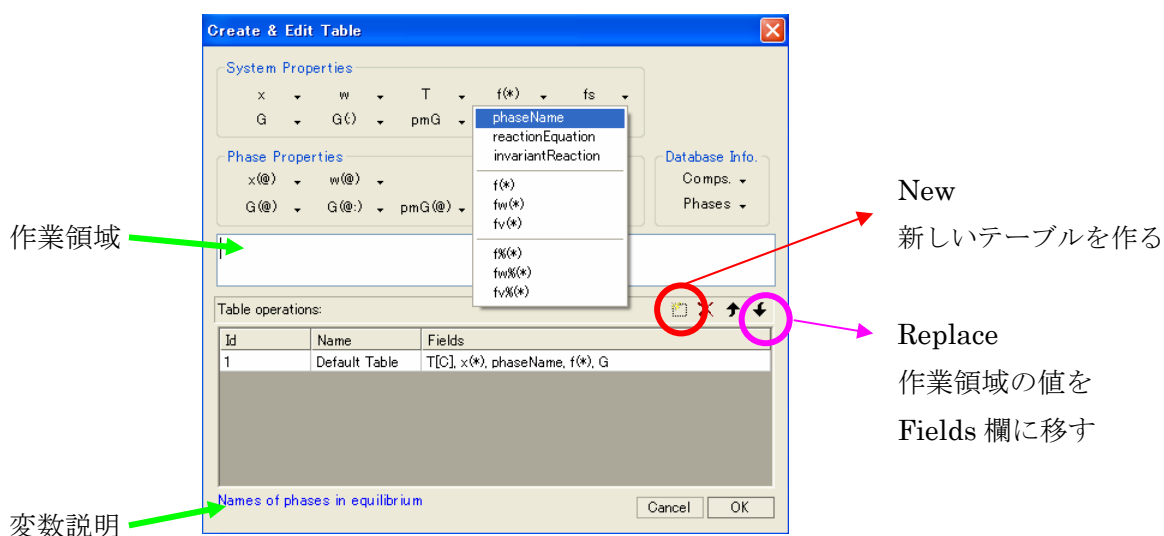


## 2. Edit Tables

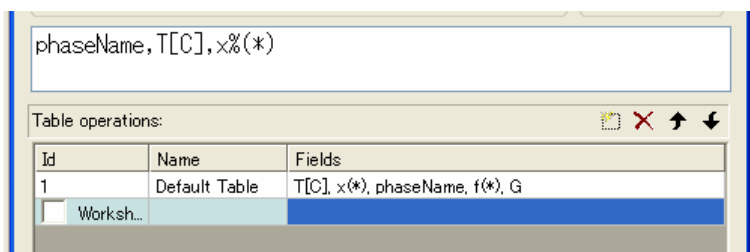
計算後、Pandant が自動的に作成したテーブルを画面上で見ても、「他の値を見たい」「単位 mass  $\leftrightarrow$  mol を変えたい」ときにこの機能を利用します。注意：Default Table を削除・変更しないでください。Default table 欄に定義されている変数が現在数値表テーブルとして表示され、グラフ表示もこの変数が用いられています。通常、新規にテーブルを定義します。

変数の一覧は表 3 を参照してください。

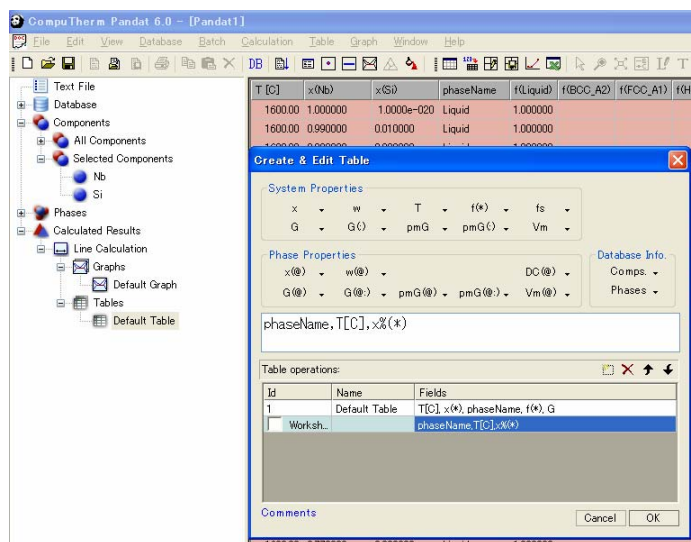
ここで選択した変数が作業領域に表示されます。



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



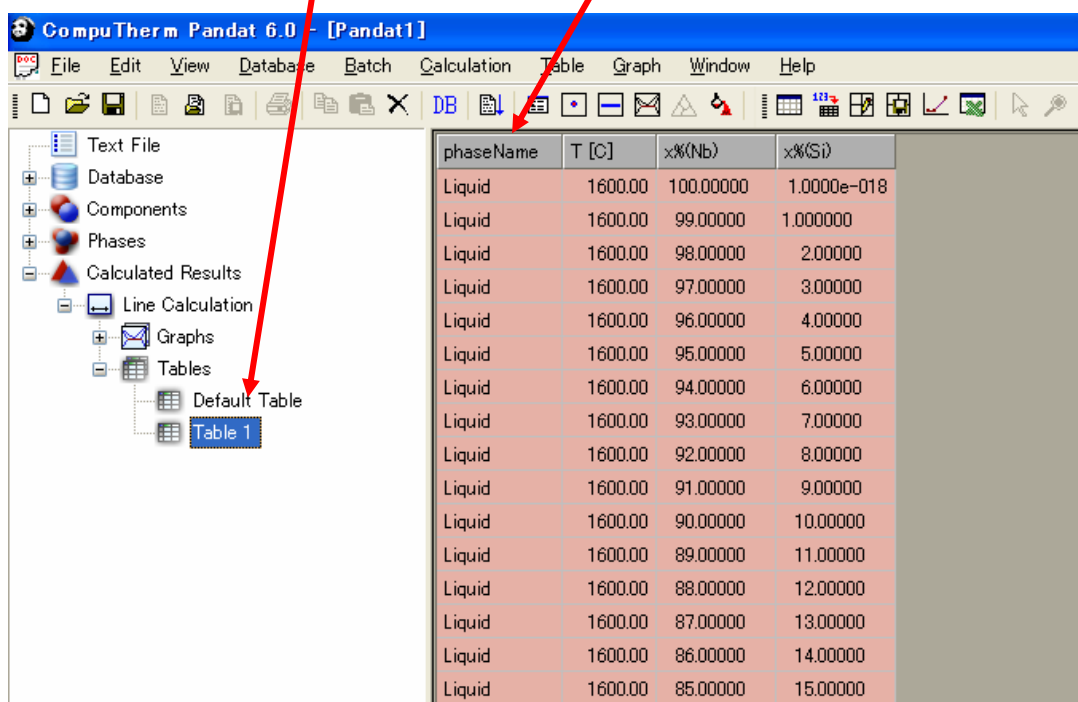
Replace ボタンをクリックすると作業領域の変数が Fields 欄に移されます。



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 Table1 と付けられます。

定義した変数は  
PhaseName, T[C], x%(\*) としたため  
これらの値が表示されます。



The screenshot shows the CompuTherm Pandat 6.0 software interface. The left sidebar displays a tree view with folders for Text File, Database, Components, Phases, Calculated Results, Line Calculation, Graphs, and Tables. Under the Tables folder, 'Default Table' and 'Table 1' are visible. A red arrow points from the text above to 'Table 1'. The main window displays a table with the following data:

phaseName	T [C]	x%(Nb)	x%(Si)
Liquid	1600.00	100.00000	1.0000e-018
Liquid	1600.00	99.00000	1.000000
Liquid	1600.00	98.00000	2.000000
Liquid	1600.00	97.00000	3.000000
Liquid	1600.00	96.00000	4.000000
Liquid	1600.00	95.00000	5.000000
Liquid	1600.00	94.00000	6.000000
Liquid	1600.00	93.00000	7.000000
Liquid	1600.00	92.00000	8.000000
Liquid	1600.00	91.00000	9.000000
Liquid	1600.00	90.00000	10.000000
Liquid	1600.00	89.00000	11.000000
Liquid	1600.00	88.00000	12.000000
Liquid	1600.00	87.00000	13.000000
Liquid	1600.00	86.00000	14.000000
Liquid	1600.00	85.00000	15.000000

このように各種熱力学量をテーブルを介して画面表示することが出来ます。

表3 Create &amp; Edit Table 画面における選択肢一覧とそれぞれのコメント

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

表3 Create &amp; Edit Table 画面における選択肢一覧とそれぞれのコメント (続)

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

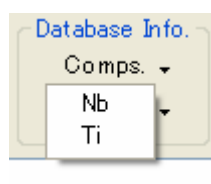
表3 Create &amp; Edit Table 画面における選択肢一覧とそれぞれのコメント (続)

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

Database Info.

