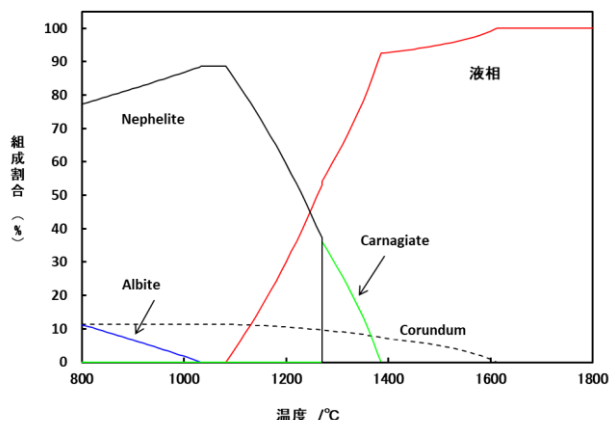


熱力学計算システム (FactSage)



設置年度	2012年度
型式	FactSage
製造所	計算力学研究センター
仕様	<ul style="list-style-type: none"> 計算対象: 化合物、固溶体、融体、合金の熱力学平衡計算および平衡状態図の計算 計算方式: ギブスエネルギー積算の最小化計算に基づくCALPHAD法 計算種目: 熱力学平衡計算、多元系状態図、凝固解析、融体粘度、ガス平衡分圧 データベース: <ul style="list-style-type: none"> a) 酸化物、炭化物、窒化物、合金の熱力学データベース b) 熔融酸化物、熔融塩、熔融金属の熱力学データベース
用途	<ul style="list-style-type: none"> 熱力学データをもとに、相平衡状態図や平衡分圧相関図などを求める計算システム。 計算例: <ul style="list-style-type: none"> a) Al-M-C系複合炭化物 (M=Zr,B,Ti) の高温における平衡状態計算 b) MgO-C、Al₂O₃-C、ZrO₂-C系材質の高温における平衡状態計算 c) SiO₂-CaO-Al₂O₃-Na₂O-B₂O₃系融体の融点および粘度計算

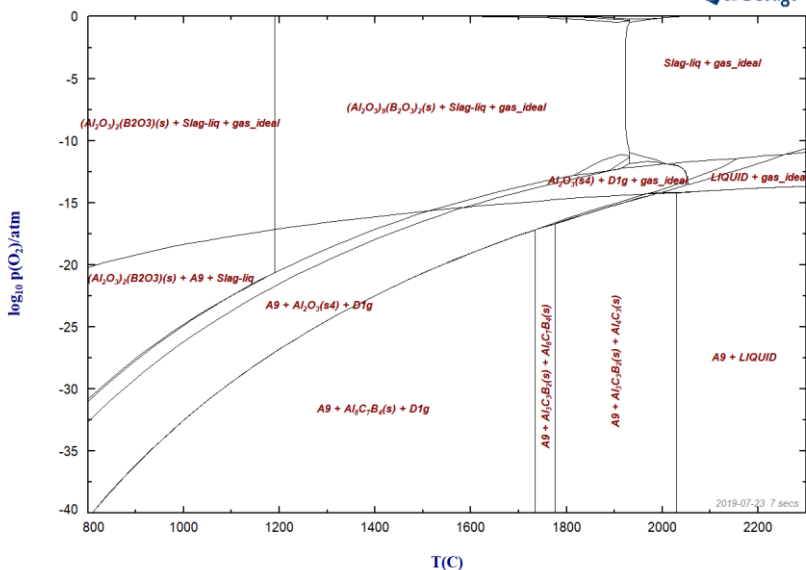
事例紹介



Al₂O₃-SiO₂-CaO-Na₂O系
の液相量の検討例



1 atm, SpMCBN, FToxid, FTlite, FactPS, FactSage 7.3



当財団で合成したAl₃BC₃
の酸素分圧に対する安定
相の検討



<計算の結果>
実使用条件において、
Al₄C₃の生成が抑制され、
高融点の複合酸化物
(9Al₂O₃-2B₂O₃)の生成が見
込める。