Fe,Co,Ni の磁気エネルギー

物質・材料研究機構　小山敏幸

参考文献[Y-Y.Chuang, R. Schmid and Y. A. Chang, Metall. Trans. A , 16A(1985), 153-165.]にしたがって、Fe, Ni,Co の磁気エネルギーについて簡単に説明する。詳細は上記論文を参照されたい。

1．変数設定

$C_m(T)$　：磁気比熱

T_c　：キュリー温度

cfm　：Completely ferromagnetic state

cpm　：Completely paramagnetic state

eqm　：Equilibrium magnetic state（T_c 以下では強磁性状態。しかし cfm ではない。
T_c 以上では常磁性状態、しかし cpm ではない。）

$\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T)$　：$cfm \to eqm$ における磁気エントロピー変化

$\Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(T)$　：$cfm \to eqm$ における磁気エンタルピー変化

$\Delta^\circ G^{cfm\to eqm}(T)$　：$cfm \to eqm$ における自由エネルギー変化

p　：常磁性状態の C_m における指数因子（bcc の場合 $p=1$ で、fcc の場合 $p=2$）

k_f　：強磁性状態の C_m における比例係数

k_p　：常磁性状態の C_m における比例係数

f_S　：T_c 以上における磁気エントロピー成分の割合

f_H　：T_c 以上における磁気エンタルピー成分の割合

2．磁気自由エネルギーの計算

完全に磁気規則化した状態（完全強磁性）をエネルギーの基準にとった場合の各種熱力学量について導出しよう。（なお、エネルギー基準をこのように取る理由は、各種熱力学量も計算において、温度 0(K)からの積分が行われるからである。）

まず、キュリー温度 T_c 以上および以下における磁気比熱の関数形を、

$$C_m(T) = k_f \frac{T}{T_c} \exp\left\{-4\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\}, \qquad (T < T_c) \tag{1a}$$

$$C_m(T) = k_p \frac{T}{T_c} \exp\left\{8p\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\}, \qquad (T > T_c) \tag{1b}$$

のように近似する。磁気エントロピーは、

$$\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T) = \int_{T'=0}^{T'=T} \frac{C_m(T')}{T'} dT' \tag{2}$$

にて定義されるので、式(1)を代入することによって、

$$\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T)=\int_{T'=0}^{T'=T}\frac{1}{T'}k_f\frac{T'}{T_c}\exp\left\{-4\left(1-\frac{T'}{T_c}\right)\right\}dT'$$

$$=\frac{k_f}{T_c}\int_{T'=0}^{T'=T}\exp\left\{-4\left(1-\frac{T'}{T_c}\right)\right\}dT'=\frac{k_f}{T_c}\left[\frac{T_c}{4}\exp\left\{-4\left(1-\frac{T'}{T_c}\right)\right\}\right]_0^T \tag{3a}$$

$$=\frac{k_f}{4}\left[\exp\left\{-4\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\}-\exp\{-4\}\right],\qquad (T\le T_c)$$

$$\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T)=\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T_c)+\int_{T'=T_c}^{T'=T}\frac{1}{T'}k_p\frac{T'}{T_c}\exp\left\{8p\left(1-\frac{T'}{T_c}\right)\right\}dT'$$

$$=\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T_c)+\frac{k_p}{T_c}\int_{T'=T_c}^{T'=T}\exp\left\{8p\left(1-\frac{T'}{T_c}\right)\right\}dT'$$

$$=\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T_c)+\frac{k_p}{T_c}\left[-\frac{T_c}{8p}\exp\left\{8p\left(1-\frac{T'}{T_c}\right)\right\}\right]_{T_c}^T \tag{3b}$$

$$=\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T_c)+\frac{k_p}{8p}\left[-\exp\left\{8p\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\}+1\right]$$

$$=\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T_c)+\frac{k_p}{8p}\left[1-\exp\left\{8p\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\}\right],\qquad (T\ge T_c)$$