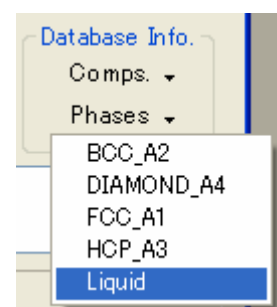
Comps.

現在選択中の元素名



Phases

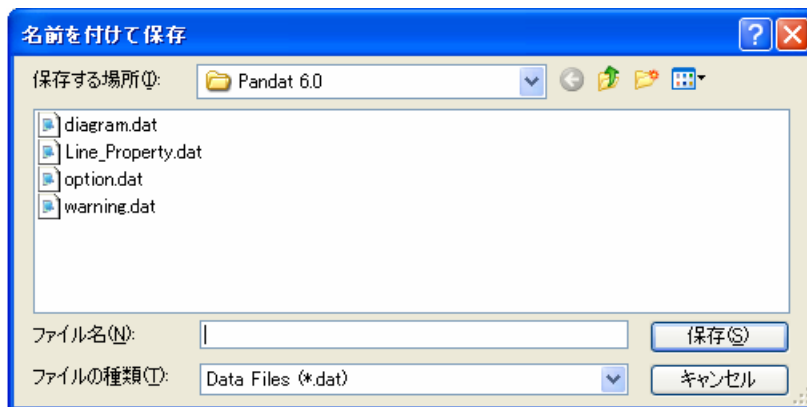
現在選択中の相名



### 3. Save Table

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

ファイルの1行目には変数名が書き込まれます。 列はタブで区切られます。



画面表示中の値を  
コピーできます。

メニュー Edit の  
Select All  
Copy  
を利用できます。

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

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

### 4. Excel

テーブル値を直接 Excel に貼り付けます。

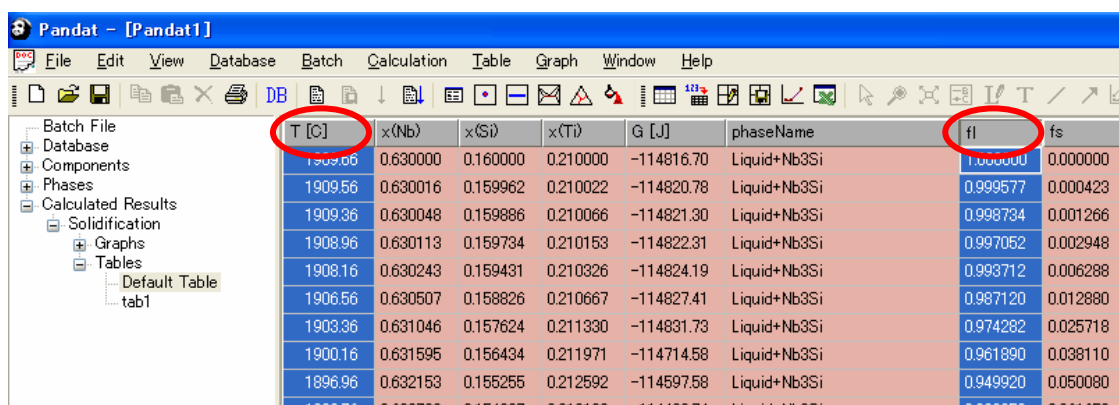
## 5. Create Graph

画面表示されている数値テーブルにおいて、2つ以上の列を選択することでその図を表示させることができます。

最も左側に選択した列がX軸となります。 右側に選択した列がY軸となります。

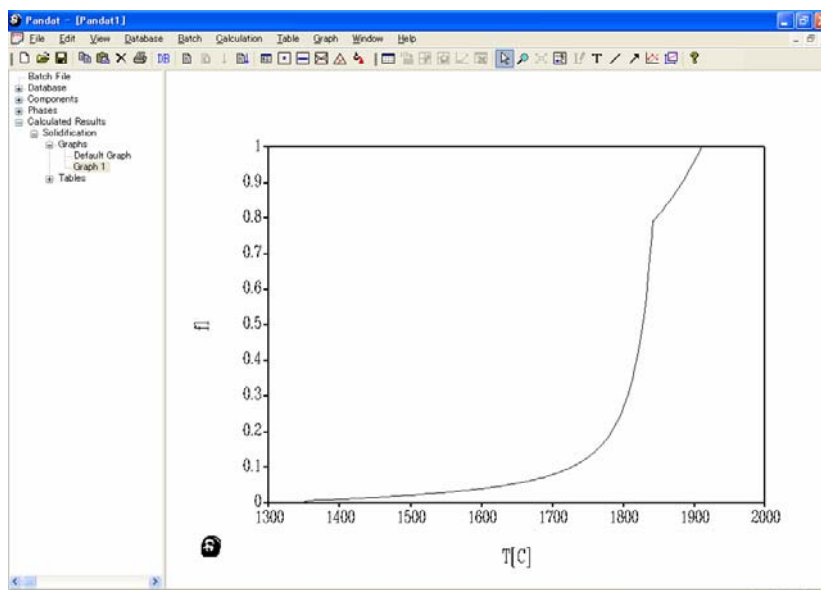
列を指定するにはタイトル行をクリックします。2列目を指定する際には **Ctrl** キーを押しながらタイトル行をクリックします。

そして **Table** メニュー → **Create Graph** を行います。



T [C]	x(Nb)	x(Si)	x(Ti)	G [J]	phaseName	fl	fs
1909.06	0.630000	0.160000	0.210000	-114816.70	Liquid+Nb3Si	1.000000	0.000000
1909.56	0.630016	0.159962	0.210022	-114820.78	Liquid+Nb3Si	0.999577	0.000423
1909.36	0.630048	0.159886	0.210066	-114821.30	Liquid+Nb3Si	0.998734	0.001266
1908.96	0.630113	0.159734	0.210153	-114822.31	Liquid+Nb3Si	0.997052	0.002948
1908.16	0.630243	0.159431	0.210326	-114824.19	Liquid+Nb3Si	0.993712	0.006288
1906.56	0.630507	0.158826	0.210667	-114827.41	Liquid+Nb3Si	0.987120	0.012880
1903.36	0.631046	0.157624	0.211330	-114831.73	Liquid+Nb3Si	0.974282	0.025718
1900.16	0.631595	0.156434	0.211971	-114714.58	Liquid+Nb3Si	0.961390	0.038110
1896.96	0.632153	0.155255	0.212592	-114597.58	Liquid+Nb3Si	0.949920	0.050080
1893.76	0.632700	0.154087	0.213199	-114480.74	Liquid+Nb3Si	0.939950	0.061850

テーブルから  
作成した図



## 6. Import

この機能を利用してデータ（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。**

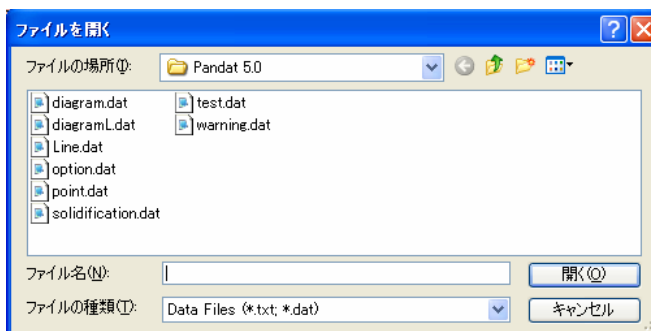
データの列は空白文字もしくはタブでセパレートします。

まずデータファイルを作ります。

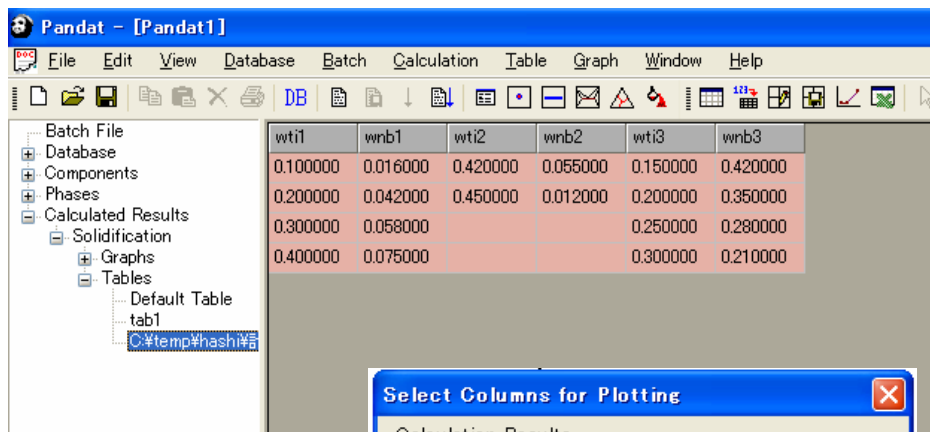


wti1	wnb1	wti2	wnb2	wti3	wnb3
0.10	0.016	0.42	0.055	0.15	0.42
0.20	0.042	0.45	0.012	0.20	0.35
0.30	0.058			0.25	0.28
0.40	0.075			0.30	0.21

