

熱力学データに基づく pH-電位線図表示ソフトウェアの作成

○ 鈴木豪人、野口文雄、小林秀彦（埼玉大工）

埼玉大学工学部応用化学科（〒338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保 255）

1. はじめに pH-電位線図とは、溶液の酸化力に相当する電位を縦軸に、pH を横軸とした金属-金属イオン-酸化物の安定存在範囲を示した平衡状態図である。金属の腐食を考える上で、金属表面でどのような相が安定であるかを調べるのに、非常に役に立つ。本研究では、Java を用いて、pH-電位線図を PC 画面上で容易に扱えるソフトウェアを作成した。

2. 方法 本ソフトウェアでは、プログラム中で、図1の反応①のように横軸(pH)に平行な直線、反応②のような傾き、切片をもつ直線、反応③のような縦軸(電位)に平行な直線として、相境界線を幾何学的に捉えた。①、②の反応では、ネルンストの式を用いるので、標準化学ポテンシャルなどの計算に必要な熱力学データをクラスフィールドに書き込んで、数値を格納した。図1の反応①における直線の切片を算出するメソッド、反応②における直線の傾き、切片を算出するメソッド、反応③では、pH を算出するメソッドを作成した。pH-電位線図の描画には、Java クラスライブラリにある Graphics2D クラスを用いて、各々の境界線が交じり合う交点の座標を算出し、線で結ぶことによって作図した。作図の際に、下記の参考文献を参照した。

3. 実行例 pH-電位線図の出力例を図1、2に示した。反応④、⑤についての直線は、水の電気分解を意味する。分かりやすい図にするために、安定に存在する化学種や、図中の0～-6の数字を用いて、イオン濃度の指数を表示した。結果的に、電位変化と pH 変化による金属の安定相の分布を視覚的に捉えることができた。本ソフトウェアでは、ユーザーが拡大した図を表示できるように、描画範囲を指定できる機能も組み込んだ。他に、イオン濃度の範囲をユーザーが指定して描画できる機能も追加した。

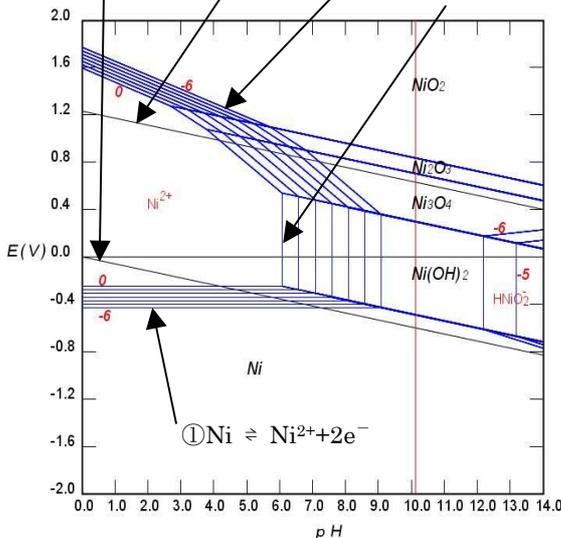
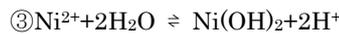
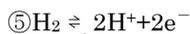
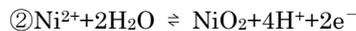
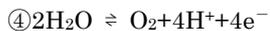


図1 Ni-H₂O系 pH-電位図

各イオン濃度範囲 (1.0×10⁻⁶ mol/l～1.0 mol/l, 25℃)

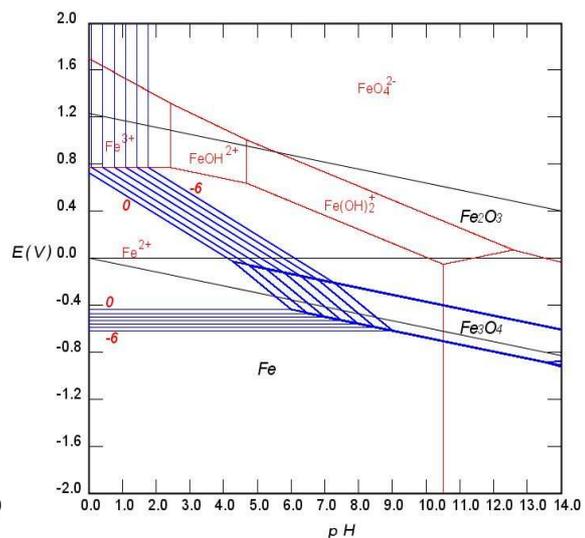


図2 Fe-H₂O系 pH-電位図

参考文献 Marcel Pourbaix, “Atlas of Electrochemical Equilibria in Aqueous Solutions”, National Association of Corrosion Engineers (1974).