

RICT-Cerm_v1 サーメット材料系データベース v.1.0

RICT-Cerm データベースはサーメット材料系の熱力学計算をするために用いることを目的に、CALPHAD(CALculation of PHAse Diagrams)法に基づいて構築された熱力学パラメータデータベースです。

1. 取り扱える元素成分

現在のところ取り扱える成分としては 以下の 21 元素です。

主成分元素 : Co Fe Ni Ti W および B C N

合金元素 : Al Cr Cu Hf Mg Mn Mo Nb Si Ta V Y Zr

取り扱える成分は今後順次増やして行く計画です。

GAS 相および本データベースに含まれていない化合物(純物質)については他のデータベースを併用してください。

2. 二元系合金系

RICT-Cerm_v1 には 2 ページに示している組み合わせの二元系および三元系, 四元系) についての熱力学パラメータが含まれており, これらから構成される多元系の相平衡を計算することができます。

3. 合金相の種類

本データベースを構成している相を以下に示します。

1) 液相と一次固溶体相

LIQUID
ALPHA_RHOMBO_B
BCC_A2
BETA_RHOMBO_B
CBCC_A12
CUB_A13
DIAMOND_A4
FCC_A1 This is also NaCl-type M(C,N)
GRAPHITE
HCP_A3 This is also M2(C,N)

2) 規則相

```

BCC_B2    3 sublattices  0.5:0.5:3
FCC_L12   3 sublattices  0.75:0.25:1
  
```

BCC_B2 相は二副格子モデルの B2 規則相，FCC_L12 相は二副格子モデルの L1₂ 規則相，HCP_ORD 相は四副格子モデルの Co₃V 規則相です。これらはスプリットモデルを用いた規則相で，不規則部としてそれぞれ BCC_A2 相，FCC_A1 相，A3_HCP 相を必要とします。規則状態が現れないことが明らかな場合は計算から除外できますが，いずれも不規則部を除いた単独相として用いることはできません。

3) 硼化物，炭化物，窒化物

硼化物，炭化物，窒化物の順に並べています。なお，硼炭化物，炭窒化物のような複合化合物の場合はどちらか一方にのみ示しています。

硼化物相

ALB12_ALPHA	B4C	CO3AL2B5
CO5TI3B2	CR5B3_D81	CRB4
CRNBSI	FE10SI2B3	FE3NB3B4
FE5SI2B	FE5SIB2	FENBB_C22
M2B3	M2B_ORTH	M2B_TETR
M3B2_D5A	M3B4_D7B	M5B6
MB12_D2F	MB2_C32	
MB_B27	This is CoB, FeB, MnB, TiB and ZrB	
MB_BF	This is CrB, NbB, NiB and VB	
MGB4	MGB7	MN2B_D1F
MNB4	MO2BC	MO3NI10B11
MOB4	MX2B2	
MXB	This is CoMoB, CoWB, FeWB	
NI3CR2B6	NI4B3_M	NB2B3
NI4SI2B	NI5ALB4	NI4B3_O
NI8ALB11	NICR3B6	NI6SI2B
SIB6	SIB_N	SIB3
T_M23B6	W2B5_D8H	TAB2_C32
WB_ALPHA	WB_BETA	WB4
YB6	YB66	YB4

炭化物相

AL4C3_D71	AL4SIC4	AL8SIC7
ALBMO	ALCCR2	ALCR2B2
ALCR3B4	CR2VC2	FE8SI2C
FECN_CHI	FEW3C	KAPPA_E21
KSI_CARBIDE	This is M ₃ C carbide	
M12C	This is Co ₆ W ₆ C/Ni ₆ Mo ₆ C	
M3C2	M3X_D011	This is also Cementite
M5C2	M6C	M7C3
MC_ETA	MC_SHP	MG2C3
MGC2	MW3C	SIC
TA4C3	TI3SIC2	Y15C19_H
Y15C19_R	Y2C3_H	Y2C3_R
YC2_C11A	YC_GAMMA	

窒化物相

HF4N3	M3N2	M4N_LP1
MN6N4	MN6N5	
PI	This is Cr _{12.8} (Fe,Ni) _{7.2} N ₄	
TAN_EPS	TI2ALN	TI3N4
TI3AL2N2	TI3ALN	TI2N
TI4N3_ZETA	Z_PHASE	TI3N2

4) その他の化合物相

AL10V	AL11CR2	AL11MN4
AL11TI5	AL12M	AL12MG17
AL13CO4	AL13FE4	This is Al ₃ Fe
AL2CU_THETA	AL2CU3_DELTA	AL23V4
AL2FE	AL2FE2SI_TAU1	AL2CUMG_S
AL2MN2SI3_TAU1	AL2MNSI3_TAU10	AL2FESI_TAU3
AL2W	AL2Z3	AL2TI
AL3FESI_GAMMA	AL3MN4SI2_TAU5	AL3CO
AL3M_D022	AL3NB_D022	AL3MNSI2_TAU4
AL3NI2_D513	AL3NI5	AL3NI_D011
AL3X4	AL3Y_HT	AL3X2
AL3Z_D023	AL4CR	AL3Y_LT
AL4MN	AL4ZR5	AL4M1
AL5FE2	AL5FE4	This is ε in Al-Fe
AL5M1	AL5MN6SI7_TAU2	AL5CO2_D811
AL63MO37	AL69TA39	AL62CU25FE13
AL77W23	AL7CR	AL6MN_D2H
AL7TA5	AL7V	AL7CU2FE
AL8CR5_ALPHA	AL8CR5_BETA	AL7W3
AL8MO3	AL8V5	AL8MN5_D810
AL9CU11_ZETA	ALCR2_C11B	AL9CO2
ALCU_EPSILON	ALCU_ETA	ALCU3MN2
		ALCU_GAMMA_D83