計算後、Import を実行します。



Pandat に取り込む  
ことが出来ます。



このデータファイル名は  
図を作成する際に Available Tables 項にて  
選択でき、ファイル1行目に定義した  
「列の名前」が表示されます。  
図のX変数とY変数をどれにするのか  
ここで選択することが出来ます。

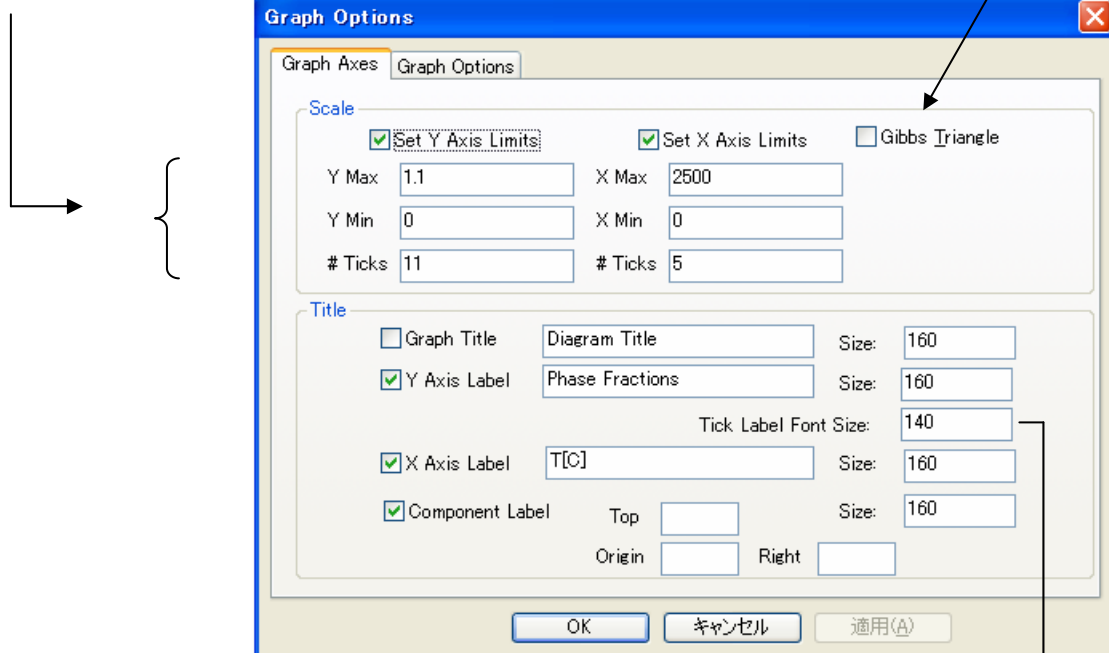
## グラフ機能1 グラフオプション



計算結果の図をカスタマイズできます。

1. 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

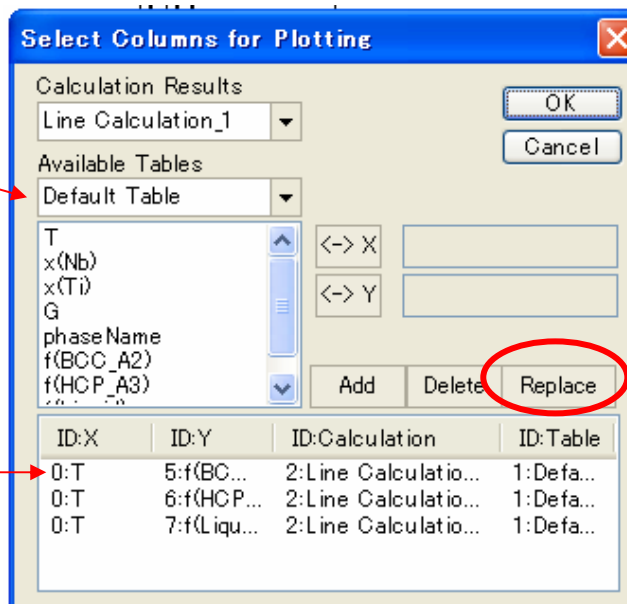
## プロットセットアップ画面

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。

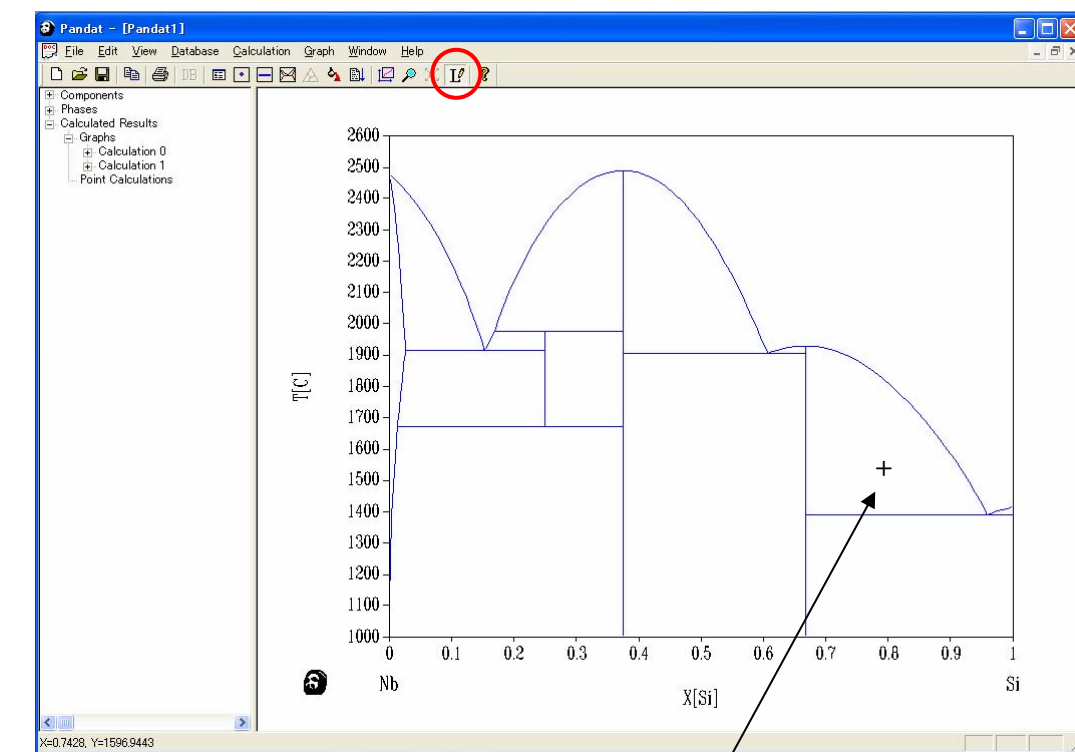
モル比率 (mol fraction, x) を重量比率(mass fraction, w) に変えたい場合やその逆の場合、新規にテーブルを作成し、表示したい変数をそのテーブル中に定義する必要があります。操作例は44ページを参照ください。

## 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、名前 BCC を  $\alpha$  にテキスト変換できます。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。

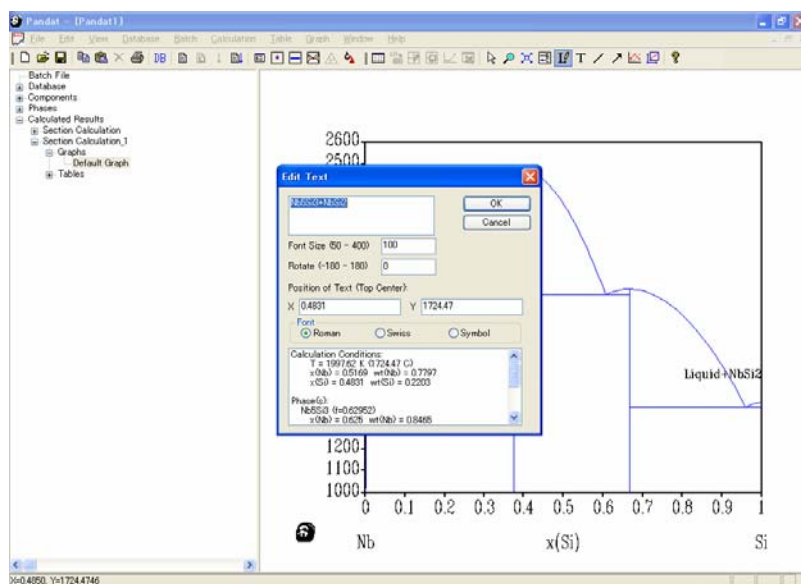
 アイコンを1回クリックするとラベルモードがオンになります。もう1回クリックするとオフに戻ります。もしくはメニュー「Graph」→「Label Mode」を選択するとラベルモードがオンになり、もう一度選択するとオフになります。




