

演 題	Java によるセラミックス平衡状態図の量計算ソフトウェアの開発	
発 表 者 (所 属)	○吉永崇、藤井秀彦、野口文雄、小林秀彦 (埼玉大工)	
連 絡 先	〒338-8570 埼玉県さいたま市下大久保 255 埼玉大学工学部応用化学科 TEL/FAX : 048-858-3536 e-mail : noguchi@apc.saitama-u.ac.jp	
キーワード	セラミックス、平衡状態図	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 等	セラミックスの平衡状態図を PC 画面上に表示し、それを用いて容易に量計算を行うことを実現するソフトウェアの作成を試みた。材料開発者がこれを利用することにより、計算にかかる労力を削減できることを期待したい。	
環 境	適 応 機 種 名	Java Virtual Machine(JVM)が作動する機種
	O S 名	Windows, Linux, MacOS など JVM が装備された OS
	ソ ー ス 言 語	Java
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 (右 の い ず れ か に ○ を つ け て く だ さ い)	・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 ○未定	具 体 的 方 法

1. はじめに

平衡状態図とは、物質がある条件下で平衡に達したとき、どのような状態で存在するかを示す図であり、セラミックスの合成を考える上で非常に有益な知識を与えてくれる。例えば、ある温度・組成の物質からどのような相ができ、またそれらの相の組成がどのような割合であるかを知ることができる。各相の量、組成を知るには、平衡状態図から読み取った液相線、固相線等の相境界線上の値をもとに「この法則(lever rule)」を用いた計算を行う。しかし、相境界線上の値を読み取るには作図計算を必要とし、平衡状態図の読み取りから量計算までの手計算を行うには多大な労力を要する。そこで、本研究では平衡状態図を PC 画面上に表示し、それを用いて容易に各相の量計算を行えるソフトウェアを作成した。

2. ソフトウェアの特徴

実際の平衡状態図は実験によって得られた離散的なプロットの間を曲線で補間することによって描かれている。そこで本ソフトウェアでは既存の平衡状態図から、ユーザーが読み取ったいくつか相境界線上の値を

受け取り、その点の間を補間することにより平衡状態図を作図することにした。補間アルゴリズムには各点の間を三次関数に近似し、滑らかな曲線を描くことが可能な Cubic Spline を採用した。また、各点の間ごとに三次関数を当てはめているため、曲線上の任意の点における値を算出することが可能となっている。従って、相境界線上の任意の点における値を得ることができ、各相の組成や量を計算することも可能とした。

3. 実行例

本ソフトウェアではユーザーが任意に選んだ点における安定相の表示や、その相の量計算のみでなく、ユーザーが決めた温度範囲において温度変化させたときの各温度における安定相や各相の量計算を連続的に行い、表示できる。平衡状態図出力画面を Fig.1 に示し、その計算結果表示部を Fig.2 に示した。

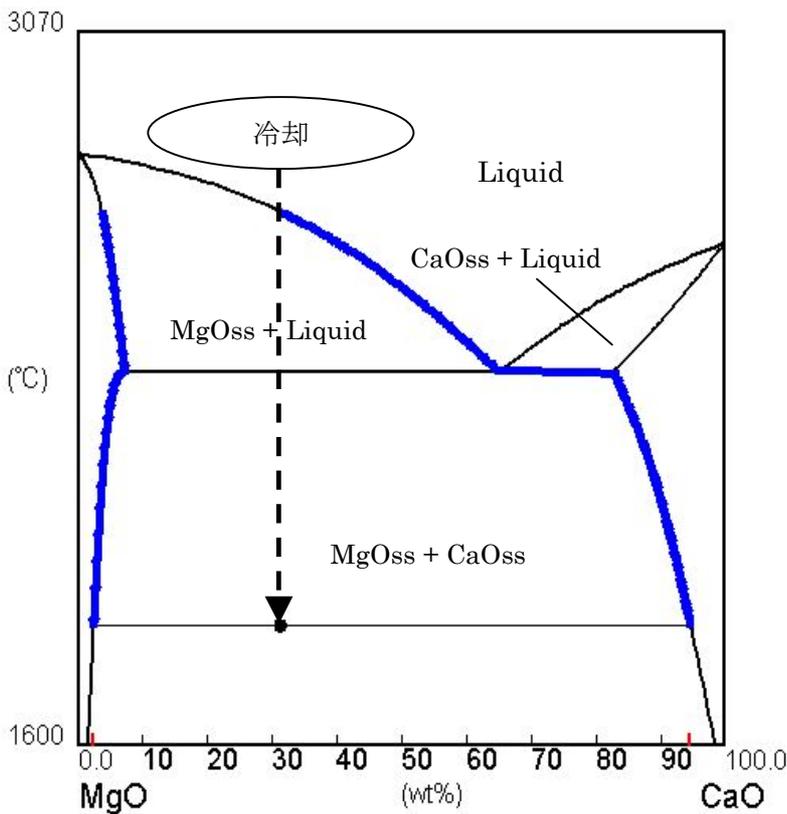


Fig. 1 MgO-CaO 二成分系平衡状態図出力画面

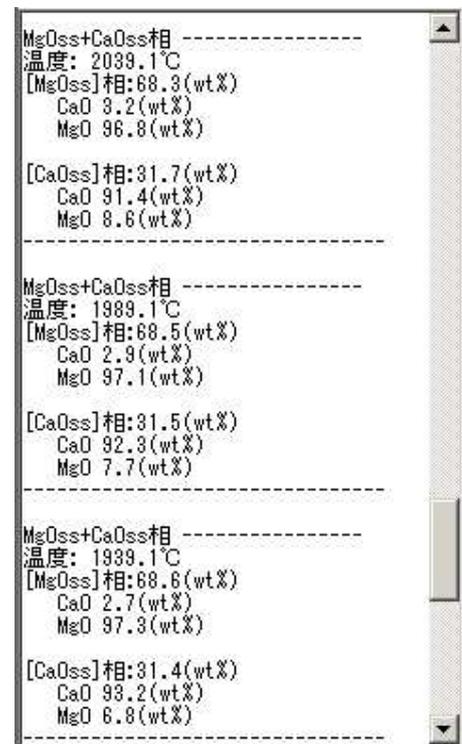


Fig. 2 計算結果表示画面

4. 今後の展望

現段階では扱える平衡状態図が 2 成分系に限定されている。また、平衡状態図作成のためのデータ入力部がないといった問題点があるので、これらの機能を追加していきたいと考えている。

5. 参考文献

- 1) 守吉佑介、笹本忠、植松敬三、伊熊泰郎「セラミックスの基礎科学」内田老鶴圃 (1989)
- 2) Ernest M. Levin et al., "Phase Diagrams for Ceramists", The American Ceramic Society (1964)