

(48) 2元系、3元系化学ポテンシャル図の自動作成システム

東大・工・金属 ○吉沢 昭宣・佐久田 博司

金属製錬の反応,特に新しい原料や反応ルートによるプロセスの可能性の能率のよい探索のためには,熱力学データに基づく化学ポテンシャル図(CP図)の利用が望ましい⁽¹⁾が,多数の図を手で計算して作成することは,面倒だけでなく,多少の熟練を要する。筆者らは,既に2元系に対しての自動作成を試み,一部の結果を公表した⁽²⁾が,今回,2元系の各領域の文字記入,2元系の重ね書きによる比較などの機能を充実した対話型のシステムを完成し,更に3元系の立体図へ拡張したので,これについて報告する。

このシステム(CIBBS:Graphics and Information Bank for Binary/tertiary System)には原理的には新しいことは何も含まれておらず,ある温度における安定種を選択して,領域上で隣接する種間の化学式からlog P_xを定める操作(2成分),又はある温度でlog P_yをパラメータとしたときの同様な操作によってT-cut図を作成する手順(3成分)を繰返すものである。このシステムの利用者はグラフィック端末を利用して,対象とする系の元素名を入力すれば,データバンクから手持のデータがリストアップされるので,それに追加や削除が必要なら行った後,温度範囲を指定すると結果が表示される。軸の選択その他も指定自由であり,3成分系ではT-cut,立体,透視などの各種の指定ができるようになっている。

Fig. 1は2元系の重ね書きの例であり, Fig. 2は両眼実体視用の3元系の例である。気相成分の分圧はすべて1 atmとした線で描いてある。

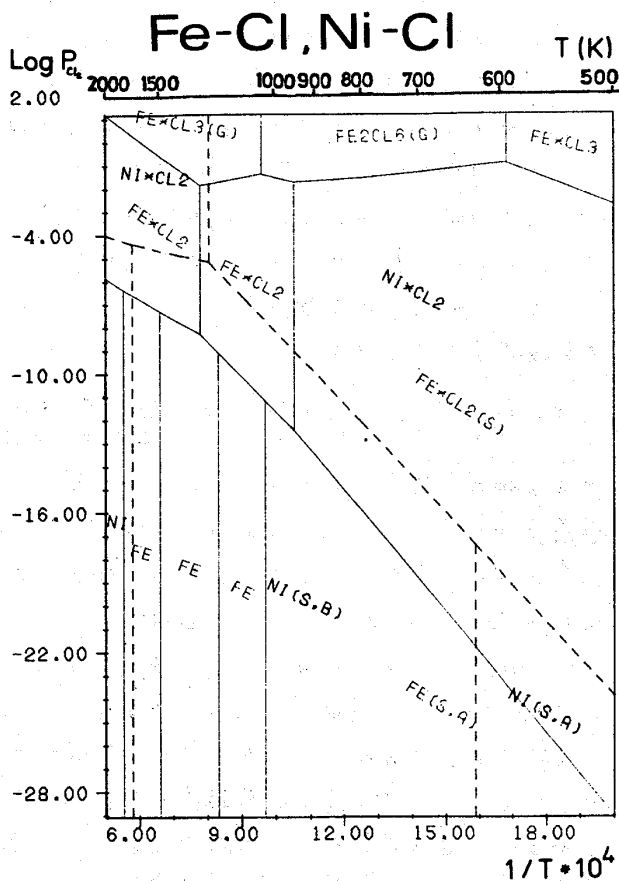


Fig. 1 Fe-Ni-Cl System

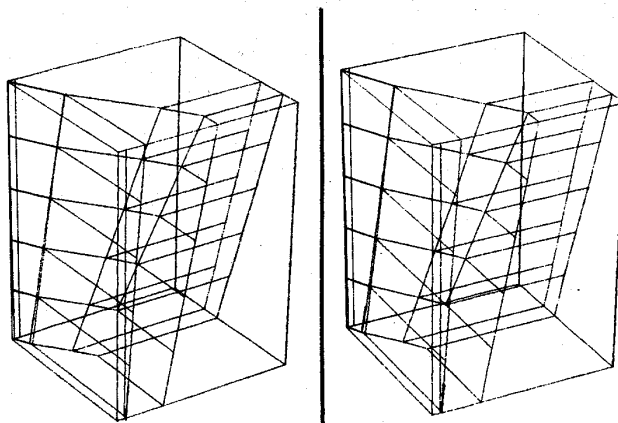


Fig. 2 Fe-Cl-O System

文献 (1) 増子 昇:電気化学 vol.38, No.2-4 (1970)

(2) 吉沢 昭宣:「金属」 vol.46, No. 7 (1976)