(つづく)

(つづき)

ALCU_GAMMA_H	ALFESI_ALPHA	ALFESI_BETA
ALFESI_DELTA	ALFEZR_TAU1	ALFEZR_TAU2
ALFEZR_TAU3	ALM3_D019	ALMG_BETA
ALMG_EPSILON	ALMNSI_TAU3	ALMNSI_TAU6
ALMNSI_TAU8	ALMNSI_TAU9	ALMO_A2
ALSIZR_TAU1	ALSIZR_TAU2	ALSIZR_TAU3
ALTA	ALY2	ALZR2_B82
ALZR3_L12	CHI_A12	CO10CU57TI33
CO11ZR2	CO2SI_ALPHA	CO2SI_BETA
CO3SI	CO3Y2	CO3Y4
CO5Y8	CO7HF	CO7Y6
COCRTI_TAU1	COCRTI_TAU2	COSI_B20
COZR3	CR2NI2SI	CR3MN5
CR3NI5SI2	CR3SI_A15	CRSI2_C40
CU15SI4_EPSILON	CU19SI6_ETA	CU2TI
CU2TIZR	CU2Y_HT	CU2Y_LT
CU33SI7_DELTA	CU3TI2	CU4TI_BETA
CU4TI3	CU4Y	CU51Z14
CU56SI11_GAMMA	CU5MN4SI	CU5X
CU6NISI3	CU6Y	CU8M3
CUB_A15	CUFETI_TAU2	CUFETI_TAU3
CUFETI_TAU4	CUFETI_TAU5	CUMG2_CB
CUMTI_TAU1	CUNISI_TAU2	CUNITI_TAU2
CUNITI_TAU4	CUNITI_TAU6	CUTI_B11
CUTI3	CUX2_C11B	CUZ_B2
FE2SI	FE2ZR_HEX	FE2SITI_L21
FESI2_H	FESIZR_TAU1	FESIZR_TAU2
FESIZR_TAU3	FESIZR_TAU4	FESIZR_TAU5
FESIZR_TAU8	FESIZR_TAU9	FEZR3
G_PHASE This is Th ₆ Mn ₂₃ prototype phase		HFMN
HIGH_SIGMA	LAVES_C14	LAVES_C15
LAVES_C36	M10X7	M11SI8
M12Y_D2B	M17Y2	M2X_OI6
M3SI_D03 This is (Mn,Fe) ₃ Si		M3SI_P
M3SI2_D5A	M3TI_TAU	M3X_D019
M3X_D024	M3Y	M5SI3_D88
M5SI3_D8L	M5X3_D8M	M5Y_D2D
M6SI5	M7X2	M7Y2
MG24Y5_A12	MG2NI	MG2SI
MN11SI19	MN2ZR_C14	MN3TI
MN4TI	MN6SI	MN9SI2
MNNI2	MNNI3	MNNI_ALPHA
MNNI_BETA	MNSI_X	MNTA
MONI_DELTA	MSI2_C11B	MSI2_C40
MSI2_C49	MSI2_CF12	MSI2_OC48
MSI_B27	MSI_B31	MU_PHASE
MX2_C16	MX2_C54	MX3_A15
MX_B20	MY3_D011	MY_B27
MZ2_C11B	MZ2_C16	MZ2_E93
MZ_BF	NB5SI3_BETA	NI11ZR9
NI21ZR8	NI2AL3Y_TAU6	NI2ALY2_TAU9

(つづく)

(つづき)

NI2SI_DELTA	NI2SI_THETA	NI2TA_C11B
NI2Y3	NI3AL7Y2_TAU5	NI3AL9Y_TAU2
NI3ALY2_TAU11	NI3HF_ALPHA	NI3HF_BETA
NI3M_D0A	NI3SI2_EPSILON	NI3SI_BETA2
NI3SI_BETA3	NI3V_D022	NI4X_D1A
NI4Y	NI5SI2_GAMMA	NI5Z_C15B
NI6AL23Y4_TAU1	NI6AL2Y3_TAU10	NI7HF3
NI8ALY3_TAU12	NI8M	NIAL2Y_TAU7
NIAL3Y_TAU4	NIAL4Y_TAU3	NIALY_TAU8
NIHF_BETA	NIHF2_C16	NISITI_TAU1
NISITI_TAU2	NISITI_TAU3	NISITI_TAU4
NISITI_TAU5	NITI2	NITIZR_LAMBDA
NIV3_A15	NIW_X	NIW2
P_PHASE This is Fe11Mo53Ni36		R_PHASE
SIGMA	TA3FE2	TAVSI_TAU1
TAVSI_TAU2	TIMN_ALPHA	TIMN_BETA
Y3SI5_HT	Y3SI5_LT	YSI2_HT
YSI2_LT	Z5RE24_A12	
Z5SI3_D88 This is (Cr,Ti)5Si3(C,N,Va)x		Z5SI4
Z6SI5	ZR3SI1	ZR5SI4_BETA
ZRSI_BF		

以上

最終校正 2018年6月10日

株式会社 計算熱力学研究所 Research Institute of Computational Thermodynamics (RICT), Inc.

〒841-0052 佐賀県鳥栖市田代外町 674-18

Tel: 0942-80-0547 E-mail: mail@rictsystems.com

HomePage: <http://www.rictsystems.com>