

# 設置機器紹介

## 熱力学計算システム FactSage

### 1. FactSageについて

熱力学計算システムFactSage（ファクトセージ）は、熱力学応用計算のためのコンピューターソフトウェアで、各種の熱力学データベースと、計算を行うプログラムソフトとから構成されています。化学反応式のエネルギー状態変化のような簡易な計算から、多成分系の相平衡計算や、2成分系、3成分系の相平衡状態図作成といった複雑な計算までをパソコン上で行うことができます。

高温材料を検討する場合、実際の使用環境である高温において、材料内部でどのような反応が起こり、微構造がどのように変化していくかを推定することが重要ですが、これらを考察するには高温の条件下における材料の相平衡状態を理解することが基本となります。FactSageはこれを支援するツールで、特に多成分が関与する複雑系の相平衡状態を推定する場合に有効です。

### 2. 計算事例

CaO-SiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-MgO系のスラグが浸透した耐火物について相平衡計算を行った結果例を図1に示します。この図から、1300℃付近から液相が生成し始め、約1670℃で完全に溶融することがわかります。

このような計算を各種材質について行って整理すると図2の結果が得られ、材質No. 4が液相生成温度、完全溶融温度ともに最も高くなり、スラグが侵入した場合の

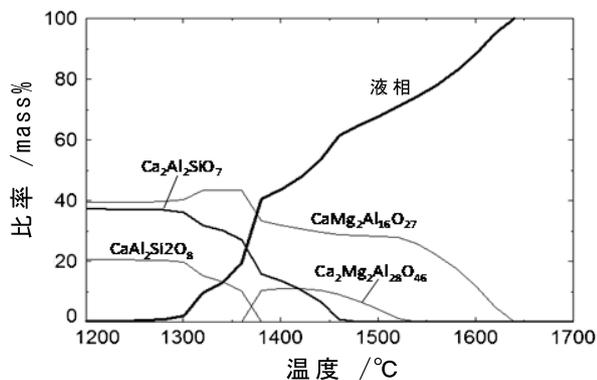


図1 4成分系スラグの相平衡計算例

組織劣化が少ない優れた材質であることを推定することができます<sup>1)</sup>。

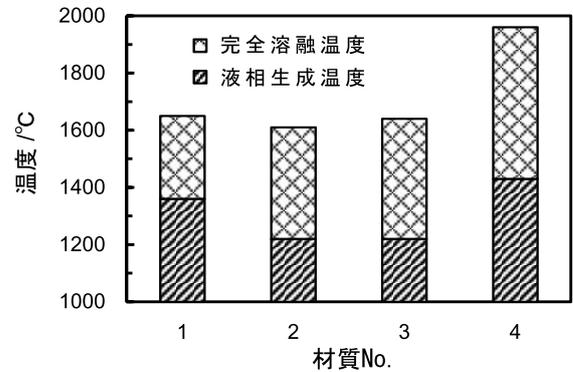


図2 相平衡計算による材質比較例

また図3は、硼珪酸ガラスの侵食を受けたAl<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>質煉瓦の稼働表面に形成された反応層について相平衡計算を行った結果で、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub>-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-MgO-FeO-MnO-ZnO-CaO系の多成分解析の一例です<sup>2)</sup>。この図から、1300℃の熱間において反応層は固相（スピネル結晶）と液相とからなる固液共存状態となることがわかります。

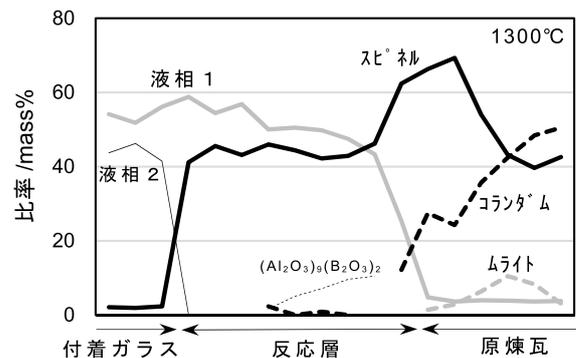


図3 相平衡計算による稼働面反応層の高温状態の推定例

### 文献

- 1) 耐火物, 70 [8] 355-359 (2018).
- 2) 耐火物, 68 [8] 330-334 (2016).