

# CDB 形式熱力学データベース解説書

## 1. CDB のパラメータ

一つのパラメータは“キーワード”で始まり、！で終わります。複数の行に渡っても構いませんし、行の長さには制限はありません。最終行の！の後には任意のコメントを記述しても構いませんが、複数行は不可です。以下、キーワードを説明します。基本的には記述の順番はありませんが、Split\_Sublattice はベースとなる相を先に記述してください。

### 1). **Defined\_System**

これはデータベースに含まれる元素を定義するものですが、CDB では必須の項目です。この情報はデータファイルの登録時に、検索情報として読み込まれます。

**Defined\_System Mg-Al-O !**

### 2). **Database\_Info**

名称など、ユーザに伝えるべきいろいろな情報を記述します。この情報は CaTCalc のデータファイル選択画面で簡易情報として表示されます。これは省略可能です。

**DataBase\_Info RICT Ceramics DB ver 1.0 !**

### 3). **Database\_Note**

Info と同じで、いろいろな情報を記述しますが、情報はデータが読み込まれた後、Summary タブに表示されます。Database\_Info の補足情報の扱いです。これは省略可能です。

**DataBase\_Note Last updated on 20/May 2021 v1.10 !**

### 4). **Element**

元素情報です。CaTCalc では元素情報は他のファイルで定義していますのでこの項目は省略可能ですが、独自の仮想元素を用いる場合はこれで定義します。TDB の場合と同様に、標準状態の相、mol 重量、H(298.15)-H(0)、などを記述します。

**Element C Graphite 1.2011E+01 1.0540E+03 5.7400E+00 !**

### 5). **Include\_File**

他のデータベースファイルを同時に読み込む場合に用います。特にガス相は通常、IdealGas.ADB を Include すれば良いでしょう。

**Include\_File IdealGas.ADB !**

### 6). **Reject\_Phases**

デフォルトでは非選択とする相を定義します。これが必要となることはほとんどありません。

### 7). **Function**

関数を定義します。関数名は任意の文字数の名称で、その後、下限温度、T (と P) の関数、上限温度の順で記述します。

**Function GSiCSOL 298.15 -88584.0+271.1462\*T-41.2795\*T\*LN(T)-4.36266E-3\*T\*\*2+0.8E+6\*T\*(-1)+0.2E-6\*T\*\*3; 6000 N 2021RICT !**

### 8). **Phase**

相を定義します。相名の次に、相モデル、副格子数と各副格子のサイズを記載します。なお、相モデルとしては現在のところ次の表 1 のものをサポートしています。

**Phase Yb5Si3 CEM 2 5 3 !**

表 1 CaTCalc でサポートされている相モデル

表記	相モデル	説明
Ideal	理想溶液モデル	理想気体に用いる理想溶液モデル

CMPD	純物質化合物	組成幅を持たない各種化合物
CEM	Compound Energy model	Hillert らによって提唱された非理想溶体モデルで、副格子モデルに基づくもので金属系の CALPHAD では標準。
ASM	Associate Species model	会合体モデルの一種だが、副格子モデルに基づき会合体を決定する
MQM	Modified QuasiChemical Model	FactSage のものを若干変形した擬化学モデル
IonicSL	Ionic Two Sublattice Liquid Model	Thermo-Calc の液相モデルではほぼそのままサポート。C などは要問い合わせ
Aqueous	水溶液モデル	HKF や SIT、e-UNIQUAC などの相互作用モデルをサポートした水溶液モデル

## 9). Parameter

パラメータを定義します。現在のところ、次の表のパラメータがサポートされています。

Parameter G(Yb5Si3;Yb:Si;0) 298.15 5\*GHSEYB+3\*GHSESI-398340-33.78256\*T; 6000 N RICT2017 !

