

PanDiffusion モジュールで使える「拡散データベース」の書き方について説明します。熱力学データベースファイル「TDB ファイル」の中に、パラメータ MQ を書きます。書き方は第 2 章へ。

株式会社 材料設計技術研究所

## 第 1 章 拡散現象

高濃度域から低濃度域へ原子が移動する拡散だけでは、説明できない現象がダーケンの拡散対実験です。 Up-hill diffusion, Trans. AIME, 180 (1949), 430-438.

下図のように、炭素濃度の低い方から高い方に炭素が移動します。

熱力学的には、化学ポテンシャルの勾配によって駆動されるとし、この現象を説明します。

ダーケンの実験は主元素が Fe, C, Si, Mn です。4 元系に関しては

<https://www.materials-design.co.jp/pandat/pandiff.htm> を参照ください。

本書では Fe-C-Si 3 元素を用いたシミュレーション結果を示します。 図 1

実験 試料の長さは左側に 25 mm、右側に 25 mm。

合金組成は左側 Fe-0.49wt%C-3.8wt%Si      右側 Fe-0.58wt%C-0.14wt%Si

1050°C を 10 日間保持。

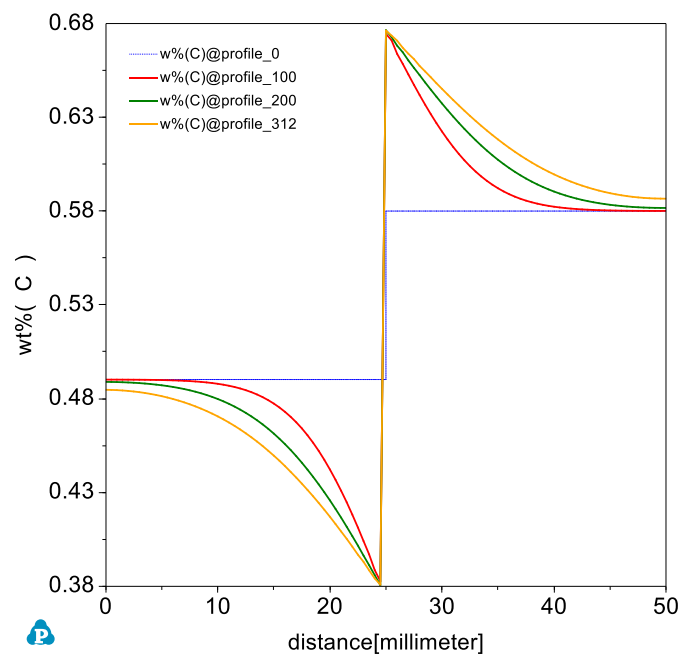


図 1 炭素濃度分布 シミュレーションは 312 時間まで

Fick フィックの法則 :

$$J = D \frac{\partial c}{\partial x}$$

J は拡散流束 (diffusion flux)、溶質中の単位面積を単位時間に通過する原子数。

dc/dx は濃度勾配。拡散係数の単位は m<sup>2</sup>/秒 である。

具体的には化学ポテンシャル勾配。拡散を化学ポテンシャル勾配で計算します。

Atomic mobility を M で表し、

$$M = M_0 \exp\left(\frac{\sum Q}{RT}\right)$$

$$M_0 = \exp\left(\frac{\sum F}{RT}\right)$$

R (gas constant)

T (temperature in Kelvin)

Q ( activation energy for mobility )

F ( frequency factor for mobility )

パラメータ MQ とは  $RT \ln(M) = Q + RT \ln(M_0)$

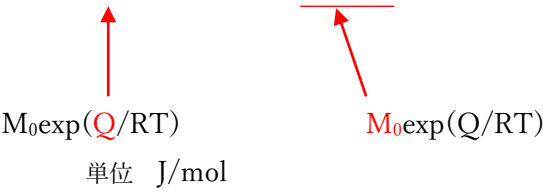
パラメータの定義例 :

MQ(FCC&AL,AL:VA)	Mobility of Al in Al
MQ(FCC&AL,NI:VA)	Mobility of Al in Ni
MQ(FCC&AL,AL,NI:VA)	Mobility of Al interaction between Al and Ni
MQ(FCC&NI,AL:VA)	Mobility of Ni in Al
MQ(BCC&C,FE:VA)	Mobility of C in Bcc_Fe with interstitials.
MQ(BCC&C,FE:C)	Mobility of C in Bcc_Fe_C

Pandat ソフトウェアでは、MQ パラメータを TDB ファイルの中に書きます。  
 MatCalc ソフトウェアでは、MQ パラメータを ddb ファイルの中に書きます。  
 MQ パラメータの書き方は、熱力学データベースの Thermodynamic  
 G パラメータもしくは L パラメータと同じ要領で記述します。

#### Fcc 相 Ni 中の Al の拡散

Parameter MQ(Fcc&AL,Ni;0) 298.15 -285517 +R\*T\*LN(0.0007933); 6000 N !  
 あるいは  
 Parameter MQ(Fcc&AL,Ni;0) 298.15 -284000 +R\*T\*LN(7.5E-4); 6000 N ! \$ 1996Eng



+R\*T\*LN(7.5E-4) は -59.8\*T になる

1996Eng  
 Assessment of Diffusional Mobilities in Face-centered Cubic Ni-Cr-Al Alloys.  
 A. Engstrom and J. Agren, Z. Metallkd., 87 (1996), 92-97.