マウスの位置座標値が  
ステータスバーに表示されます。

- ① 知りたい位置においてマウスを一度クリックします。

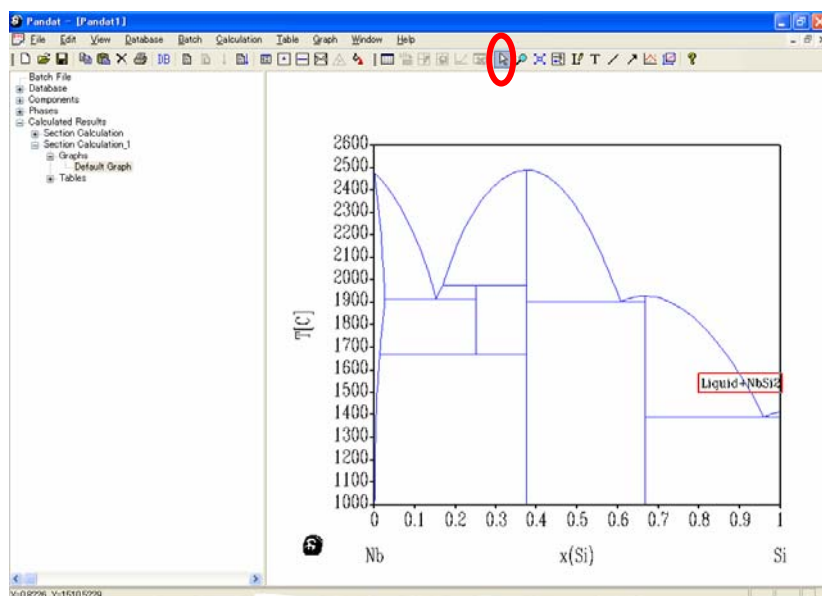
- ② 平衡計算した後、Edit Text 画面が表示されます。



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：

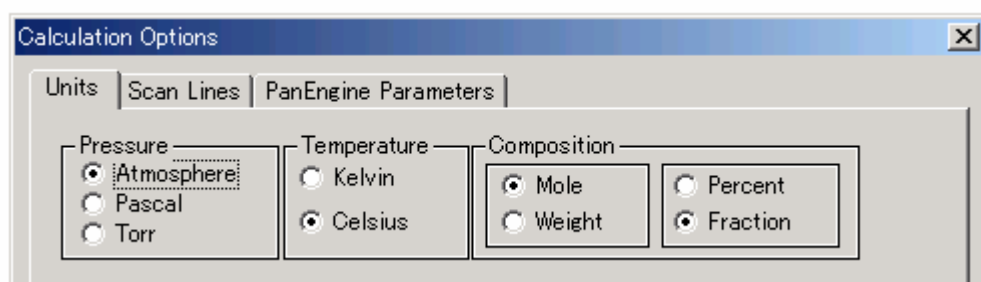
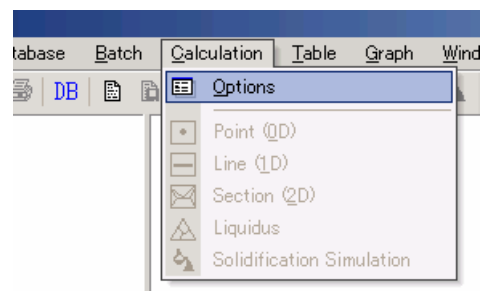
**Windows** のポストスクリプト・プリンター・ドライバーを経由させ、印刷イメージをファイルに保存します。「**File**」→「**Print**」→ ポストスクリプト・プリンターを選択し、「ファイルへ出力」をチェックします→「**OK**」を選択します。ファイル名を指定し、ポストスクリプトファイルを作成します。

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。

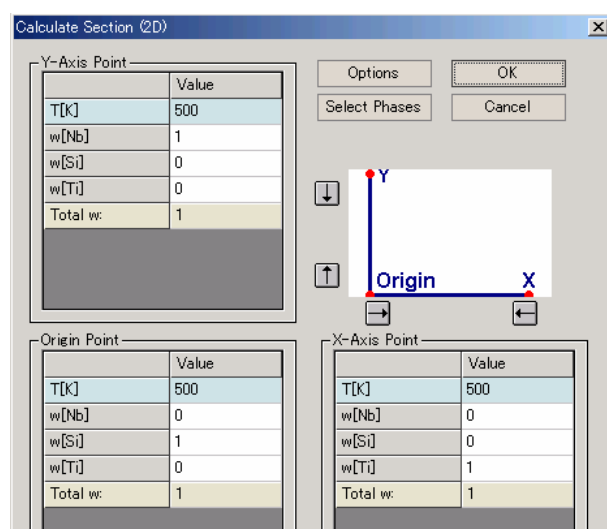
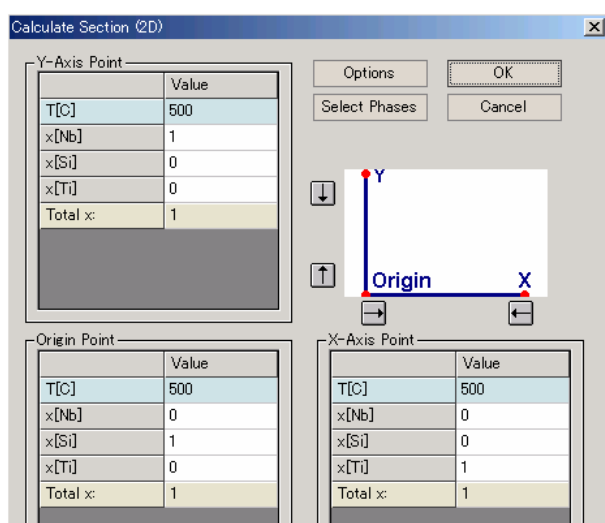
## お勧めの操作方法

1. Pandat 6.0 を起動したら、  
単位を決めましょう。

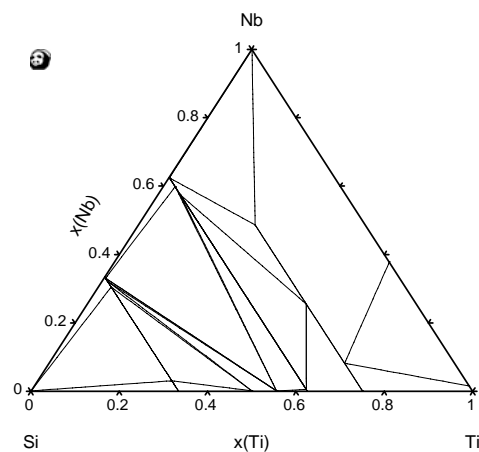
計算状態図をイメージし、  
温度はケルビンか°Cか、  
濃度は mol か mass か、  
選択して OK ボタンをクリックします。



