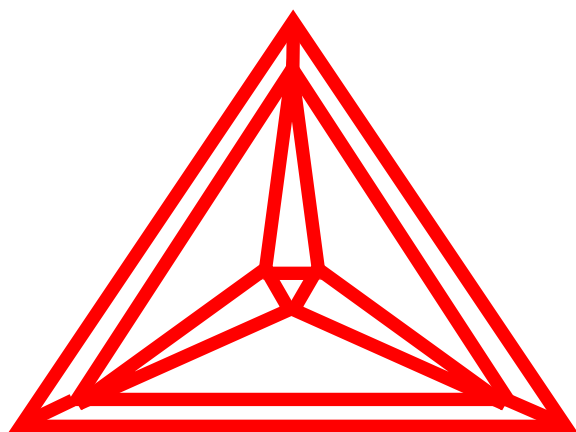


Thermo-Calc Software : 用户指导书

R 版



Translated by Yong Du, Jingrui Zhao, Weihua Sun, Dandan Liu, Weiwei Zhang, Lingling Li, Wei Xiong, Shuhong Liu, Dongdong Zhao, Lijun Zhang, Jiong Wang, Xiaoming Yuan, Cuiyun He, Tiying Chen, Hailin Chen, Chao Zhang, Zhijun Zhu, Zhu Pan, Xiaoyan Xu, Liangcai Zhou, Chengying Tang.

Innovative Materials Design Group, State Key Lab of Powder Metallurgy
Central South University, Changsha, Hunan, 410083, China

由中南大学粉末冶金国家重点实验室高性能材料设计研究室

杜勇、赵静蕊、孙伟华、刘丹丹、张炜炜、李玲玲、
熊伟、刘树红、赵东东、张利军、汪炯、袁小明、贺翠云、
陈提萦、陈海林、张超、朱志军、潘竹、徐小严、周良才、唐成颖 翻译

Copyright 1995-2007

Foundation of Computational Thermodynamics, Stockholm, Sweden

1 综述	1
1.1 计算热力学及动力学	1
1.2 Thermo-Calc 软件/数据库/接口	1
1.3 致谢	5
1.4 版本更新历史	6
1.5 Thermo-Calc 软件包的总体结构	18
1.6 Thermo-Calc 软件包在不同硬件设备上的适用性	20
1.7 使用 Thermo-Calc 软件的益处	22
2. 如何成为一位 Thermo-Calc 专家	23
2.1 怎样应用这本用户指南	23
2.2 怎样安装和维护 Thermo-Calc 包	27
2.2.1 许可证要求	27
2.2.2 安装步骤	28
2.2.2.1 安装整个的 TCC 软件包 / 数据包	28
2.2.2.2 在一个已经安装的 TCC 包中添加数据库	29
2.2.3 维护当前和以前的版本	30
2.2.4 使 TCC 运行更为便捷	30
2.3 怎样成为一位 Thermo-Calc 专家	33
2.3.1 从 Thermo-Calc 软件公司和他的全球代理处获得即时的技术支持	34
2.3.2 每日应用 Thermo-Calc 的各种功能	34
2.3.3 以一种专业和高质量标准的方式显示你的结果	35
2.3.4 通过其他的渠道同他人交流你的经验	35
5 Database Module(TDB)	36
5.1 介绍	36
5.2 TDB 模块的用户界面	37
5.3 Getting Started	37
5.3.1 SWITCH_DATABASE	37
5.3.2 LIST_DATABASE ELEMENT	37
5.3.3 DEFINE_ELEMENTS	37
5.3.4 LIST_SYSTEM CONSTITUENT	37
5.3.5 REJECT PHASE	38
5.3.6 RESTORE PHASE	38
5.3.7 GET_DATA	38
5.4 Description of All Available TDB Monitor Commands	38
5.4.1 AMEND_SELECTION	38
5.4.2 APPEND_DATABASE	39
5.4.3 BACK	40

