

RICT-TBC RICT 遮熱コーティング材料系データベース

RICT-TBC は遮熱コーティング材料 (Thermal barrier coating) 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 ZrO_2 のほかに、以下の 22 元素です。

Al Hf Sc Y Zr Ce Dy Er Eu Gd Ho La Lu Nd Pr Sm Tb Tm Yb

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

ZrO_2 -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-TBC には RICT IdealGas データベースを同時に読み込むように指定されています。

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

〒841-0016 佐賀県鳥栖市田代外町 674-18

Tel: 0942-80-0547 email: mail@rictsyste.ms.com

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

4. 相の種類と構成

本データベースを構成している相の種類とその構成成分を以下に示します。

1) 液相と一次固溶体相

相名	副格子と構成成分 (Va は空格子点)	
LIQUID	(Al, AlN, AlO _{3/2} , B, C, Ca, Co, Cr, CrO _{3/2} , Cu, Cu ₂ S, Fe, FeO, FeO _{3/2} , FeS, Mg, Mn, MnO, MnO _{3/2} , MnS, Mo, N, Nb, NbO, NbO ₂ , Ni, NiO, NiS, P, S, S ₂ Zr, S ₃ Zr ₂ , Si, SiO ₂ , Ta, Ti, TiO, TiO ₂ , TiO _{3/2} , V, W, Zr) ₁	
BCC_A2	(Al, Ca, Co, Cr, Cu, Fe, Mg, Mn, Mo, Nb, Ni, P, S, Si, Ta, Ti, V, W, Zr) ₁ (B, C, N, O, Va) ₃	
FCC_A1	(Al, Ca, Co, Cr, Cu, Fe, Mg, Mn, Mo, Nb, Ni, P, S, Si, Ta, Ti, V, W, Zr) ₁ (B, C, N, O, Va) ₁	
HCP_A3	(Al, Ca, Co, Cr, Cu, Fe, Mg, Mn, Mo, Nb, Ni, Si, Ta, Ti, V, W, Zr) ₁ (B, C, N, O, Va) _{0.5}	
BETA_RHOMBO_B	(B) ₉₃ (B, C, Si) ₁₂	
CBCC_A12	(Al, Co, Cr, Cu, Fe, Mg, Mn, Ni, Si, Ti, V, Zr) ₁ (C, Va) ₁	αMn
CUB_A13	(Al, Co, Cr, Cu, Fe, Mg, Mn, Ni, Si, Ti, V, Zr) ₁ (C, Va) ₁	βMn
DIAMOND_FCC_A4	(Al, B, C, O, Si) ₁	
FC_ORTHORHOMBIC	(S) ₁	
GRAPHITE	(B, C) ₁	
RED_P	(P) ₁	
WHITE_P	(P) ₁	

2) 規則相

相名	副格子と構成成分 (Va は空格子点)	
B2_BCC	(Al, Co, Cr, Cu, Fe, Mg, Ni, Si, Ta, Ti, Zr) _{1.5} (Al, Co, Cr, Cu, Fe, Mg, Ni, Si, Ta, Ti, Zr) _{1.5} (B, C, N, O, Va) ₃	
L12_FCC	(Al, Co, Fe, Ni, Ta, Ti, V, Zr) _{0.75} (Al, Co, Fe, Ni, Ta, Ti, V, Zr) _{0.25} (B, C, N, O, Va) ₁	

B2_BCC 相は B2 規則相, L12_FCC 相は L1₂ 規則相です. 不規則部として B2_BCC 相は BCC_A2 相を, L12_FCC 相は FCC_A1 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, 不規則部を除いた単独相としては用いられません.

3) NaCl 型炭窒化物相と M2X 型炭窒化物相

相名 副格子と構成成分 (Va は空格子点)

MX_B1 (Co, Cr, Fe, Mn, Mo, Nb, Ni, Ta, Ti, V, W, Zr)₁ (C, N, Va)₁
M2X_HCP (Co, Cr, Fe, Mn, Mo, Nb, Ni, Ta, Ti, V, W, Zr)₁ (C, N, Va)_{0.5}

3 章でも説明したように, MX_B1 相は Nb, Ti, C, N を主成分とした NaCl 型の炭窒化物, 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. MX_B1 相と FCC_A1 相, M2X_HCP 相と HCP_A3 相は第二副格子(侵入型成分副格子)が概ね半分以上(C,N)で占められているかどうかで区別しています. このため [C]+[N]量が多い組成域において, 本来連続すべき領域に FCC_A1 相/MX_B1 相や HCP_A3 相/M2X_HCP 相の境界線が描かれることがあります. MX_B1 相や M2X_HCP 相を除外することで, この境界線は描かれませんが, 相名は炭窒化物相も金属基相と同じそれぞれ FCC_A1, HCP_A3 と表示されます.