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。

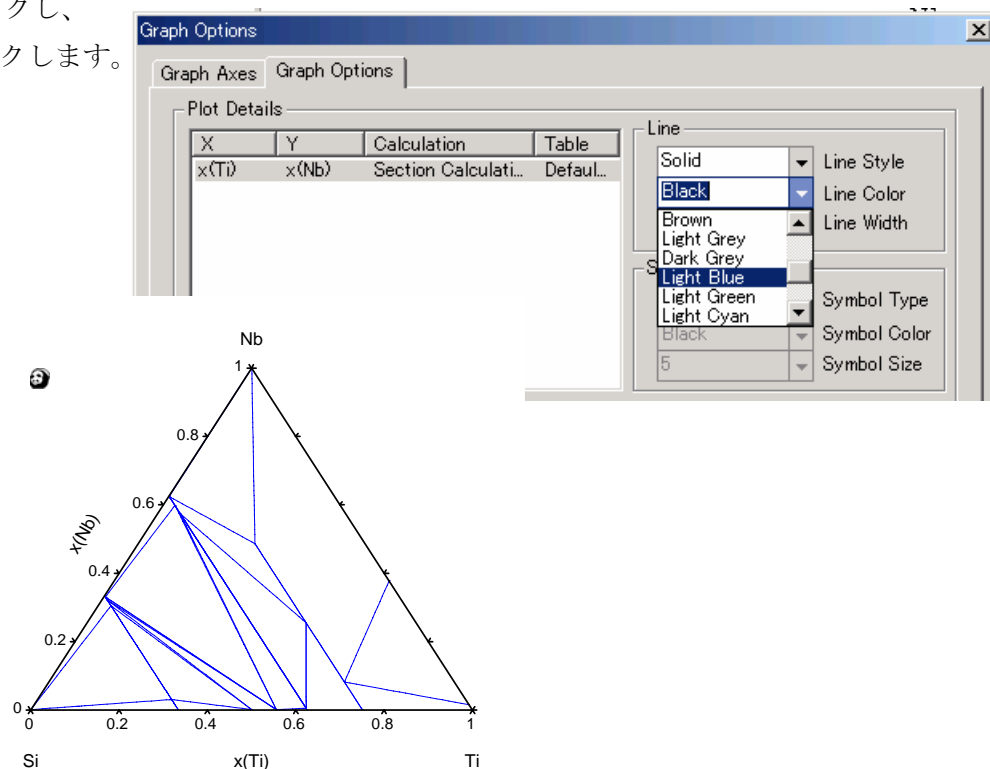


2. Nb-Si-Ti 3元系 500°C  
等断面図の計算結果  
(モル単位)



## 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。

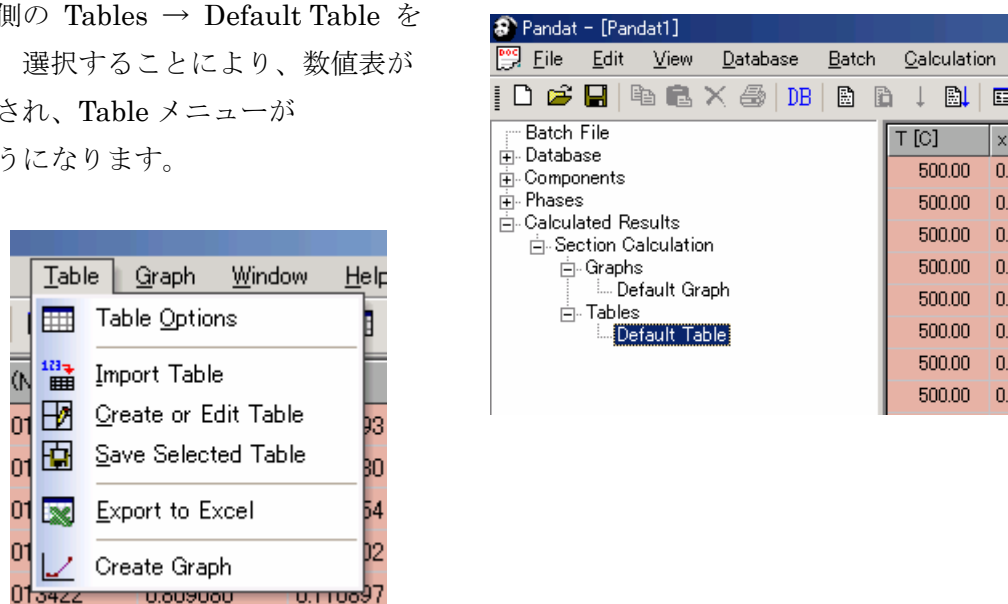
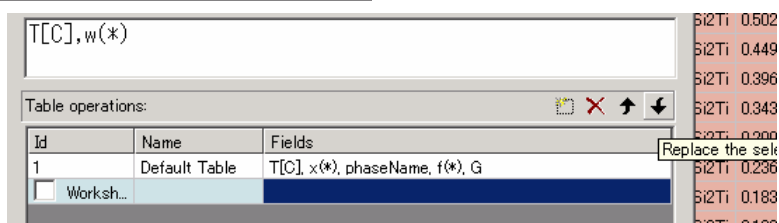
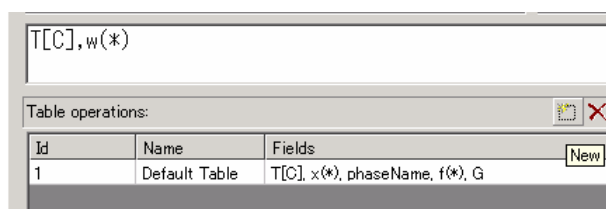


Table → Create Edit Table を選択します。  
Default Table のみが存在します。

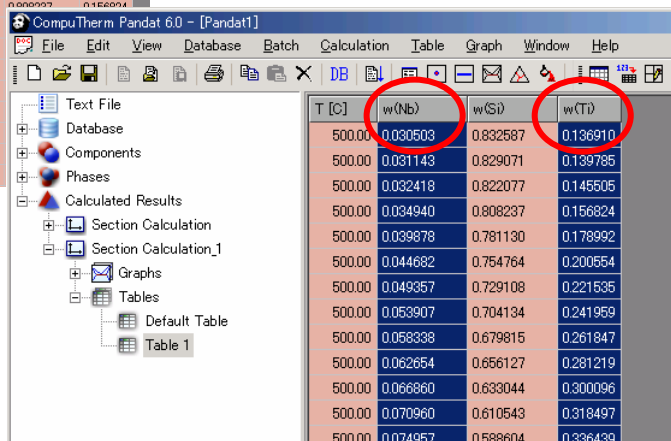
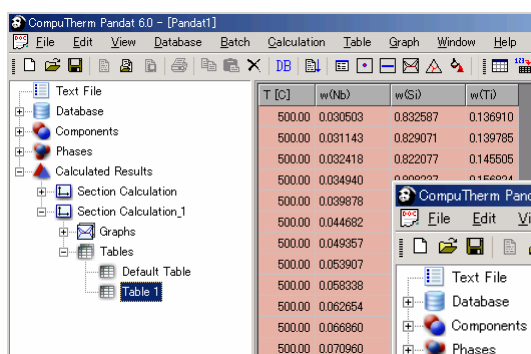
まず温度 T[C]を選択します。  
作業領域に変数 T[C] が記録されます。  
次に、重量濃度 W(\*) を選択します。  
作業領域が T[C],w(\*) となります。

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



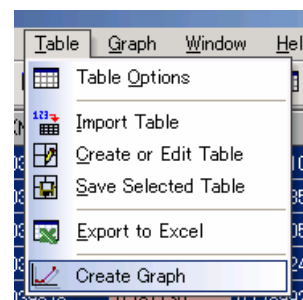
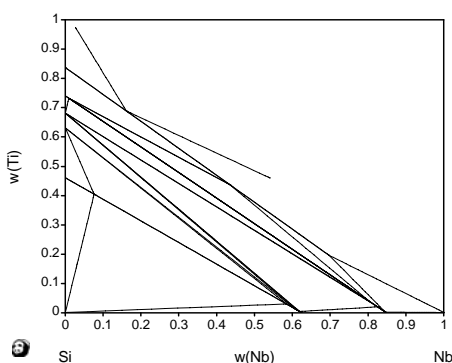
OK ボタンをクリックすると、  
テーブル名 Table1 が自動的に  
付けられ、その数値が表示されます。


Id	Name	Fields
1	Default Table	T[C], x(*), phaseName, f(*), G
	Worksh...	T[C],w(*)