5.4.4	DATABASE_INFORMATION.....	40
5.4.5	DEFINE_ELEMENTS.....	40
5.4.6	DEFINE_SPECIES.....	40
5.4.7	DEFINE_SYSTEM.....	40
5.4.8	EXCLUDE_UNUSED_SPECIES.....	41
5.4.9	EXIT.....	41
5.4.10	GET_DATA.....	41
5.4.11	GOTO_MODULE.....	42
5.4.12	HELP.....	42
5.4.13	INFORMATION.....	43
5.4.14	LIST_DATABASE.....	44
5.4.15	LIST_SYSTEM.....	45
5.4.16	MERGE_WITH_DATABASE.....	45
5.4.17	NEW_DIRECTORY_FILE.....	45
5.4.18	REJECT.....	46
5.4.19	RESTORE.....	47
5.4.20	SET_AUTO_APPEND_DATABASE.....	48
5.4.21	SWITCH_DATABASE.....	49
5.5	Extended Commands.....	51
7	列表模块 (TAB).....	51
7.1	简介.....	51
7.2	基本命令.....	52
7.2.1	HELP.....	52
7.2.2	GOTO_MODULE.....	52
7.2.3	BACK.....	53
7.2.4	EXIT.....	53
7.2.5	PATCH.....	54
7.3	重要命令.....	54
7.3.1	TABULATE_SUBSTANCE.....	54
7.3.2	TABULATE_REACTION.....	59
7.3.3	ENTER_REACTION.....	62
7.3.4	SWITCH_DATABASE.....	63
7.3.5	ENTER_FUNCTION.....	65
7.3.6	TABULATE_DERIVATIVES.....	67
7.3.7	LIST_SUBSTANCES.....	72
7.4	其他命令.....	73
7.4.1	SET_ENERGY_UNIT.....	73
7.4.2	SET_PLOT_FORMAT.....	74
7.4.3	MACRO_FILE_OPEN.....	74
7.4.4	SET_INTERACTIVE.....	77
7.5	列表绘制.....	77

8 平衡计算模块(POLY).....	79
8.1 引言.....	79
8.2 正文.....	80
8.3 基本热力学知识.....	81
8.3.1 体系和相.....	81
8.3.2 物种和成分.....	82
8.3.3 状态变量.....	82
8.3.3.1 体系, 组元, 物种的强度性质.....	84
8.3.3.2 容度变量的标准化.....	85
8.3.3.3 体系, 相的能量容度变量.....	87
8.3.3.4 体系的总大小.....	89
8.3.3.5 体系, 相的组元数量.....	89
8.3.3.6 体系中相的数量.....	90
8.3.3.7 相的特殊量.....	91
8.3.3.8 相的成分.....	92
8.3.3.9 偏导数(衍生变量).....	92
8.3.4 组元.....	95
8.3.5 状态.....	95
8.4 不同类型的计算.....	96
8.4.1 单点平衡计算.....	96
8.4.2 性质图的 STEPPING 计算.....	97
8.4.3 凝固过程模拟.....	98
8.4.4 伸平衡和 To 温度模拟.....	98
8.4.5 相图的 MAPPING 计算.....	101
8.4.6 Potential 图计算.....	101
8.4.7 Pourbaix 图计算.....	101
8.4.8 图的绘制.....	102
8.4.9 从吉布斯自由能最小化到全域最小化.....	102
8.5 图.....	104
8.5.1 二元相图.....	104
8.5.2 三元相图.....	105
8.5.3 准二元相图和准三元相图.....	108
8.5.4 高度有序相图.....	109
8.5.5 性质图.....	109
8.6 普通命令.....	110
8.6.1 HELP.....	110
8.6.2 INFORMATION.....	110
8.6.3 GOTO_MODULE.....	111
8.6.4 BACK.....	112
8.6.5 SET_INTERACTIVE.....	112
8.6.6 EXIT.....	112
8.7 基本命令.....	112