4) その他の相 (アルファベット順)

相名 副格子と構成成分 (Va は空格子点)

AL13FE4 (Al)_{0.6275} (Al, Si, Va)_{0.1375} (Fe, Mn)_{0.2350}
AL2CR3 (Al)_{0.4} (Cr)_{0.5} (Cr)_{0.1}
AL2FE (Al, Si)₂ (Fe, Mn)₁
AL2FE2O6 (Al)₂ (Fe)₂ (O)₆ Al₂O₃·Fe₂O₃
AL2S3 (Al)₂ (S)₃
AL2TiO5 (Al)₂ (Ti)₁ (O)₅
AL3NB_D022 (Al)₃ (Nb)₁
AL4C3 (Al, Si)₄ (C)₃
AL5FE2_D811 (Al, Si)₅ (Fe, Mn)₂
AL5FE4 (Al, Fe, Mn)₁ ε in Fe-Al
AL7CR (Al)₆ (Cr)₁ (Al)₁
ALN (Al)₁ (N)₁
ALPHA_SPINEL (Mg⁺², Mn⁺², Mn⁺³, Ni⁺²)₁ (Al⁺³, Cr⁺³, Fe⁺³, Mn⁺², Mn⁺³, Va)₂ (Mn⁺², Va)₂ (O⁻²)₄
ANDALUSITE (Al)₁ (Al)₁ (Si)₁ (O)₅ Al₂O₃·SiO₂
ANORTHITE (Ca)₁ (Al)₂ (Si)₂ (O)₈ CaO·Al₂O₃·2 SiO₂
B4C (B₁₁C, B₁₂)₁ (B₂, C₂B, CB₂)₁

(つづく)

相名	副格子と構成成分 (Va は空格子点)	(つづき)

