

拡散データベースを自作してみよう

2022年7月16日

PanDiffusion モジュールで使用できる「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元素を用いて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。

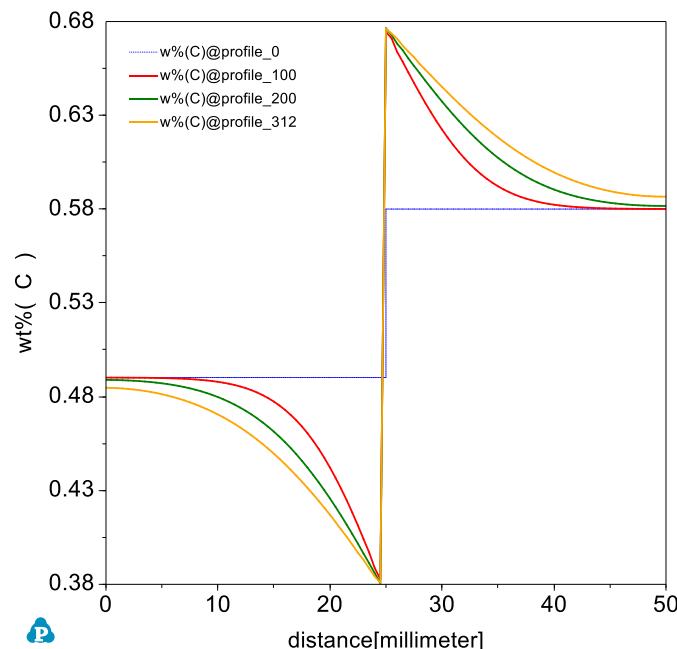


図1 炭素濃度分布 シミュレーションは 312 時間まで

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 $m^2/\text{秒}$ 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 :

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

$$M_0 \exp(Q/RT)$$

単位 J/mol

+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。

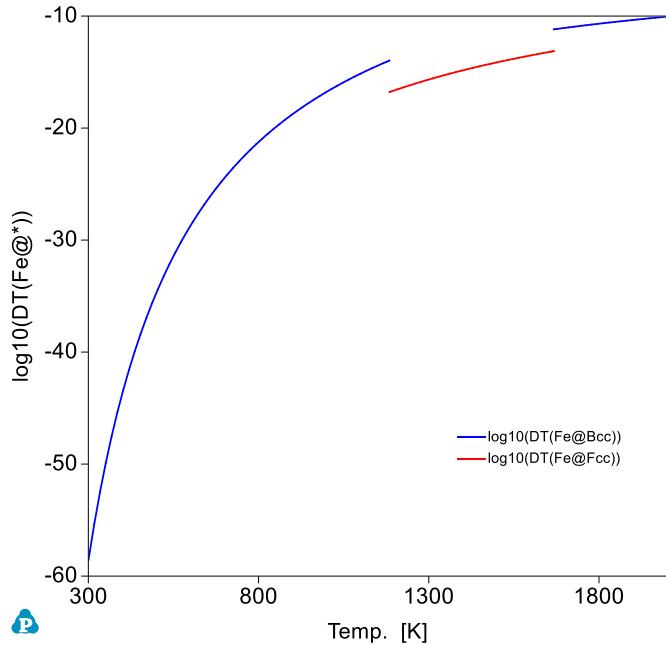


図 2 純鉄の拡散係数 縦軸の単位 m^2/s

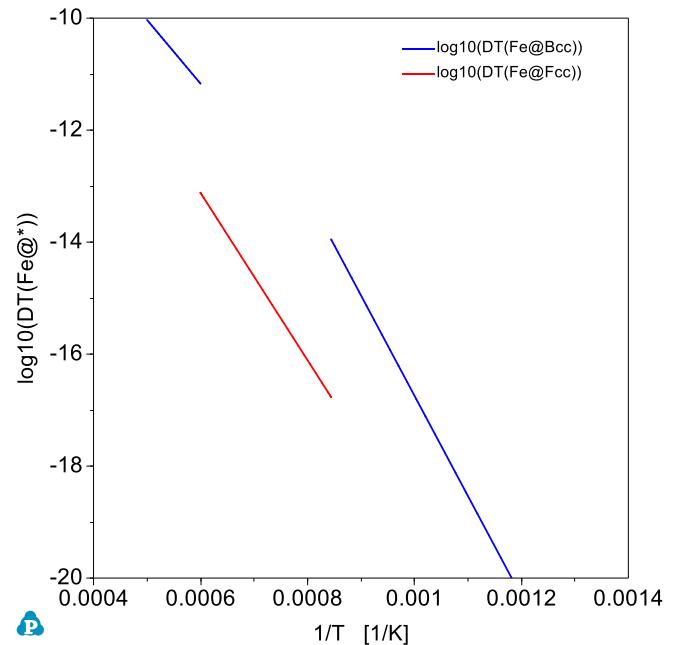


図 3 横軸を $1/\text{Temp.}$ にした図

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。)