表 1 CaTCalc でサポートされている熱力学パラメータ

表記	説明	説明
G	成分の Gibbs エネルギー	標準圧力下での Gibbs エネルギーを T のみの関数として与える。圧力分は含まないことに注意。
L	Redlich-Kister 相互作用係数	相互作用係数
BMAG	Bohr 磁子	Inden-Hillert-Jarl モデルの Bohr 磁子
TC	Curie 温度	キュリー温度。負の場合はネール温度。
TN	Neel 温度	ネール温度
QG	MQM の擬会合体の Gibbs エネルギー	MQM の擬会合体は端成分とは異なる取り扱いをするが、その Gibbs エネルギー
QL	MQM 擬会合体と成分の相互作用係数	擬会合体とその端成分との相互作用係数。詳細は MQM モデル解説書を参照
QM	MQM の 3 体相互作用係数	MQM モデル解説書を参照
QT	MQM の 3 体相互作用係数	MQM モデル解説書を参照
QH	MQM の 2 体相互作用係数	MQM モデル解説書を参照
V0/VT	標準状態におけるモル体積	EOS 解説書を参照
VA	体積熱膨張係数	EOS 解説書を参照
VK	圧縮係数	EOS 解説書を参照
VC,VD	圧縮係数の圧力微分	EOS 解説書を参照
SIT	水溶液の SIT モデルのパラメータ	水溶液モデルの解説書を参照
HKF	水溶液の HKF モデルのパラメータ	水溶液モデルの解説書を参照
UNIQC	水溶液の UNIQUAC モデルのパラメータ	水溶液モデルの解説書を参照

### \*注意

MQM では端成分の Gibbs エネルギーとともに、Z パラメータ（配位数パラメータ）を与える必要がありますが、これは G や QG の次数パラメータで与えます。その他、詳細はモデル解説を参照してください。

## 10). List\_of\_References

参照文献のリスト。

List\_of\_References

1971STU 'J.M. Stuve, L.B. Pankratz, and D.W. Richardson: Bur. Mines Rep. Invest., 1971, vol. 7535, pp. 1-11.!'!

## 11). Manetic\_Phase

磁性の寄与があることと、磁性パラメータを定義します。詳しくは磁性モデルの解説を参照してください。

Magnetic\_Phase FCC\_A1 -3 0.28 !

## 12). Split\_Sublattice

2 相で表現する相モデルであることを示します。規則不規則相変態のものと拡張 CEM の 2 種類あります。詳細は規則不規則変態モデルの解説を参照してください。

Split\_SubLattice BCC\_B2 BCC\_A2 Order-Disorder !

Split\_SubLattice BCC\_B2 BCC\_A2 !

## 2. 関数表限について

関数表現は単一の数値または T と P の関数である。まず下限温度（通常は 298.15K）で始まり、スペースで区切りの上、関数表現を行い、セミコロン";"で終了し、スペースで区切って上限温度を記述する。次の温度範囲がある場合は"Y"で繋ぎ、同様の表現の後、終了する場合は"N"で終わる。その後、スペースで区切ったあと、通常は文献情報を記載し、"!"で文を終了する。なお、関数表現は通常の数学的表現に従うが、割り算は（今のところ）数値以外はサポートされていない。よって、例えば/T は\*T\*\*(-1)と表現する。その他、EXP、LN、SQRT(T)、T(0.5)がサポートされている。

## 3. SGTE-TDB との違いと TDB ファイルの変換

CDB 形式はほとんど TDB 形式と同じですが、行の長さに制限が無いことその他、次のような違いがあります。

1. 圧力分として、理想気体の G-parameter に  $R*T*LN(1E-5P)$  は不要。また、Murnaghan-EOS の場合も Gibbs エネルギーではなく  $V0$ 、 $VK$  などで与える。
2. 元素名は大文字と小文字を区別し例えば Ca と記述。また、electron は E で、/- は不可。
3. 相名も大文字/小文字を区別する。但し、関数名のみ大文字/小文字を区別しない。
4. Ion 成分で charge は括弧付きの Ca(+2) と記述。Ca+2 という表現は不可。
5. 数値については分数をサポート。1/3 など。関数に関しては現在のところ不可（サポート予定）。
6. Parameter で、相名と SubLattice の記述の間の delimiter は semicolon ( ; ) を用いる。
7. Type Code は用いない。Phase の記述に相モデルを明記する。
8. Type\_Definition などの TDB 用のコマンドは不要。

通常の 1 ファイル形式の TDB ファイルに対しては組み込みの変換機能が利用出来ます。CaTCalc のメインメニューの [Databases]-[Import TDB Files] により、CDB 形式へ変換されたデータファイルがデフォルトの Data フォルダに新規作成されます。

最終校正 2022 年 11 月 22 日

株式会社 計算熱力学研究所

Research Institute of Computational Thermodynamics (RICT), Inc.

Homepage: <http://www.rictsyste.ms.com>

Email: [mail@ricsyste.ms.com](mailto:mail@ricsyste.ms.com)