BN_HP4	(B) ₁ (N) ₁	
CA1AL12O19	(Ca) ₁ (Al) ₁₂ (O) ₁₉	CaO・6 Al ₂ O ₃
CA1AL16MG2O27	(CaO) ₁ (Al ₂ O ₃) ₈ (MgO) ₂	CaO・8 Al ₂ O ₃ ・2 MgO
CA1AL2O4	(Ca) ₁ (Al) ₂ (O) ₄	CaO・Al ₂ O ₃
CA1AL4O7	(Ca) ₁ (Al) ₄ (O) ₇	CaO・2 Al ₂ O ₃
CACR2O4_A	(Ca) ₁ (Cr) ₂ (O) ₄	α CaO・Cr ₂ O ₃
CACR2O4_B	(Ca) ₁ (Cr) ₂ (O) ₄	β CaO・Cr ₂ O ₃
CA2AL28MG2O46	(CaO) ₂ (Al ₂ O ₃) ₁₄ (MgO) ₂	2 CaO・14 Al ₂ O ₃ ・2 MgO
CA2FE2O5	(Ca) ₂ (Fe) ₂ (O) ₅	2 CaO・Fe ₂ O ₃
CA2SIO4_ALPHA	(Ca ⁺² , Mg ⁺²) ₂ (Si ⁺⁴) ₁ (O ⁻²) ₄	α-2 CaO・SiO ₂
CA2SIO4_ALPHA_PRIME	(Ca ⁺² , Fe ⁺² , Mg ⁺²) ₂ (Si ⁺⁴) ₁ (O ⁻²) ₄	α'-2 CaO・SiO ₂
CA3AL2O6	(Ca) ₃ (Al) ₂ (O) ₆	3 CaO・Al ₂ O ₃
CA3AL4MGO10	(CaO) ₃ (Al ₂ O ₃) ₂ (MgO) ₁	3 CaO・2 Al ₂ O ₃ ・MgO
CA4FE17O29	(Ca ⁺²) ₄ (Fe ⁺²) ₁ (Fe ⁺³) ₁₆ (O ⁻²) ₂₉	4 CaO・FeO・8 Fe ₂ O ₃
CA4FE9O17	(Ca ⁺²) ₄ (Fe ⁺²) ₁ (Fe ⁺³) ₈ (O ⁻²) ₁₇	4 CaO・FeO・4 Fe ₂ O ₃
CAFE2O4	(Ca) ₁ (Fe) ₂ (O) ₄	CaO・Fe ₂ O ₃
CAFE3O5	(Ca ⁺²) ₁ (Fe ⁺²) ₁ (Fe ⁺³) ₂ (O ⁻²) ₅	CaO・FeO・Fe ₂ O ₃
CAFE4O7	(Ca) ₁ (Fe) ₄ (O) ₇	CaO・2 Fe ₂ O ₃
CAFE5O7	(Ca ⁺²) ₁ (Fe ⁺²) ₃ (Fe ⁺³) ₂ (O ⁻²) ₇	CaO・3 FeO・Fe ₂ O ₃
CAMN2O4	(Ca) ₁ (Mn) ₂ (O) ₄	
CAMNO3	(Ca) ₁ (Mn) ₁ (O) ₃	
CEMENTITE	(Al, Co, Cr, Fe, Mn, Mo, Nb, Ni, Si, V, W) ₃ (B, C, N) ₁	
CHI_A12	(Cr, Fe, Ni) ₂₄ (Cr, Mo, W, Zr) ₁₀ (Cr, Fe, Mo, Ni, W) ₂₄	
CLINO_PYROXENE	(Ca ⁺² , Fe ⁺² , Mg ⁺²) ₁ (Fe ⁺² , Mg ⁺²) ₁ (Si ⁺⁴) ₂ (O ⁻²) ₆	
CO3MO_D019	(Co) ₃ (Mo) ₁	
CO3V	(Co, V) ₃ (Co, V) ₁	
CORDIERITE	(Al) ₄ (Mg) ₄ (O) ₁₈ (Si) ₅	Mg ₂ Al ₁₃ (AlSi ₅)O ₁₈
CORUNDUM	(Al ⁺³ , Cr ⁺² , Cr ⁺³ , Fe ⁺² , Fe ⁺³ , Mn ⁺³ , Ti ⁺³) ₂ (Cr ⁺³ , Fe ⁺³ , Ni ⁺² , Va) ₁ (O ⁻²) ₃	
CR2B_ORTH	(Cr, Fe, Mn, Ni) _{0.667} (B) _{0.333}	
CR3MN5	(Cr) ₃ (Mn) ₅	
CR3SI	(Co, Cr, Fe, Mo, Nb, Si, V) ₃ (Al, Co, Cr, Nb, Si, V) ₁	
CR12P7	(Cr) ₁₂ (P) ₇	
CRB2	(Cr) _{0.333} (B) _{0.667}	
CRISTOBALITE	(SiO ₂) ₁	

		(つづく)

