

Title	ChemSage
Author(s)	田中, 敏宏
Citation	金属学会セミナー・材料開発・設計における状態図の基礎と応用. P.101-P.103
Issue Date	1994-11
Text Version	publisher
URL	http://hdl.handle.net/11094/26229
DOI	
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

ChemSage

大阪大学工学部 田中敏宏

1. はじめに

ChemSage^{(1),(2)}は1987年に SOLGASMIX^{(3),(4)}を母体としてドイツ、アーヘン工科大学において開発された化学平衡計算のためのソフトウェアで、現在では反応器内の定常状態の計算システムや利用者との対話型の入出力機能も備えている。本稿では、比較的簡単な熱力学計算問題の具体例を用いて ChemSage の利用方法を示しながら、本ソフトウェアの特徴を紹介する。

2. ChemSage の構成

ChemSage の構成を図 1 に示す。“Thermochemical Data and Non-ideal Solution Models”のモジュールにおいて計算に必要なデータを入力し、実際の計算はその下の各モジュールで行う。ChemSage には (1) Thermodynamic Function Calculation Module, (2) Phase Equilibrium Calculation Module, (3) Staged Reactor Model Calculation Module の計算システムが含まれている。上記(1)のモジュールでは、純物質および溶体の種々の条件下における熱力学関数(熱容量, 標準生成自由エネルギー変化, 活量など)を計算できる。(2)では、混合気体, 各種溶体・化合物間の相平衡計算(任意の温度, 圧力下における各相の組成, 活量, 反応熱などの計算)ができる。さら

に, (3)のモジュールでは, 反応器をいくつかの部分に分け, 個々の部分における条件(例えば, 温度, 圧力, エネルギの出入りなど)を与えた後に, 反応器全体が定常状態になった際の各部分における組成, 熱力学量などを計算できる。さらに, 計算結果を作図する場合には[Graphics Module]中の各種グラフィック機能を利用できる。

3. ChemSage の利用例

本稿では ChemSage の機能の中で, 上記(2)の相平衡計算について下記の例題を用いて利用方法を説明する。

例題 25°C, 1 atm のもとで, C; 2 mol と SiO₂ (quartz); 1 mol を混合し, 2000°C まで昇温すると系(容器)内にどのような物質が生成するか?

まず最初に[Thermochemical Data and Non-ideal Solution Models]のモジュールからデータファイルを読み込む。このデータファイルは SGTE(The Scientific Group Thermochemical Data Europe)⁽⁵⁾などのデータベースから計算に関連する元素を含むデータを抽出することによって, あるいは利用者がデータファイル作成コマンドを使って作成できる。本例題に対しては, SGTE のデータベースから作成した Si, C, O を含む各種化合物の熱力学量に関するデータファイルを用いる。データを読み込んだ後, [Phase Equilibrium Calculation Module]に移行する。操作手順は次の通りである。(1)反応物質の組成の入力, (2)圧力および温度の単位の選択, (3)反応温度の入力, (4)反応圧力の入力, (5)反応系への反応物質の投入時の温度および圧力の入力(これにより, 反応熱などが計算される。)以上の入力操作の後, 計算を行う。結果を表 1 に示す。同表において, 英数字で書かれた部分が画面上に表示される。表 1 は Chem-

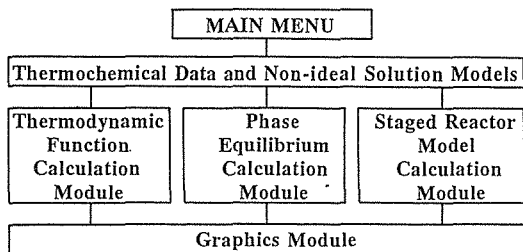


図 1 ChemSage の構成。

表1 例題の計算結果.