8.7.1	SET_CONDITION.....	113
8.7.2	RESET_CONDITION	115
8.7.3	LIST_CONDITIONS	115
8.7.4	COMPUTE_EQUILIBRIUM	115
8.7.5	LIST_EQUILIBRIUM.....	117
8.7.6	DEFINE_MATERIAL	117
8.7.7	DEFINE_DIAGRAM.....	120
8.8	Commands to SAVE and READ the POLY Data Structure.....	122
8.8.1	SAVE_WORKSPACES.....	122
8.8.2	READ_WORKSPACES	125
8.9	计算和绘制相图的命令	126
8.9.1	SET_AXIS_VARIABLE	126
8.9.2	LIST_AXIS_VARIABLE.....	127
8.9.3	MAP	127
8.9.4	STEP_WITH_OPTIONS	128
8.9.5	ADD_INITIAL_EQUILIBRIUM	134
8.9.6	POST	135
8.10	其它的有用和高级的命令.....	136
8.10.1	DEFINE_COMPONENTS.....	136
8.10.2	SET_REFERENCE_STATE.....	137
8.10.3	CHANGE_STATUS	138
8.10.4	LIST_STATUS	144
8.10.5	COMPUTE_TRANSITION.....	145
8.10.6	SET_INPUT_AMOUNTS	147
8.10.7	SET_NUMERICAL_LIMITS.....	147
8.10.8	SET_ALL_START_VALUES.....	148
8.10.9	SET_START_VALUE.....	149
8.10.10	SET_START_CONSTITUTION	150
8.10.11	RECOVER_START_VALUES	150
8.10.12	ENTER_SYMBOL.....	150
8.10.13	LIST_SYMBOLS.....	152
8.10.14	DELETE_SYMBOL	152
8.10.15	SHOW_VALUE.....	152
8.10.16	EVALUATE_FUNCTIONS	153
8.10.17	TABULATE.....	153
8.10.18	LIST_INITIAL_EQUILIBRIA	153
8.10.19	LOAD_INITIAL_EQUILIBRIUM.....	153
8.10.20	DELETE_INITIAL_EQUILIBRIUM.....	154
8.10.21	AMEND_STORED_EQUILIBRIA	154
8.10.22	SET_MINIMIZATION_OPTIONS	155
8.10.23	SPECIAL_OPTIONS	157
8.10.24	CREATE_NEW_EQUILIBRIUM	163
8.10.25	SELECT_EQUILIBRIUM.....	163

8.10.26	MACRO_FILE_OPEN.....	164
8.10.27	REINITIATE_MODULE.....	166
8.10.28	PATCH.....	166
8.11	水溶液.....	166
8.11.1	水溶液中相的定义和参考状态	167
8.11.2	与水溶液相相关的模型，数据库和模块	167
8.11.3	水溶液相中的辅助衍生变量	167
8.11.4	输出模式的改进	168
8.11.5	水溶液相的计算.....	172
8.12	计算困难的解决方案.....	173
8.12.1	第一步	173
8.12.1.1	检查状态	173
8.12.1.2	简化体系	174
8.12.1.3	相	174
8.12.1.4	零分数	174
8.12.2	第二步	174
8.12.3	第三步	174
8.13	常见问题.....	175
8.13.1	为什么只能画出半个图?	175
8.13.2	为什么保存后不能画图?	176
8.13.3	为什么 G.T 不完全等同于-S?.....	176
8.13.4	如何得到组元的偏焓?	176
8.13.5	为什么当 H(LIQUID)为 0 时，而 HM(LIQUID)不为 0?	177
8.13.6	为什么石墨稳定时，计算出的碳的活度小于 1?	177
8.13.7	如何得到过剩吉布斯自由能的值?	177
8.13.8	What is wrong when I get crossing tie-lines but no miscibility gap?.....	178
8.13.9	如何直接计算溶解度间隙的最大值?	178
9	后续处理器模块 (POST).....	178
9.1	简介	178
9.2	基本命令	180
9.2.1	HELP (帮助)	180
9.2.2	BACK (返回)	180
9.2.3	EXIT (退出)	180
9.3	重要命令	181
9.3.1	SET_DIAGRAM_AXIS (设置_图形_坐标轴)	181
9.3.2	SET_DIAGRAM_TYPE (设置_图形_类型)	183
9.3.3	SET_LABEL_CURVE_OPTION (设置_曲线_标签_选项)	183
9.3.4	ADD_LABEL_TEXT (添加_标签_文本)	184
9.3.5	MODIFY_LABEL_TEXT (修改_标签_文本)	185
9.3.6	SET_PLOT_FORMAT (设置_绘图_格式)	186
9.3.7	PLOT_DIAGRAM (绘图)	190