と計算される。次に、エンタルピーは、

$$\Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(T)=\int_{T'=0}^{T'=T}C_m(T')dT' \tag{4}$$

にて定義されるので、式(1a,b)を代入することによって、

$$\Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(T)=\int_{T'=0}^{T'=T}k_f\frac{T'}{T_c}\exp\left\{-4\left(1-\frac{T'}{T_c}\right)\right\}dT'$$

$$=\frac{k_f}{T_c}\int_{T'=0}^{T'=T}T'\exp\left\{-4\left(1-\frac{T'}{T_c}\right)\right\}dT'$$

$$=\frac{k_f}{T_c}\left\{\left[T'\frac{T_c}{4}\exp\left\{-4\left(1-\frac{T'}{T_c}\right)\right\}\right]_0^T-\int_{T'=0}^{T'=T}\frac{T_c}{4}\exp\left\{-4\left(1-\frac{T'}{T_c}\right)\right\}dT'\right\}$$

$$=\frac{k_f}{T_c}\left\{\frac{T_c}{4}T\exp\left\{-4\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\}-\frac{T_c}{4}\left[\frac{T_c}{4}\exp\left\{-4\left(1-\frac{T'}{T_c}\right)\right\}\right]_0^T\right\}$$

$$=\frac{k_f}{T_c}\left\{\frac{T_c}{4}T\exp\left\{-4\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\}-\frac{T_c^2}{16}\left[\exp\left\{-4\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\}-\exp\{-4\}\right]\right\}$$

$$=\frac{k_f}{4}\left(T-\frac{T_c}{4}\right)\exp\left\{-4\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\}+\frac{k_fT_c}{16}\exp\{-4\},\qquad (T\le T_c) \tag{5a}$$

$$
\begin{aligned}
\Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(T) &= \Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(T_c) + \int_{T'=T_c}^{T'=T} k_p \frac{T'}{T_c} \exp\left\{8p\left(1-\frac{T'}{T_c}\right)\right\} dT' \\
&= \Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(T_c) + \frac{k_p}{T_c}\int_{T'=T_c}^{T'=T} T' \exp\left\{8p\left(1-\frac{T'}{T_c}\right)\right\} dT' \\
&= \Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(T_c) + \frac{k_p}{T_c}\left\{\begin{array}{l} \left[T' \dfrac{T_c}{-8p}\exp\left\{8p\left(1-\dfrac{T'}{T_c}\right)\right\}\right]_{T_c}^{T} \\ -\displaystyle\int_{T'=T_c}^{T'=T} \frac{T_c}{-8p}\exp\left\{8p\left(1-\frac{T'}{T_c}\right)\right\} dT' \end{array}\right\} \\
&= \Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(T_c) + \frac{k_p}{T_c}\left\{\begin{array}{l} -\dfrac{T_c}{8p} T \exp\left\{8p\left(1-\dfrac{T}{T_c}\right)\right\} + \dfrac{T_c^2}{8p} \\ +\dfrac{T_c}{8p}\left[\dfrac{T_c}{-8p}\exp\left\{8p\left(1-\dfrac{T'}{T_c}\right)\right\}\right]_{T_c}^{T} \end{array}\right\} \\
&= \Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(T_c) + \frac{k_p}{T_c}\left\{\begin{array}{l} -\dfrac{T_c}{8p} T \exp\left\{8p\left(1-\dfrac{T}{T_c}\right)\right\} + \dfrac{T_c^2}{8p} \\ -\dfrac{T_c^2}{(8p)^2}\left[\exp\left\{8p\left(1-\dfrac{T}{T_c}\right)\right\}-1\right] \end{array}\right\} \\
&= \Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(T_c) + \frac{k_p T_c}{8p}\left(1+\frac{1}{8p}\right) - \frac{k_p}{8p}\left(T+\frac{T_c}{8p}\right)\exp\left\{8p\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\}, \quad (T \ge T_c)
\end{aligned} \tag{5b}
$$

