

電腦數值

模擬導論

實習一(b)運用 excel 計算 P-B ratio

B03702030

吳懿峰

2017.03.04

問題一、列出 5 種金屬的 P-B ratio

物質	density	mass	V	P-B ratio
Mg	1.74	24.31	13.97	0.805924
MgO	3.58	40.31	11.26	
Fe	7.87	55.85	7.10	4.525894
Fe ₂ O ₃	5.24	168.30	32.12	
Al	2.70	26.98	9.99	2.574059
Al ₂ O ₃	3.95	101.60	25.72	
Cr	7.15	52.00	7.27	4.003831
Cr ₂ O ₃	5.22	152.00	29.12	
Ti	4.51	47.87	10.61	1.77892
TiO ₂	4.23	79.87	18.88	

操作步驟

1. 輸入個別物質資料
2. 利用公式 $V = \text{mass} / \text{density}$ 算出金屬及其氧化物的體積
3. 再利用 $\text{P-B ratio} = \frac{\text{氧化物 } V}{\text{金屬 } V}$
4. 得結果如左表所示

問題二、哪幾種金屬較易生鏽？
各是什麼成因？

根據上述表格可知，P-B ratio 不在 1 與 2 之間的 Mg、Fe、Al、Cr 理論上是較易生鏽的金屬，然實際上 Mg 與 Al 在生鏽時會生成一緻密氧化物以保護金屬減緩繼續氧化，Cr 也是如此，如我們市面上看到的不鏽鋼基本上都含有鉻，原因是因為鉻在氧化也會生成「鉻氧化膜」以防止繼續生鏽，因此總觀來看，上述金屬中最容易生鏽的金屬應是鐵。

問題三、上述判斷標準有沒有例外，若有，請猜測原因。

首先根據課本與網路上的資料，我得出來的結論是實習講義的公式並不完整。P-B ratio 除了氧化物體積要除以金屬體積以外，還需要除掉每個氧化物分子中所含的金屬離子個數，舉例來說，雖然上術表格 Al 的 P-B ratio 是 2.57，但因為要除以氧化物金屬離子個數 2，所以正確的 P-B ratio 應為 1.285 為一不易生鏽金屬(如同上個問題所說，會形成緻密保護膜)。然除此之外，當然還是有例外的。在 P-B ratio 這個公式中的基本假設是氧需要通過氧化物來擴散到金屬，但現實中通常是金屬離子擴散到空氣與氧化物的介面，也就造成這個公式是存在許多例外狀況。

問題四、請再查出另外五種金屬資料並計算其 P-B ratio

物質	density	mass	V	P-B ratio
Ca	1.55	40.08	25.86	0.647392
CaO	3.35	56.08	16.74	
Pb	11.34	207.20	18.27	1.281813
PbO	9.53	223.20	23.42	
Ni	8.91	58.69	6.59	1.700005
NiO	6.67	74.69	11.20	
Pt	21.45	195.08	9.09	2.447898
PtO ₂	10.20	227.08	22.26	
Cu	8.96	63.55	7.09	1.777474
CuO	6.31	79.55	12.61	

表格所計算之 P-B ratio 所使用的公式仍以講義上的為主

參考資料

1. 維基百科:

https://en.wikipedia.org/wiki/Pilling%E2%80%93Bedworth_ratio

2. Revolvy:

https://www.revolvy.com/main/index.php?s=Pilling%E2%80%93Bedworth%20ratio&item_type=topic