9.3.8	Thermo-Calc 图形窗口.....	191
9.3.9	PRINT_DIAGRAM.....	201
9.3.10	DUMP_DIAGRAM.....	203
9.3.11	SET_SCALING_STATUS.....	204
9.3.12	SET_TITLE.....	205
9.3.13	LIST_PLOT_SETTINGS.....	205
9.4	Experimental Data File Plot Commands.....	205
9.4.1	APPEND_EXPERIMENTAL_DATA.....	205
9.4.2	MAKE_EXPERIMENTAL_DATAFILE.....	207
9.4.3	QUICK_EXPERIMENTAL_PLOT.....	207
9.5	其他命令.....	208
9.5.1	ENTER_SYMBOL.....	208
9.5.2	LIST_SYMBOLS.....	210
9.5.3	SET_AXIS_LENGTH.....	210
9.5.4	SET_AXIS_TEXT_STATUS.....	211
9.5.5	SET_AXIS_TYPE.....	211
9.5.6	SET_COLOR.....	212
9.5.7	SET_CORNER_TEXT.....	213
9.5.8	SET_FONT.....	214
9.5.9	SET_INTERACTIVE_MODE.....	215
9.5.10	SET_PLOT_OPTIONS.....	216
9.5.11	SET_PREFIX_SCALING.....	216
9.5.12	SET_REFERENCE_STATE.....	217
9.5.13	SET_TIELINE_STATUS.....	217
9.5.14	SET_TRUE_MANUAL_SCALING.....	218
9.5.15	FIND_LINE.....	218
9.5.16	TABULATE.....	218
9.5.17	LIST_DATA_TABLE.....	219
9.6	Odd Commands.....	220
9.6.1	PATCH_WORKSPACE.....	220
9.6.2	RESTORE_PHASE_IN_PLOT.....	221
9.6.3	REINITIATE_PLOT_SETTINGS.....	221
9.6.4	SET_AXIS_PLOT_STATUS.....	221
9.6.5	SET_PLOT_SIZE.....	222
9.6.6	SET_RASTER_STATUS.....	222
9.6.7	SET_TIC_TYPE.....	222
9.6.8	SUSPEND_PHASE_IN_PLOT.....	223
9.7	3D-Graphical Presentations: Command and Demonstration.....	223
9.7.1	CREATE_3D_PLOTFILE.....	226
9.7.2	在 Cortona VRML Client Viewer 中浏览 3D 图形.....	228
10	一些专用模块.....	231
10.1	介绍.....	231

10.2 专用模块产生或使用的文件	232
10.2.1 POLY3 文件	232
10.2.2 RCT 文件	233
10.2.3 GES5 文件	233
10.2.4 MACRO 文件	234
10.3 与专用模型的相互作用	234
10.4 BIN 模块	235
10.4.1 BIN 模块介绍	235
10.4.2 专用 BIN-模块数据库的结构	240
10.4.3 BIN-模型计算的演示举例	242
10.5 TERN 模块	243
10.5.1 TERN 模块介绍	243
10.5.2 专用 TERN 模块数据库的结构	249
10.5.3 TERN -模块计算的演示举例	252
10.6 POTENTIAL 模块	252
10.6.1 POTENTIAL 模块介绍	252
10.6.2 POTENTIAL-模块所使用的数据库结构	256
10.6.3 POTENTIAL-模块计算的演示举例	257
10.7 布拜 (POURBAIX) 模块	257
10.7.1 布拜 (Pourbaix) 图	257
10.7.2 POURBAIX 模块的描述	261
10.7.2.1 POURBAIX 模型的发展	261
10.7.2.2 计算 Pourbaix 图表的基本需求	263
10.7.2.3 POURBAIX 模块的主要特征	264
10.7.2.4 对水溶液相不同性质的描述	280
10.7.2.5 应用于 Pourbaix 模块计算的热力学模型和数据库	282
10.7.3 POURBAIX 模块的应用	284
10.7.4 POURBAIX 模块计算示例	287
10.7.5 POURBAIX 模块计算参考文献:	288
10.8 SCHEIL 模块	288
10.8.1 凝固过程	288
10.8.2 Scheil-Gulliver 凝固模型 (在热力学近似的条件下)	289
10.8.3 移动边界模型 (在动力学近似的条件下)	290
10.8.4 SCHEIL 模块的介绍	290
10.8.5 SCHEIL 模块模拟的演示实例	308
10.8.6 Scheil-Gulliver 模拟的参考文献	308
10.9 REACTOR 模型	309
10.9.1 REACTOR 模型介绍	309
10.9.2 多级稳态反应堆模拟的一些概念	310
10.9.3 REACTOR 模块的命令	311
10.9.3.1 AMEND_RECORD	311
10.9.3.2 BACK	311