自由エネルギーは、

$$
\Delta^\circ G^{cfm\to eqm}(T) = \Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(T) - T\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T) \tag{6}
$$

にて定義されるので、以上から、

$$
\begin{aligned}
\Delta^\circ G^{cfm\to eqm}(T) &= \frac{k_f}{4}\left(T-\frac{T_c}{4}\right)\exp\left\{-4\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\} + \frac{k_f T_c}{16}\exp\{-4\} \\
&\quad - T\frac{k_f}{4}\left[\exp\left\{-4\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\} - \exp\{-4\}\right] \\
&= -\frac{k_f T_c}{16}\exp\left\{-4\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\} + \frac{k_f}{4}\left(T+\frac{T_c}{4}\right)\exp\{-4\}, \qquad (T \le T_c)
\end{aligned} \tag{7a}
$$

$$
\begin{aligned}
&\Delta^\circ G^{cfm\to eqm}(T) \\
&= \Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(T_c) - T\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T_c) \\
&\quad + \frac{k_p T_c}{8p}\left(1+\frac{1}{8p}\right) - \frac{k_p}{8p}\left(T+\frac{T_c}{8p}\right)\exp\left\{8p\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\} - T\frac{k_p}{8p}\left[1-\exp\left\{8p\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\}\right] \\
&= \frac{k_f}{4}\left(T_c - \frac{T_c}{4}\right)\exp\left\{-4\left(1-\frac{T_c}{T_c}\right)\right\} + \frac{k_f T_c}{16}\exp\{-4\} - T\left\{\frac{k_f}{4}\left[\exp\left\{-4\left(1-\frac{T_c}{T_c}\right)\right\} - \exp\{-4\}\right]\right\} \\
&\quad + \frac{k_p T_c}{8p}\left(1+\frac{1}{8p}\right) - \frac{k_p}{8p}\left(T+\frac{T_c}{8p}\right)\exp\left\{8p\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\} - T\frac{k_p}{8p}\left[1-\exp\left\{8p\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\}\right] \\
&= \frac{3k_f T_c}{16} + \frac{k_f T_c}{16}\exp\{-4\} - \frac{k_f T}{4} + \frac{k_f T}{4}\exp\{-4\} + \frac{k_p}{8p}\left(T_c + \frac{T_c}{8p} - T\right) - \frac{k_p T_c}{(8p)^2}\exp\left\{8p\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\} \\
&= \frac{3k_f T_c}{16} + \frac{k_f}{4}\left(T+\frac{T_c}{4}\right)\exp\{-4\} - \left(\frac{k_f}{4}+\frac{k_p}{8p}\right)T + \frac{k_p T_c}{(8p)^2}(8p+1) - \frac{k_p T_c}{(8p)^2}\exp\left\{8p\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\} \\
&\hspace{30em}, (T \ge T_c) \qquad \text{(7b)}
\end{aligned}
$$

となる。

ここで、T_c 以上における磁気エントロピー成分の割合を f_S、および、T_c 以上における磁気エンタルピー成分の割合を f_H とすると、

$$
\begin{aligned}
f_H &= \frac{\Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(\infty) - \Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(T_c)}{\Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(\infty)} \\
f_S &= \frac{\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(\infty) - \Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T_c)}{\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(\infty)}
\end{aligned}
\qquad (8)
$$

と定義され、

$$
\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T_c) = \frac{k_f}{4}\left[\exp\left\{-4\left(1-\frac{T_c}{T_c}\right)\right\} - \exp\{-4\}\right] = \frac{k_f}{4}\left[1-\exp\{-4\}\right]
$$