グラフ表示させる  
2列を Ctrl キーを  
利用して選びます。


Table → Create Graph を選択します。

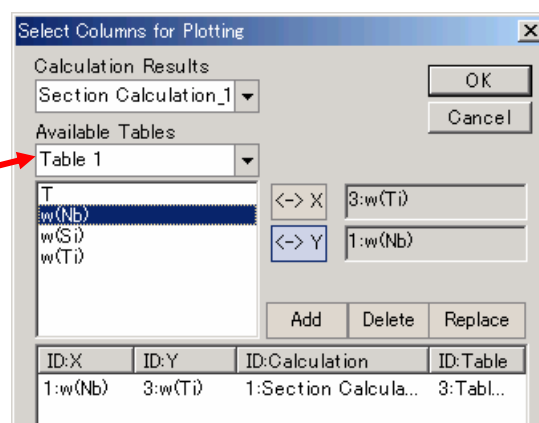



 ボタンもしくは Graph → Plots Setup を選択し、表示させる軸変数を決めます。

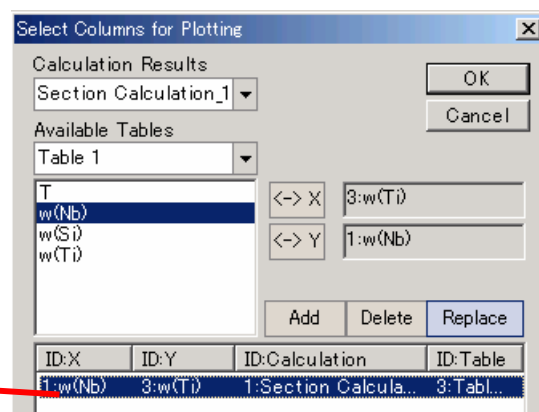
Available Tables から Table1 を選択します。

W(Ti) を選択し、中央の  ボタンをクリックします。

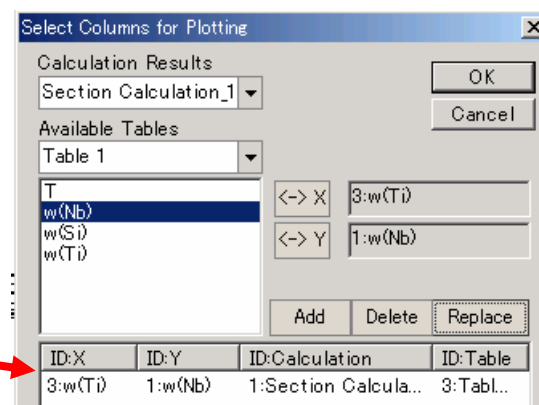
W(Nb) を選択し、中央の  ボタンをクリックします。



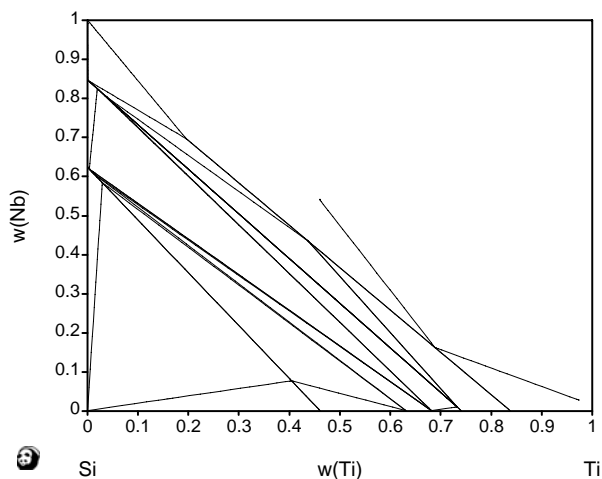
表示中の行を選択し、 ボタンをクリックします。



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

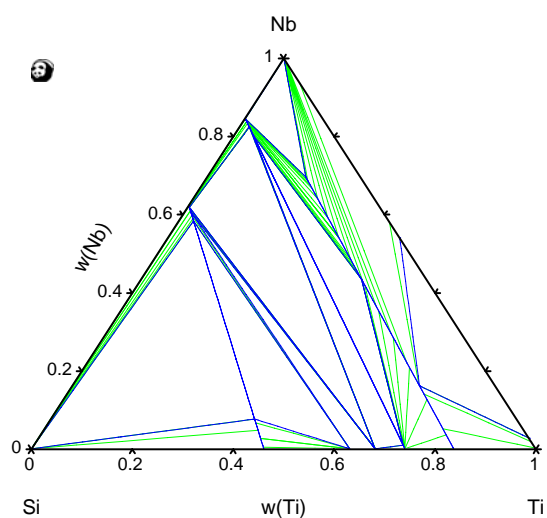
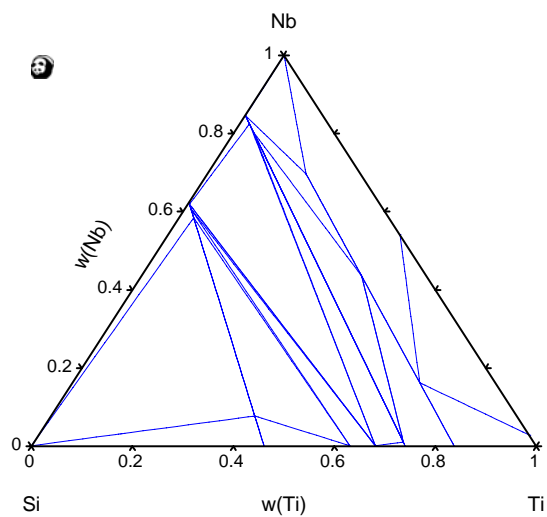


OK ボタンをクリックすると  
 X 軸が mass fraction of Ti  
 Y 軸が mass fraction of Nb の  
 図が得られます。