相名	副格子と構成成分 (Va は空格子点)	(つづき)
CRP2	(Cr) ₁ (P) ₂	
CRP4	(Cr) ₁ (P) ₄	
CU3P	(Cu, Fe) ₃ (P) ₁	
CUO	(Cu) ₁ (O) ₁	
CUPRITE_C3	(Cu) ₂ (O) ₁	Cu ₂ O
DIGENITE	(Cu, Fe, Va) ₂ (Cu, Va) ₁ (S) ₁	
FE23ZR6	(Fe) ₂₃ (Zr) ₆	
FE2M_C14	(Fe) ₂ (Mo, W) ₁	
FE2S3O12	(Fe) ₂ (S) ₃ (O) ₁₂	
FE2SI	(Fe) _{0.666667} (Si) _{0.333333}	
FE2SITI_L21	(Fe) _{0.50} (Si) _{0.25} (Ti) _{0.25}	
FE4NB2O9	(Fe ⁺³) ₄ (Nb ⁺²) ₁ (Nb ⁺⁴) ₁ (O ⁻²) ₉	
FE4N_LP1	(Co, Cr, Fe, Mn, Ni) ₄ (C, N) ₁	
FE8SI2C	(Fe) ₈ (Si) ₂ (C) ₁	
FECN_CHI	(Fe) _{2.2} (C, N) ₁	
FEMP	(Fe, Ti) ₁ (Cr, Fe, Mn, Ti) ₁ (P) ₁	
FEP	(Fe) ₁ (P) ₁	
FEP2_C18	(Fe) ₁ (P) ₂	
FEP4	(Fe) ₁ (P) ₄	
FESI2_H	(Fe) ₃ (Si) ₇	
FESI2_L	(Fe) ₁ (Si) ₂	
FESO4	(Fe) ₁ (S) ₁ (O) ₄	
FETI	(Fe) ₁ (Nb, Ti, Zr) ₁	
FEZR2	(Fe, Zr) ₁ (Fe, Ti, Zr) ₂	
FEZR3	(Fe, Zr) ₁ (Fe, Zr) ₃	
FLUORITE_C1	(Mn ⁺² , Mn ⁺³ , Ni ⁺² , Zr, Zr ⁺⁴) ₂ (O ⁻² , Va) ₄	γ ZrO ₂
G_PHASE	(Al, Co, Fe, Ni, Ti) ₁₆ (Mn, Nb, Ti, Zr) ₆ (Co, Fe, Ni, Si) ₇	
HALITE	(Al ⁺³ , Ca ⁺² , Cr ⁺³ , Fe ⁺² , Fe ⁺³ , Mg ⁺² , Mn ⁺² , Mn ⁺³ , Ni ⁺² , Ni ⁺³ , Si ⁺⁴ , Va) ₁ (O ⁻²) ₁	
HATRURITE	(Ca) ₃ (Si) ₁ (O) ₅	3 CaO•SiO ₂
HIGH_SIGMA	(Fe, Mn, Ni) ₈ (Cr, Mo) ₄ (Cr, Fe, Mn, Mo, Ni, Si) ₁₈	
KAPPA_E21	(Al, Co, Fe, Ni) ₃ (Al, Co, Fe, Ni) ₁ (C, Va) ₁	Provskite carbide Fe ₃ AlC
KSI_CARBIDE	(Cr, Fe, Mo, W) ₃ (C) ₁	ξ Carbide
KYANITE	(Al) ₁ (Al) ₁ (Si) ₁ (O) ₅	Al ₂ O ₃ •SiO ₂

(つづく)

相名	副格子と構成成分 (Va は空格子点)	(つづき)
LAVES_C14	(Al, Co, Cr, Cu, Fe, Mg, Mn, Mo, Nb, Ni, Si, Ta, Ti, W, Zr) ₂ (Al, Co, Cr, Cu, Fe, Mg, Mn, Mo, Nb, Ni, Si, Ta, Ti, W, Zr) ₁	