であるので、

$$
\begin{aligned}
f_S &= \frac{\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(\infty) - \Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T_c)}{\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(\infty)} = 1 - \frac{\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T_c)}{\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(\infty)} \\
&\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T_c) = (1-f_S)\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(\infty) \\
&\frac{k_f}{4}\left[1-\exp\{-4\}\right] = (1-f_S)\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(\infty) \\
&\therefore\ k_f = \frac{4(1-f_S)}{1-\exp\{-4\}}\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(\infty)
\end{aligned}
\qquad (9)
$$

が得られ、また、

$$\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T) = \Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T_c) + \frac{k_p}{8p}\left[1-\exp\left\{8p\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\}\right]$$

$$\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(\infty) = \Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T_c) + \frac{k_p}{8p}\left[1-\exp\left\{8p\left(1-\frac{\infty}{T_c}\right)\right\}\right] = \Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T_c) + \frac{k_p}{8p} \qquad (10)$$

$$\therefore\ f_S = \frac{\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(\infty) - \Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T_c)}{\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(\infty)} = \frac{k_p}{8p}\frac{1}{\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(\infty)}$$

$$k_p = 8p\, f_S \Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(\infty)$$

となる。温度無限における磁気エントロピーは、通常、

$$\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(\infty) = C_\alpha R\ln(\beta+1) \qquad (11)$$

と近似することが出来、特に、Fe,Ni,Co のついては、すでに

$$\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}_{Ni(fcc)}(\infty) = 0.476R\ln(0.606+1)$$

$$\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}_{Co(fcc)}(\infty) = 0.634R\ln(1.75+1)$$

$$\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}_{Fe(bcc)}(\infty) = 0.960R\ln(2.216+1)$$

と導出されている。したがって、これらの値を用いることによって、k_f, k_p を求めることができる。

さて、次に完全常磁性状態から磁気的平衡状態への自由エネルギー変化量 $\Delta^\circ G^{cpm\to eqm}(T)$ を求めよう。磁気的平衡状態の自由エネルギーについて、

$$\begin{aligned} {}^\circ G^{eqm}(T) &= {}^\circ G^{cfm}(T) + \Delta^\circ G^{cfm\to eqm}(T) \\ {}^\circ G^{eqm}(T) &= {}^\circ G^{cpm}(T) + \Delta^\circ G^{cpm\to eqm}(T) \end{aligned} \qquad (12)$$

が成立するので、

$$\begin{aligned}
&{}^\circ G^{cpm}(T) - {}^\circ G^{cfm}(T) \\
&= \Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(\infty) - T\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(\infty) \\
&= \Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(T_c) + \frac{k_p T_c}{8p}\left(1+\frac{1}{8p}\right) - T\left[\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T_c) + \frac{k_p}{8p}\right] \\
&= \Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(T_c) - T\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T_c) + \frac{k_p}{8p}\left(T_c + \frac{T_c}{8p} - T\right) \\
&= \frac{k_f}{4}\left(T_c - \frac{T_c}{4}\right)\exp\left\{-4\left(1-\frac{T_c}{T_c}\right)\right\} + \frac{k_f T_c}{16}\exp\{-4\} - T\left\{\frac{k_f}{4}\left[\exp\left\{-4\left(1-\frac{T_c}{T_c}\right)\right\} - \exp\{-4\}\right]\right\} \\
&\quad + \frac{k_p}{8p}\left(T_c + \frac{T_c}{8p} - T\right) \\
&= \frac{3k_f T_c}{16} + \frac{k_f T_c}{16}\exp\{-4\} - \frac{k_f T}{4} + \frac{k_f T}{4}\exp\{-4\} + \frac{k_p}{8p}\left(T_c + \frac{T_c}{8p} - T\right) \\
&= \frac{3k_f T_c}{16} + \frac{k_f}{4}\left(T + \frac{T_c}{4}\right)\exp\{-4\} - \left(\frac{k_f}{4} + \frac{k_p}{8p}\right)T + \frac{k_p T_c}{(8p)^2}(8p+1)
\end{aligned} \qquad (13)$$