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

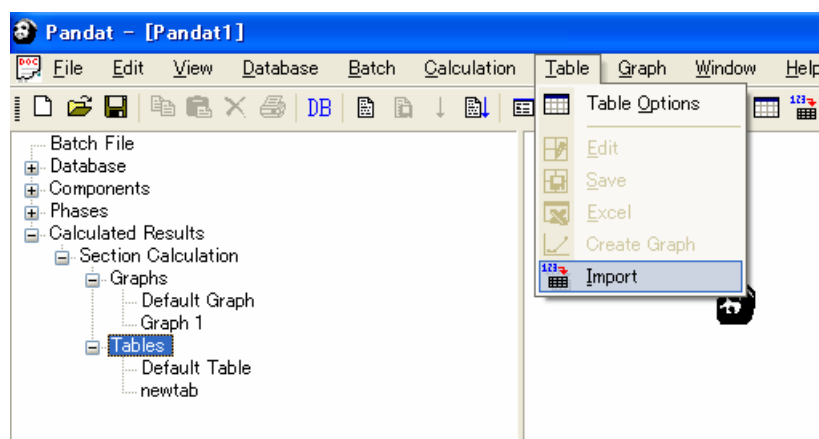
計算状態図を表示後に

画面左側の Tables を

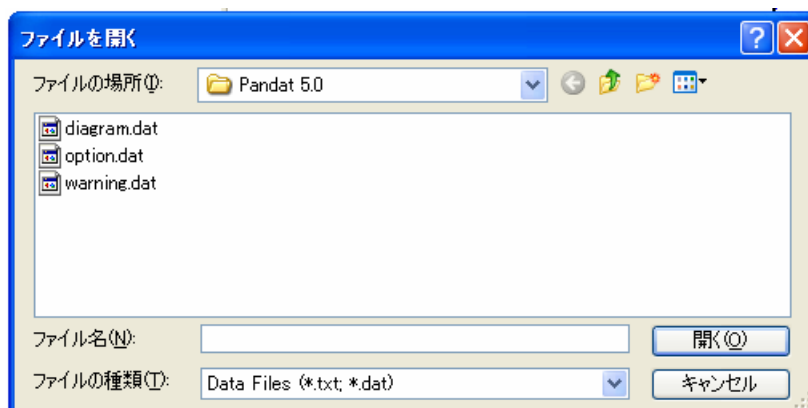
クリックし、その後、図上を再度クリックします。

Table → Import メニュー

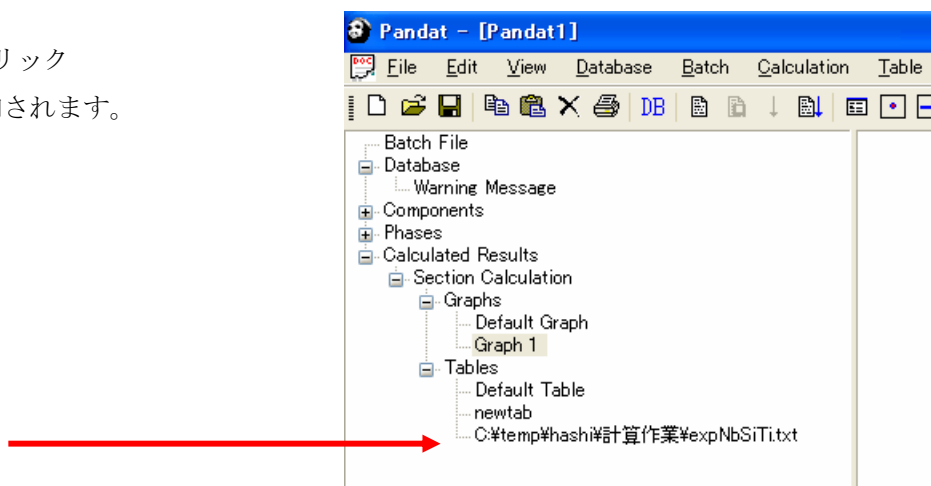
が利用可能となります。



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。

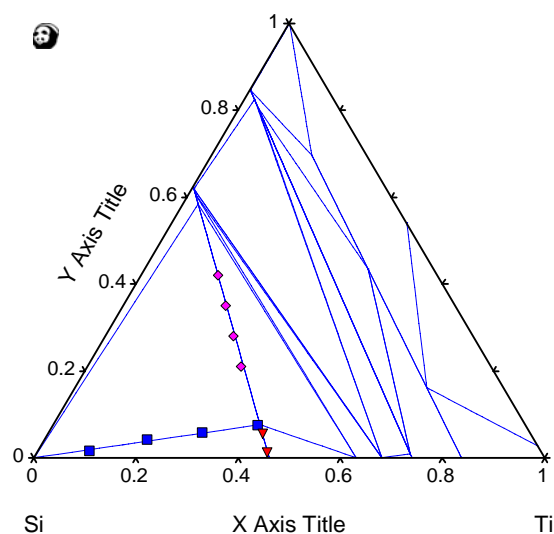
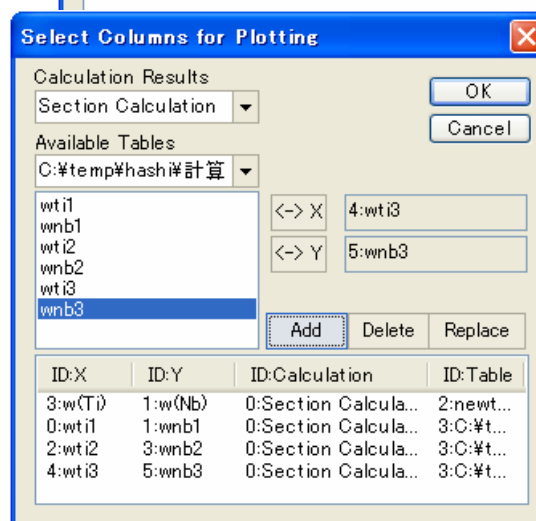
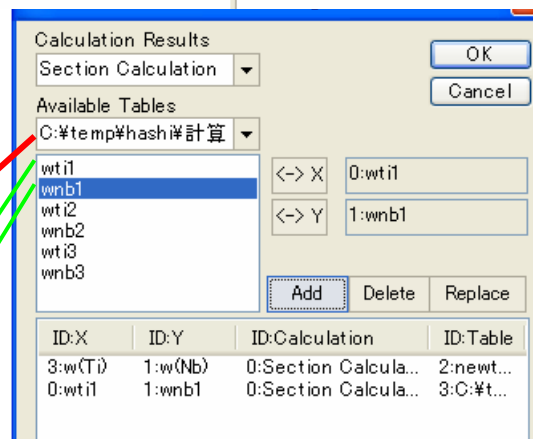
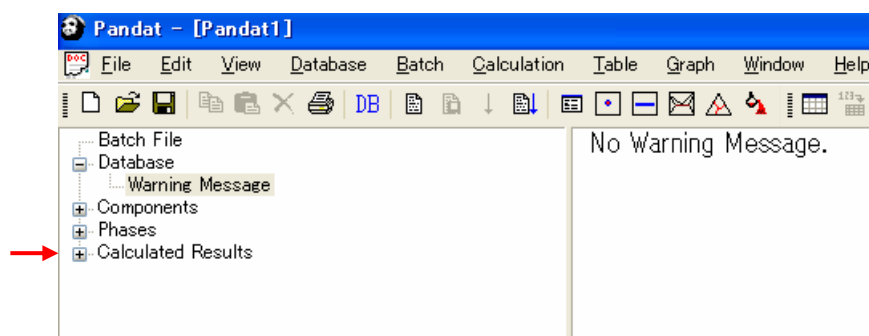
画面上を一度クリックした後、  
 Graph → Plots Setup メニュー  
 を選択します。

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。

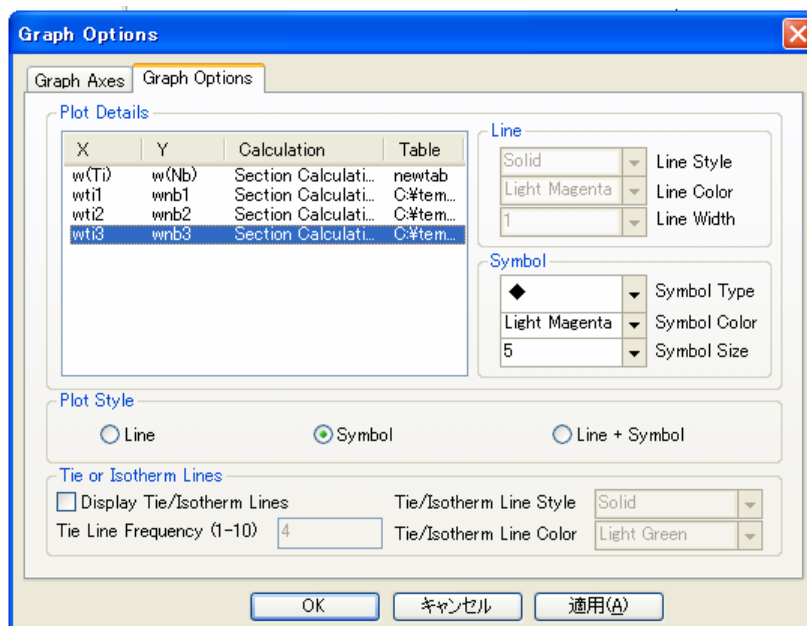
OK ボタンをクリックすると  
 計算状態図上に、  
 1組目の4個のデータが青色の■印で、  
 2組目の2個のデータが赤色の▼印で、  
 3組目の4個のデータが桃色の◆印で、  
 表示されます。



印の色や大きさは

Graph → Configure

Graph Options 画面にて指定 (変更) できます。



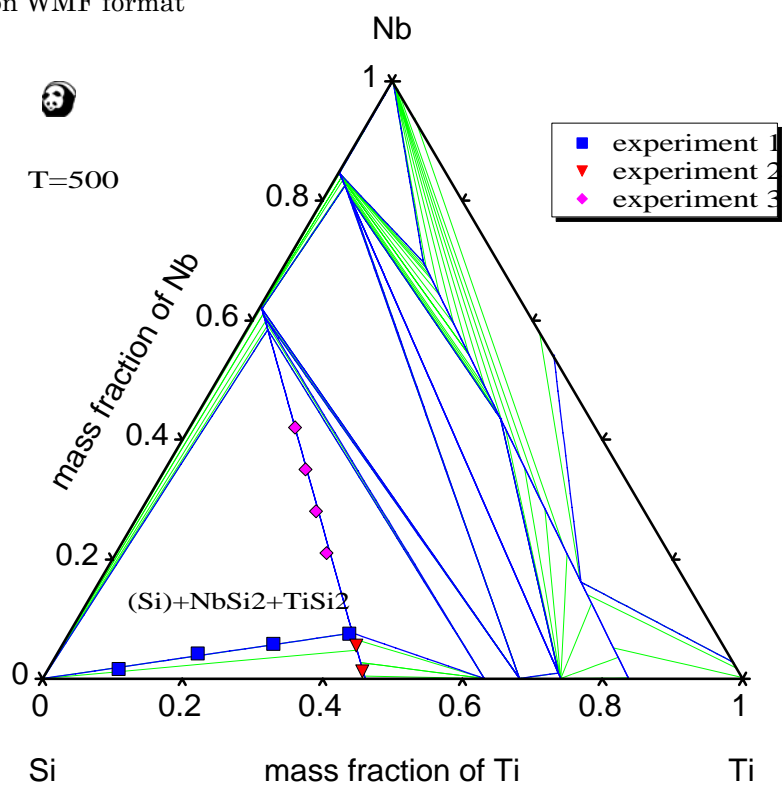
凡例は

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]	x[Nb]	x[Si]	x[Ti]	G [J]	phaseName
500.00	0.010000	0.886869	0.103131	-40215.76	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.010193	0.884686	0.105121	-40598.67	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.010579	0.880318	0.109103	-41364.48	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.011351	0.871584	0.117065	-42964.10	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.012695	0.854114	0.132991	-45959.33	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.014440	0.836645	0.148916	-49022.57	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.015984	0.819175	0.164841	-52085.81	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.017528	0.801706	0.180766	-55149.05	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.019072	0.784236	0.196692	-58212.28	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.020616	0.766767	0.212617	-61275.52	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.022160	0.749297	0.228542	-64338.76	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.023705	0.731828	0.244468	-67401.99	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.025249	0.714359	0.260393	-70465.23	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.026793	0.696889	0.276318	-73528.47	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.028337	0.679419	0.292244	-76591.71	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.029109	0.670684	0.300206	-78123.33	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.029302	0.668501	0.302197	-78506.23	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.029399	0.667409	0.303192	-78697.68	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.029464	0.666667	0.303869	-78827.76	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.029464	0.666667	0.303869	-78827.76	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.029618	0.666667	0.303515	-78822.31	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.031232	0.666667	0.302101	-78800.82	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2