LAVES_C15	(Al, Co, Cr, Cu, Fe, Mg, Nb, Ni, Si, Ti, Zr) ₂ (Al, Co, Cr, Cu, Fe, Mg, Nb, Ni, Si, Ti, Zr) ₁	
LOWCLINO_PYROXENE	(Ca ⁺² , Mg ⁺²) ₁ (Mg ⁺²) ₁ (Si ⁺⁴) ₂ (O ⁻²) ₆	(Ca,Mg)MgSi ₂ O ₆
M12C	(Co) ₆ (W) ₆ (C) ₁	Co ₆ W ₆ C
M23C6	(Co,Cr, Fe, Mn, Ni, V) ₂₀ (Co,Cr, Fe, Mn, Mo, Ni, V, W) ₃ (B, C) ₆	
M2O3C	(Al ⁺³ , Cr ⁺³ , Fe ⁺³ , Mn ⁺³ , Ni ⁺² , Zr ⁺⁴) ₂ (O ⁻² , Va) ₃ (O ⁻² , Va) ₁	Cubic M ₂ O ₃
M2O3H	(Mn ⁺³ , Zr ⁺⁴) ₂ (O ⁻² , Va) ₃ (O ⁻² , Va) ₁	Hexagonal M ₂ O ₃
M2B_TETR	(Cr, Fe, Mo, Ni, W) _{0.667} (B) _{0.333}	
M2P	(Cr, Fe, Mn, Ni, Ti) ₂ (P) ₁	
M3B2	(Cr, Fe, Mo, Ni, W) _{0.4} (Cr, Fe, Ni) _{0.2} (B) _{0.4}	
M3C2	(Cr, Mo, V, W) ₃ (C) ₂	
M3P_D0E	(Cr, Cu, Fe, Mn, Ni, Ti) ₃ (P) ₁	
M3SI	(Fe, Mn) ₃ (Si) ₁	(Mn, Fe) ₃ Si
M5C2	(Fe, Mn, V) ₅ (C) ₂	
M5SI	(Cr, Fe, Mn) _{0.625} (Si) _{0.375}	(Fe, Mn) ₅ Si ₃
M6C	(Co, Fe, Ni) ₂ (Mo, Nb, W) ₂ (Co, Cr, Fe, Mo, Nb, Ni, Si, V, W) ₂ (C) ₁	
M7C3	(Al, Co, Cr, Fe, Mn, Mo, Nb, Ni, Si, V, W) ₇ (B, C) ₃	
MB_B33	(Cr, Fe, Mo, Nb, Ni, Ta, Ti, V) ₁ (B) ₁	
MB2_C32	(Al, Ti) ₁ (B) ₂	
MC_ETA	(Mo, Ti, V, W) ₁ (C, Va) ₁	η Mo carbide
MC_SHP	(Mo, W) ₁ (C, N) ₁	WC / MoC (Simple Hexagonal Pached)
MELILITE	(Ca ⁺²) ₂ (Al ⁺³ , Mg ⁺²) ₁ (Al ⁺³ , Si ⁺⁴) ₁ (Si ⁺⁴) ₁ (O ⁻²) ₇	Akermanite / Gehlenite
MERWINITE	(Ca) ₃ (Mg) ₁ (Si) ₂ (O) ₈	3 CaO•MgO•2 SiO ₂
MG2NI	(Mg) ₂ (Ni) ₁	
MG2SI	(Mg) ₂ (Si) ₁	
MGC2	(Mg) ₁ (C) ₂	
MN2O3	(Al ⁺³ , Cr ⁺³ , Fe ⁺³ , Mn ⁺² , Mn ⁺³ , Ni ⁺²) ₂ (O ⁻²) ₃	
MN6N4	(Mn) ₆ (N) ₄	
MN6N5	(Mn) ₆ (N) ₅	
MNS	(Ca, Cr, Cu, Fe, Mg, Mn) ₁ (S) ₁	
MNTA	(Mn) ₁ (Ta) ₁	
MOB5	(Mo) _{0.32} (B) _{0.68}	