T = 2000.00 C ← 反応温度						
P = 1.00000E+00 atm ← 反応圧力						
V = 3.7322E+02 dm ³						
REACTANTS:	} 反応物質	AMOUNT/mol	TEMPERATURE/C	PRESSURE/atm	} 反応初期条件	
C		2.0000E+00	25.00	1.0000E+00		
SiO ₂ (quartz)		1.0000E+00	25.00	1.0000E+00		
PHASE: GAS	} 気相中の生成物質	EQUIL AMOUNT mol	MOLE FRACTION	FUGACITY atm	} (質気相と同一) 分圧と同一の各生成物の場合、ティ	
CO		1.5004E+00	7.4988E-01	7.4988E-01		
SiO		4.9953E-01	2.4966E-01	2.4966E-01		
Si		8.1048E-04	4.0507E-04	4.0507E-04		
Si ₂ C		5.8837E-05	2.9406E-05	2.9406E-05		
CO ₂		4.2084E-05	2.1033E-05	2.1033E-05		
(中略)	(中略)	(中略)	(中略)	(中略)		
TOTAL:		2.0008E+00	1.0000E+00	1.0000E+00		
SiC	} 生成物質 (凝縮相)	4.9952E-01	SiCのみ約0.5mol生成していることを示している	1.0000E+00	} これらの実際には存在しない成分(EQUIL AMOUNTが0)の活量値には物理的意味はないが、1に近い値の成分ほど、温度・圧力などの条件が変化した際、生成する可能性の高いことを示している	
Si		0.0000E+00		5.7698E-01		
C		0.0000E+00		2.1450E-01		
SiO ₂ (liquid)		0.0000E+00		1.3611E-02		
SiO ₂ (cristobali)		0.0000E+00		1.2686E-02		
SiO ₂ (tridymite)		0.0000E+00		1.2506E-02		
SiO ₂ (quartz)	0.0000E+00		1.1045E-02			

DELTA H	DELTA S	DELTA G	DELTA U	DELTA A	DELTA V	} 例題の反応に対する各種熱力学量
J	J.K-1	J	J	J	dm ³	
8.4100E+05	5.4568E+02	-5.0376E+05	8.0318E+05	-5.4157E+05	3.7322E+02	
← 反応熱が約8.4x10 ⁵ Jであることが示されている						

Sage で相平衡計算を行なった際の結果の標準的な表示であり、結果の読み取り方を表中につけ加えてある。同表より次の結果が得られる。

例題の答え：気相中 CO; 1.50 mol
 SiO; 0.50 mol など
 凝縮相中 SiC; 0.50 mol
 反応熱 8.4 × 10⁵ J

上記例題において、温度のみを1600°Cから3000°Cまで適当な温度幅で連続的に変化させて同様の計算を行うこともでき、その際に得られた種々の生成物質の量を温度に対して示した結果を図2に示す。同図より、2330°Cから2800°CにおいてSiが生成することがわかる。図2はChemSageの[Graphics Module]の作図機能を利用して作成したものである。また、温度を未知数とし、Siを目標生成物質であると指定することにより、昇温時にSiが生成する最も低い温度を計算することもできる。さらに、問題によっては、反応熱(の合計)を0とする条件を与えて一定圧力下で昇温し、断熱反応

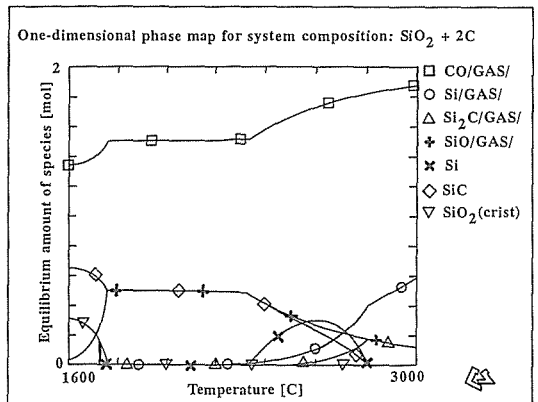


図2 SiO₂ の C による還元反応における生成物質の温度変化.

を生じさせた場合の平衡状態における温度および生成物質の種類とその量の計算なども可能である。

4. おわりに

本稿では、主としてChemSageによる化学平衡計算例を示したが、準安定平衡状態の計算や、さら

に組成または温度を未知数として相境界線を自動的に求める機能を利用した合金・化合物の状態図の計算も可能である。反応熱などの計算も含めた多成分系の化学平衡計算や、ここでは紹介できなかったが反応容器内の定常状態の計算機能などが本ソフトウェアの大きな特長である。上記例題も含めたさらに詳しい内容については引用文献(1), (2)を参照されたい。

引用文献

- (1) G. Eriksson and K. Hack : Metall. Trans. B, 21B (1990), 1013.
- (2) 田中敏宏, 飯田孝道 : 熱測定, 18 (1991), 174.
- (3) G. Eriksson and E. Rosen : Chem. Scr., 4 (1973), 193.
- (4) G. Eriksson : Chem. Scr., 8 (1975), 100.
- (5) I. Ansara and B. Sundman : Computer Handling and Dissemination of Data, ed. P. S. Glaeser, Elsevier, Science Pub., (1987).