となることを考慮すると、$\Delta^{\circ}G^{cpm\to eqm}(T)$ は、

$$\therefore\ {}^{\circ}G^{cfm}(T)+\Delta^{\circ}G^{cfm\to eqm}(T)={}^{\circ}G^{cpm}(T)+\Delta^{\circ}G^{cpm\to eqm}(T)$$

$$\begin{aligned}\Delta^{\circ}G^{cpm\to eqm}(T)&=\Delta^{\circ}G^{cfm\to eqm}(T)-\{{}^{\circ}G^{cpm}(T)-{}^{\circ}G^{cfm}(T)\}\\&=\Delta^{\circ}G^{cfm\to eqm}(T)-\left\{\begin{array}{l}\dfrac{3k_fT_c}{16}+\dfrac{k_f}{4}\left(T+\dfrac{T_c}{4}\right)\exp\{-4\}\\-\left(\dfrac{k_f}{4}+\dfrac{k_p}{8p}\right)T+\dfrac{k_pT_c}{(8p)^2}(8p+1)\end{array}\right\}\\&=\Delta^{\circ}G^{cfm\to eqm}(T)+\left\{\begin{array}{l}-\dfrac{3k_fT_c}{16}-\dfrac{k_f}{4}\left(T+\dfrac{T_c}{4}\right)\exp\{-4\}\\+\left(\dfrac{k_f}{4}+\dfrac{k_p}{8p}\right)T-\dfrac{k_pT_c}{(8p)^2}(8p+1)\end{array}\right\}\end{aligned}\tag{14}$$

と表されることがわかる。式(14)に式(7a,b)を代入することによって、

$$\begin{aligned}&\Delta^{\circ}G^{cpm\to eqm}(T)\\&=\Delta^{\circ}G^{cfm\to eqm}(T)+\left\{\begin{array}{l}-\dfrac{3k_fT_c}{16}-\dfrac{k_f}{4}\left(T+\dfrac{T_c}{4}\right)\exp\{-4\}\\+\left(\dfrac{k_f}{4}+\dfrac{k_p}{8p}\right)T-\dfrac{k_pT_c}{(8p)^2}(8p+1)\end{array}\right\}\\&=-\frac{k_fT_c}{16}\exp\left\{-4\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\}+\frac{k_f}{4}\left(T+\frac{T_c}{4}\right)\exp\{-4\}+\left\{\begin{array}{l}-\dfrac{3k_fT_c}{16}-\dfrac{k_f}{4}\left(T+\dfrac{T_c}{4}\right)\exp\{-4\}\\+\left(\dfrac{k_f}{4}+\dfrac{k_p}{8p}\right)T-\dfrac{k_pT_c}{(8p)^2}(8p+1)\end{array}\right\}\\&=-\frac{k_pT_c}{(8p)^2}(1+8p)+\left(\frac{k_f}{4}+\frac{k_p}{8p}\right)T-\frac{k_fT_c}{16}\left[3+\exp\left\{-4\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\}\right],\quad (T\le T_c)\end{aligned}\tag{15a}$$

$$\begin{aligned}&\Delta^{\circ}G^{cpm\to eqm}(T)\\&=\Delta^{\circ}G^{cfm\to eqm}(T)+\left\{-\frac{3k_fT_c}{16}-\frac{k_f}{4}\left(T+\frac{T_c}{4}\right)\exp\{-4\}+\left(\frac{k_f}{4}+\frac{k_p}{8p}\right)T-\frac{k_pT_c}{(8p)^2}(8p+1)\right\}\\&=\frac{3k_fT_c}{16}+\frac{k_f}{4}\left(T+\frac{T_c}{4}\right)\exp\{-4\}-\left(\frac{k_f}{4}+\frac{k_p}{8p}\right)T+\frac{k_pT_c}{(8p)^2}(8p+1)-\frac{k_pT_c}{(8p)^2}\exp\left\{8p\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\}\\&\quad+\left\{-\frac{3k_fT_c}{16}-\frac{k_f}{4}\left(T+\frac{T_c}{4}\right)\exp\{-4\}+\left(\frac{k_f}{4}+\frac{k_p}{8p}\right)T-\frac{k_pT_c}{(8p)^2}(8p+1)\right\}\\&=-\frac{k_pT_c}{(8p)^2}\exp\left\{8p\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right\},\qquad (T\ge T_c)\end{aligned}\tag{15b}$$