T [C]	x[Nb]	x[Si]	x[Ti]	G [J]	phaseName
500.00	0.010000	0.886869	0.103131	-40215.76	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.010193	0.884686	0.105121	-40598.67	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.010579	0.880318	0.109103	-41364.48	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.011351	0.871584	0.117065	-42964.10	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.012695	0.854114	0.132991	-45959.33	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.014440	0.836645	0.148916	-49022.57	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.015984	0.819175	0.164841	-52085.81	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.017528	0.801706	0.180766	-55149.05	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.019072	0.784236	0.196692	-58212.28	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.020616	0.766767	0.212617	-61275.52	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.022160	0.749297	0.228542	-64338.76	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.023705	0.731828	0.244468	-67401.99	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.025249	0.714359	0.260393	-70465.23	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.026793	0.696889	0.276318	-73528.47	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.028337	0.679419	0.292244	-76591.71	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.029109	0.670684	0.300206	-78123.33	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.029302	0.668501	0.302197	-78506.23	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.029399	0.667409	0.303192	-78697.68	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.029464	0.666667	0.303869	-78827.76	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.029464	0.666667	0.303869	-78827.76	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.029618	0.666667	0.303515	-78822.31	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2
500.00	0.031232	0.666667	0.302101	-78800.82	DIAMOND_A4+TiS2+NbS2

もしくはメニュー Edit の  
Select All

Copy を利用できます。

そして

メニュー Table の

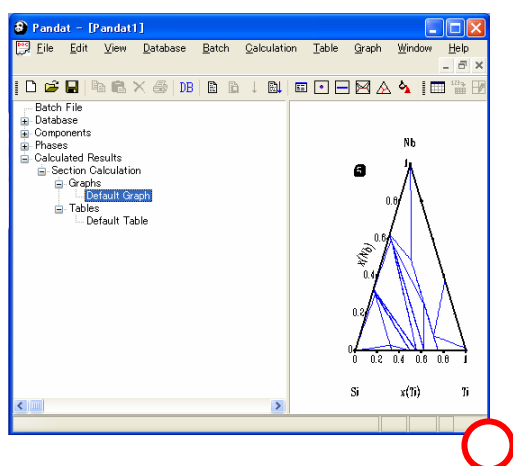
Export to Excel を実行します。

	A	B	C	D	E	F	G
1							
2		500	0.01	0.886869	0.103131		
3		500	0.010193	0.884686	0.105121		
4		500	0.010579	0.880318	0.109103		
5		500	0.011351	0.871584	0.117065		
6		500	0.012695	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	0.714359	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							

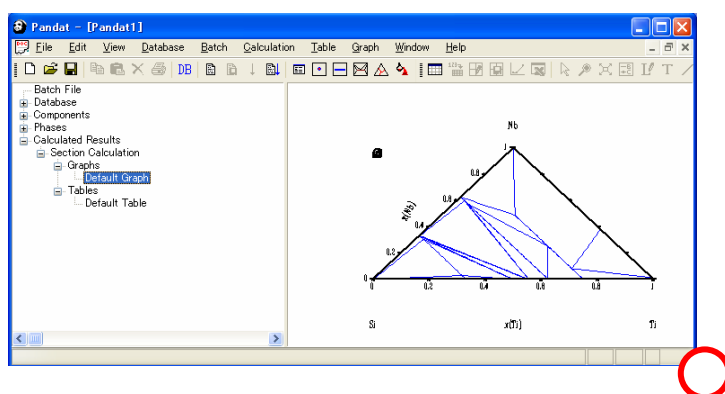
#### 4. 正三角形の図を表示させる方法

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。

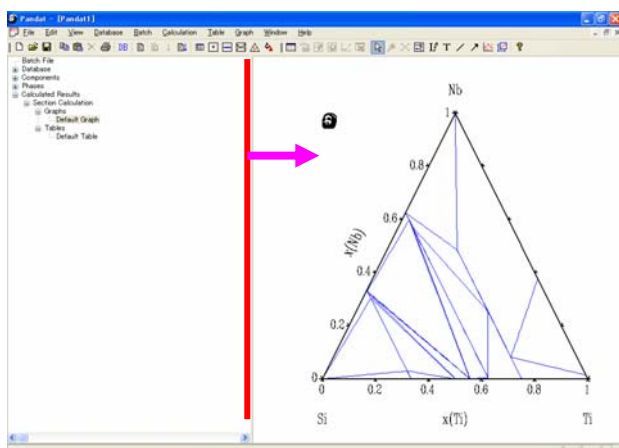
- 4-1 Windows 枠の右下を  
左（もしくは下）に移動させると  
図全体が横に縮小します。  
(これは Windows の機能)



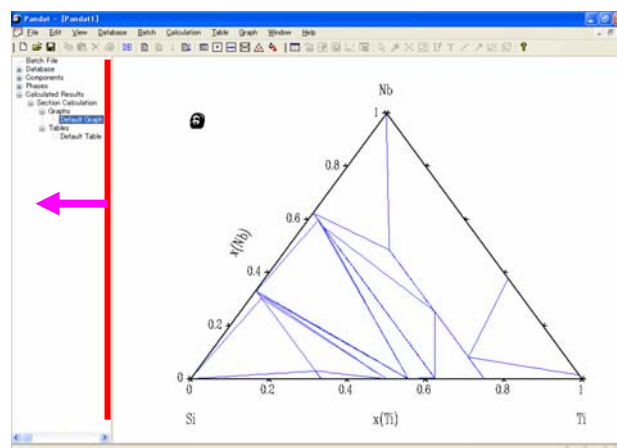
- Windows 枠の右下を  
右（もしくは上）に移動させると  
図全体が横に拡大します。  
(これは Windows の機能)



- 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

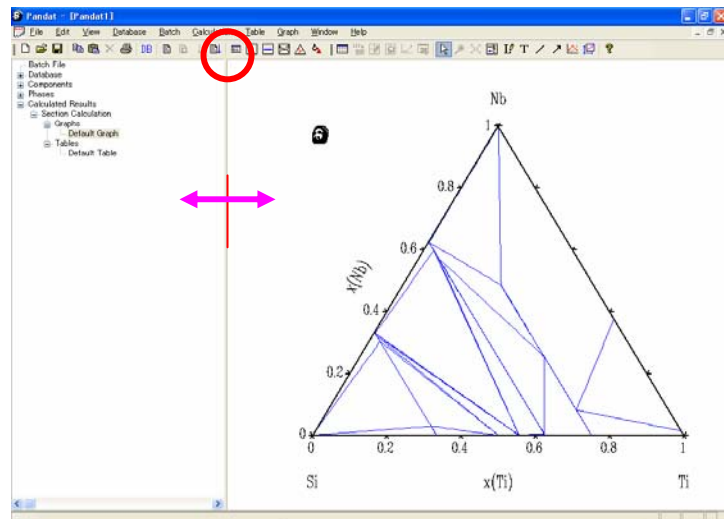
Pandat をフルスクリーン（最大化）表示させます。

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

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

Type_Definition ( GES A_P_D BCC_A2 Magnetic -1 0.4!
Type_Definition * GES A_P_D FCC_A1 Magnetic -3 0.28!
Type_Definition ) GES A_P_D HCP_A3 Magnetic -3 0.28!

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

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

```

## 熱力学データベース作成例

hashiABC.tdb

```

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

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

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

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

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

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

```

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

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

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

必要とされる定義1) 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2) 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3) の例 計算式で用いる定数

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

必要とされる定義4) 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.

## メニュー一覧

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

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

Graph	Window	Help
Plot Setup	Cascade	Pandat Help
Configure	Tile	Dongle Infomation
Copy WMF Format	Arrange Icons	About Pandat
Select	Split	
Zoom Mode	Window 1,2,...	
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。

### 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.

## バッチファイルPBFの例

```

////////////////////////////////////
// Pandat Batch File Example //
// //
// Copyright 2005 CompuTherm LLC // example.pbf
// //
// October 1, 2005 //
////////////////////////////////////

// Refer Pandat 6.0 manual on the batch command keywords for detail
// Any line beginning with "/" is a comment line and will be ignored
// General format: [keyword] {value list}
// All keywords are case insensitive
// [Begin], [begin], [BEGIN], etc are all equivalent

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

// Desine a point calculation 1点計算

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

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

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

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

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

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

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

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

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

```

```

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

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

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

```

[end]

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

```

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

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

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

```

[end]

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

```

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

// suspend all phases
[suspend] {*}

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

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

```

[end]

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

2元系状態図計算

```

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

```

```

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

    // scanline definition, Refer Pandat 6.0 manual for details
    // if this is not given, PANDAT will use internal default value:
    // 1% from the four borders of the section
    [scanline] {dx = 0.01, dy = 0.01, dx = 0.99, dy = 0.99}

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

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

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

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

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

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

```

3元系縦断面图计算

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

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

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

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

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

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

お問合せ先

株式会社 材料設計技術研究所

材料科学研究部

電話 : 03-3660-5080

F A X : 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19年1月24日