(つづく)

相名	副格子と構成成分 (Va は空格子点)	(つづき)
MO5SI3_D8M	(Mo) ₅ (Si) ₃	
MOSI2_C11B	(Mo) ₁ (Si) ₂	
MSL_B20	(Cr, Fe, Mn) _{0.5} (Si) _{0.5}	
MULLITE	(Al ⁺³) ₁ (Al ⁺³) ₁ (Al ⁺³ , Si ⁺⁴) ₁ (O ⁻² , Va) ₅	3 Al ₂ O ₃ • 2 SiO ₂ - 2 Al ₂ O ₃ • SiO ₂
MU_PHASE	(Co, Cr, Fe, Mn, Nb, Ni, Ta) ₇ (Mo, Nb, Ta, W) ₂ (Co, Cr, Fe, Mo, Nb, Ni, Ta, W) ₄	
NBNI3	(Nb, Ni) ₁ (Nb, Ni) ₃	
NBO	(Nb) ₁ (O) ₁	
NI3S2	(Ni) _{0.6} (S) _{0.4}	
NI3TI	(Ni) _{0.75} (Ti) _{0.25}	
NI6MNO8	(Mg ⁺² , Ni ⁺²) ₆ (Mn ⁺⁴) ₁ (O ⁻²) ₈	
NIMNO3	(Mn ⁺³ , Mn ⁺⁴ , Ni ⁺²) ₂ (O ⁻²) ₃	
NITI2	(Ni) _{0.3333} (Ti) _{0.6667}	
OLIVINE	(Ca ⁺² , Fe ⁺² , Mg ⁺² , Mn ⁺² , Ni ⁺²) ₁ (Ca ⁺² , Fe ⁺² , Mg ⁺² , Mn ⁺² , Ni ⁺²) ₁ (Si ⁺⁴) ₁ (O ⁻²) ₄	
ORTHO_PYROXENE	(Ca ⁺² , Mg ⁺²) ₁ (Mg ⁺²) ₁ (Si ⁺⁴) ₂ (O ⁻²) ₆	
PI	(Cr) _{12.8} (Fe, Ni) _{7.2} (N) ₄	Cr _{12.8} (Fe,Ni) _{7.2} N ₄
PROTO_PYROXENE	(Ca ⁺² , Mg ⁺²) ₁ (Si ⁺⁴) ₁ (O ⁻²) ₃	Protodiopside
PSEUDO_WOLLASTONITE	(Ca) ₁ (Si) ₁ (O) ₃	CaO • SiO ₂
PYRITE	(Fe) ₁ (S) ₂	FeS ₂
PYRRHOTITE	(Cu, Fe, Mn, Ti, Va) ₁ (S) ₁	Fe _{1-x} S
P_PHASE	(Cr, Fe, Ni) ₂₄ (Cr, Fe, Mo, Ni) ₂₀ (Mo) ₁₂	Fe ₁₁ Mo ₅₃ Ni ₃₆
QUARTZ	(SiO ₂) ₁	
RANKINITE	(Ca) ₃ (Si) ₂ (O) ₇	3 CaO • 2 SiO ₂
RHODONITE	(Mn) ₁ (Si) ₁ (O) ₃	MnO • SiO ₂
RUTILE_MO2	(Mn ⁺⁴ , Nb ⁺⁴ , Ti ⁺⁴) ₁ (O ⁻²) ₂	
R_PHASE	(Co, Cr, Fe, Mn, Ni) ₂₇ (Mo, W) ₁₄ (Co, Cr, Fe, Mn, Mo, Ni, W) ₁₂	
SAPPHIRINE	(Al) ₁₈ (Mg) ₇ (O) ₄₀ (Si) ₃	Al ₁₈ Mg ₇ O ₄₀ Si ₃
SI3N4	(Si) ₃ (N) ₄	
SIB3	(Si) ₂ (B, Si) ₆ (B) ₆	
SIC	(Si) ₁ (C) ₁	
SIGMA	(Al, Co, Cr, Fe, Mn, Ni, Ta, V) ₁₀ (Cr, Mo, Nb, Ta, Ti, V, W) ₄ (Al, Co, Cr, Fe, Mn, Mo, Nb, Ni, Si, Ta, Ti, V, W) ₁₆	
SILLIMANITE	(Al) ₁ (Al) ₁ (Si) ₁ (O) ₅	Al ₂ O ₃ • SiO ₂
SIS2	(Si) ₁ (S) ₂	
SPINEL	(Al ⁺³ , Cr ⁺² , Cr ⁺³ , Fe ⁺² , Fe ⁺³ , Mg ⁺² , Mn ⁺² , Ni ⁺²) ₁ (Al ⁺³ , Cr ⁺³ , Fe ⁺² , Fe ⁺³ , Mg ⁺² , Mn ⁺² , Mn ⁺³ , Mn ⁺⁴ , Ni ⁺² , Va) ₂ (Cr ⁺² , Fe ⁺² , Mg ⁺² , Mn ⁺² , Va) ₂ (O ⁻²) ₄	
		(つづく)

相名	副格子と構成成分 (Va は空格子点)	(つづき)
TA3FE2	(Fe, Ta) ₃ (Fe, Ta) ₂	
TAN_EPS	(Ta) ₁ (N) ₁	
TI2N	(Ti) ₂ (C, N) ₁	
TI3O2	(Ti ⁺²) ₂ (Ti) ₁ (O ⁻²) ₂	
TI4C2S2	(Ti) ₄ (C) ₂ (S) ₂	
TIO	(Ti ⁺² , Ti ⁺³ , Va) ₁ (Ti, Va) ₁ (O ⁻²) ₁	
TIO_ALPHA	(Ti) ₁ (O) ₁	
TRIDYMITE	(SiO ₂) ₁	
WOLLASTONITE	(Ca ⁺² , Fe ⁺² , Mg ⁺²) ₁ (Si ⁺⁴) ₁ (O ⁻²) ₃	CaO·SiO ₂
ZR2S3	(Zr) ₂ (S) ₃	
ZRO2_MONO	(Ni ⁺² , Zr ⁺⁴) ₁ (O ⁻² , Va) ₂	
ZRO2_TETR	(Mn ⁺² , Mn ⁺³ , Ni ⁺² , Zr ⁺⁴) ₁ (O ⁻² , Va) ₂	
ZRS2	(Zr) ₁ (S) ₂	
Z_PHASE	(Cr, Fe) ₁ (Mo, Nb, V) ₁ (N, Va) ₁	

以上

最終校正 2018 年 8 月 15 日

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

〒841-0016 佐賀県鳥栖市田代外町 674-18

Tel: 0942-80-0547 email: mail@rictsyste.ms.com

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