を得る。例えば、Fe-Cr 合金の磁性に起因する過剰エネルギーは、

$$\Delta G^{\alpha,cpm\to eqm} = -\frac{k_p^\alpha T_c^\alpha}{64}\exp\left[8\left(1-\frac{T}{T_c^\alpha}\right)\right], \quad (T \ge T_c^\alpha)$$

$$\Delta G^{\alpha,cpm\to eqm} = -\frac{9k_p^\alpha T_c^\alpha}{64} + \left(\frac{k_f^\alpha}{4}+\frac{k_p^\alpha}{8}\right)T - \frac{k_f^\alpha T_c^\alpha}{16}\left\{3+\exp\left[-4\left(1-\frac{T}{T_c^\alpha}\right)\right]\right\}, \quad (T \le T_c^\alpha)$$

にて与えられている[Y-Y.Chuang, J-C. Lin, and A. Chang : CALPHAD, Vol.11(1987), 57.]。

ここで、

$$k_f^\alpha = \frac{4(1-f_s^\alpha)}{1-e^{-4}}C^\alpha R\log(\beta^\alpha+1), \qquad k_p^\alpha = 8f_s^\alpha C^\alpha R\log(\beta^\alpha+1)$$

であり、

$$T_c^\alpha = 1043c_1 - 310c_2 + [1207.3 - 321.2(c_2-c_1)]c_1c_2, \quad (0.0 \le c_2 \le 0.858)$$

$$\beta^\alpha = 2.216c_1 - 0.4c_2 + 0.2525c_1c_2, \quad (0.0 \le c_2 \le 0.858)$$

$$T_c^\alpha = -1873.1c_1 + 310c_2, \quad (0.858 \le c_2 \le 1.0)$$

$$\beta^\alpha = -2.417c_1 + 0.4c_2, \quad (0.858 \le c_2 \le 1.0)$$

$$C^\alpha = 0.96c_1 + 1.0c_2, \quad (0.0 \le c_2 \le 1.0), \qquad f_s^\alpha = 0.285$$

である。

３．各種変数の値

Fe,Ni,および Co における各種変数の値は、以下のようになる。

	Ni(fcc)	Co(fcc)	Fe(fcc)	Fe(bcc)
$T_c(K)$	631	1396	80	1043
k_f	6.84	19.46	13.9	27.17
k_p	3.15	8.96	6.4	21.27
p	2	2	2	1
$\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(T_c)$ (J/mol・K)	1.678	4.775	3.41	6.669
$\Delta^\circ S^{cfm\to eqm}(\infty)$ (J/mol・K)	1.875	5.336	3.81	9.328
$\Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(T_c)$ (J/mol)	814.0	5122	210	5344
$\Delta^\circ H^{cfm\to eqm}(\infty)$ (J/mol)	946.1	5953	244	8463
$\Delta^\circ G^{cfm\to eqm}(T_c)$ (J/mol)	-245	-1544	-63	-1612
f_H	0.1395	0.1395	0.1395	0.3685
f_S	0.105	0.105	0.105	0.285
β	0.606	1.75	0.57	2.216

また、cpm 状態における純 Fe(bcc)の結晶安定性について、

$$^\circ G_{Fe}^{\alpha,cpm} - {}^\circ G_{Fe}^{\gamma,cpm} = 4690.7 - 52.2743T + 7.3476T\ln T - 0.0030282T^2 \quad ,(500K < T < 1810K) \qquad (16)$$

が成立する。