#### 鉄 Fe の拡散

in Fe-Si-C.tdb

Parameter MQ(Bcc&FE,FE:VA;0) 298.15 -343036.59+R\*T\*LN(15); 1185 Y  
 -218000+0.000915916-83\*T; 6000 N !

Parameter MQ(Fcc&FE,FE:VA;0) 298.15 -286000 + R\*T\*LN(7.0E-5); 6000 N !

第 2 項目 +R\*T\*LN(7.0E-5) は  
 R=8.31451 (J/(mol.K)とすると -79.545\*T  
 とも書ける。

純鉄の拡散データを確認してみよう

Fe-Si-C.tdb ファイルを用いて、Fe 元素だけを選択。

メニュー Property、Kinetic Property を選択。 温度 2000K から 300K まで

Log10(DT(\*@\*)) を出力指示する。

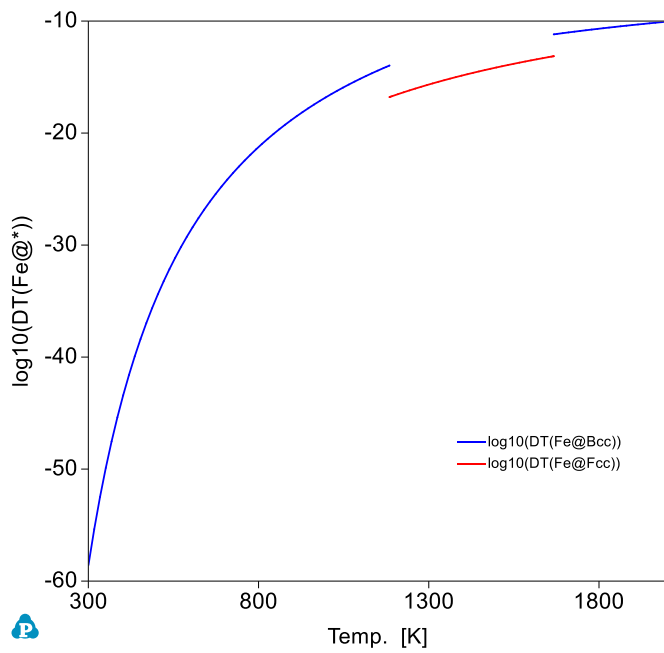


図 2 純鉄の拡散係数 縦軸の単位  $\text{m}^2/\text{s}$

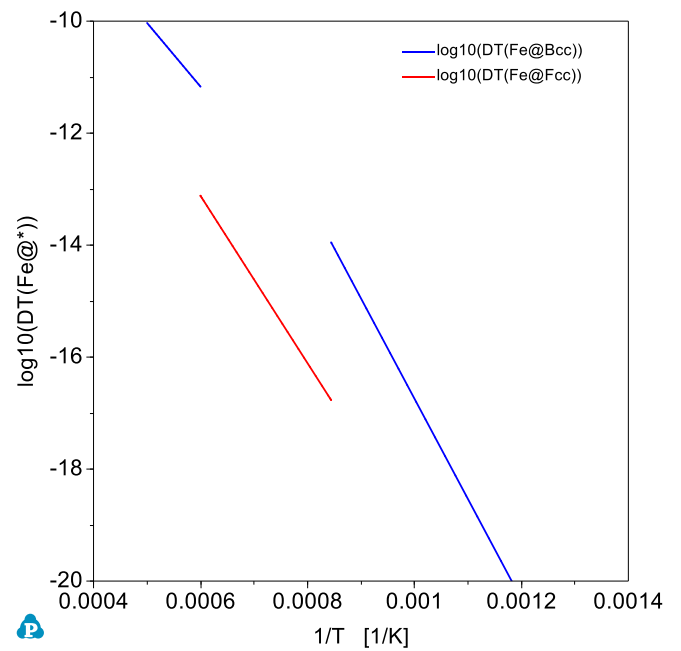


図 3 横軸を  $1/\text{Temp.}$  にした図

テーブル機能を用いて  $1/T$  の項を作成した

出典：

Pandat\_2022a User's Guide Manual

6 章 PanDiffusion

式の説明は 9 章へ

9 章 9.3 kinetic property

拡散係数の確認

9.3.1 Atomic mobility

式と MQ パラメータ  
テーブル M

9.3.2 Tracer diffusivity

テーブル DT

9.3.3 Chemical diffusivity

式と テーブル DC

Pandat 拡散データを含む TDB ファイルの例

インストール先の Example ディレクトリにあります。

AlCu\_MB.tdb

AlMg\_MB.tdb

AlMgSi.tdb

AlNi\_Diff.tdb

Fe-Si-C.tdb

FeCrNi.tdb

(市販の拡散データベースは有料です。暗号化されています。)