

RICT-Fe_v1 RICT 鉄鋼材料系データベース V1.0

RICT-Fe_v1 はいろいろな鉄鋼材料系の相平衡・状態図計算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い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 Fe のほかに、以下の 22 元素です。

Al B C Ca Co Cr Cu Mg Mn Mo N Nb Ni O P S Si Ta Ti V W Zr

取り扱える成分は今後順次増やして行く計画です。

2. 推奨組成範囲

Fe-X 二元系については、22 系すべて全組成範囲をカバーしています。三元系以上の多元系においても全組成範囲で予測計算することは可能ですが、より確かな予測のためには以下の組成範囲内で用いることをお勧めします。(単位 mass%)

Fe >50

Al <5.0, B <0.5, C <7.0, Ca <0.5, Co <20.0, Cr <30.0, Cu <5.0,

Mg <1.0, Mn <20.0, Mo <10.0, N <5.0, Nb <5.0, Ni <20.0, O <0.1,

P <1.0, S <0.1, Si <5.0, Ta <10.0, Ti <3.0, V <15.0, W <15.0,

Zr <10.0

3. 使用上の注意

- 1) RICT-Fe_v1 には GAS 相が含まれていません。GAS 相が必要な合金系の場合には RICT IdealGas データベースなどと共に用いてください。
- 2) MX_B1 相は Nb, Ti, C, N を主成分とした NaCl 型の炭窒化物です。
M2X_HCP 相は Cr₂N, Nb₂N, Nb₂C などの M2X 型炭窒化物です。
熱力学的には MX_B1 相は FCC_A1 相とまた M2X_HCP 相は HCP_A3 相と同一ですが、RICT-Fe_v1 ではこれらを便宜上区別して定義しています。
- 3) B2_BCC 相は B2 規則相, L12_FCC 相は L1₂ 規則相で、それぞれ B2_BCC は BCC_A2 相を、L12_FCC は FCC_A1 相を不規則相として用います。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。