10.9.3.3	CREATE_DIVIDERS	311
10.9.3.4	CREATE_PIPE	312
10.9.3.5	CREATE_PROBE	312
10.9.3.6	CREATE_STAGE_BOXES	312
10.9.3.7	EXECUTE_POLY3_COMMAND	314
10.9.3.8	EXIT	314
10.9.3.9	GOTO_MODULE	314
10.9.3.10	HELP	314
10.9.3.11	INFORMATION	315
10.9.3.13	LIST_RECORDS	315
10.9.3.14	PATCH_WORKSPACE	315
10.9.3.15	READ_WORKSPACE	315
10.9.3.16	SAVE_WORKSPACE	316
10.9.3.17	SHOW_PROBE	318
10.9.3.18	START_SIMULATION	318
10.9.4	REACTOR 模块模拟的实例演示	320
10.9.5	REACTOR 模块模拟参考文献	320
11	吉布斯自由能系统模块 (GES)	321
11.1	引言	321
11.2	热化学	322
11.2.1	术语定义	322
11.2.2	Elements (元素) 和 species (物质种类)	322
11.2.3	大写和小写形式	323
11.2.4	Phases (相)	323
11.2.5	温度和压力的函数	324
11.2.6	标志符	325
11.2.7	可混合性间隙 (Miscibility gaps)	326
11.3	热力学模型	326
11.3.1	标准吉布斯自由能	327
11.3.2	理想替代模型	328
11.3.3	规则溶液模型	328
11.3.4	使用组元而不是元素	329
11.3.5	亚点阵模型-化合物能量公式	329
11.3.6	离子液相模型, 用于具有有序趋势的液相	330
11.3.7	团聚模型	330
11.3.8	准化学模型	330
11.3.9	吉布斯自由能中的非化学贡献 (例如: 铁磁性)	331
11.3.10	具有有序无序转变的相	331
11.3.11	CVM 方法: 用于化学有序/无序现象	332
11.3.12	Birch-Murnaghan 模型: 用于 高-PT 贡献	332
11.3.13	广义 PVT 模型: 用于高-PT 贡献	332
11.3.14	理想气态模型 vs. 非理想 气态/气态混合物模型	334

11.3.15	DHLL 和 SIT 模型: 用于稀释水溶液	334
11.3.16	HKF 和 PITZ 模型: 适用于浓缩水溶液.....	335
11.3.17	通用的两态模型	335
11.3.18	Flory-Huggins 模型: 适用于聚合物.....	336
11.4	热力学参数.....	337
11.5	数据结构.....	340
11.5.1	相的组元.....	340
11.5.2	吉布斯自由能参考面	340
11.5.3	过剩吉布斯能.....	341
11.5.4	个人文件存储.....	341
11.5.5	加密和不加密数据库.....	341
11.6	GES 系统的应用程序.....	342
11.7	用户界面.....	343
11.7.1	模块性和交互性.....	343
11.7.2	控制符的使用.....	344
11.8	帮助(Help)和信息(Information)命令.....	344
11.8.1	HELP.....	344
11.8.2	INFORMATION.....	345
11.9	转换模块和结束程序命令.....	345
11.9.1	GOTO_MODULE.....	346
11.9.2	BACK.....	346
11.9.3	EXIT.....	346
11.10	输入数据命令.....	347
11.10.1	ENTER_ELEMENT.....	347
11.10.2	ENTER_SPECIES.....	347
11.10.3	ENTER_PHASE.....	348
11.10.4	ENTER_SYMBOL.....	350
11.10.5	ENTER_PARAMETER.....	353
11.11	列出数据命令.....	356
11.11.1	LIST_DATA	357
11.11.2	LIST_PHASE_DATA.....	357
11.11.3	LIST_PARAMETER	358
11.11.4	LIST_SYMBOL.....	360
11.11.5	LIST_CONSTITUENT	360
11.11.6	LIST_STATUS	360
11.12	修改数据命令.....	362
11.12.1	AMEND_ELEMENT_DATA.....	362
11.12.2	AMEND_PHASE_DESCRIPTION.....	363
11.12.3	AMEND_SYMBOL.....	373
11.12.4	AMEND_PARAMETER	375
11.12.5	CHANGE_STATUS	377

11.12.6	PATCH_WORKSPACES	378
11.12.7	SET_R_AND_P_NORM	378
11.13	删除数据命令	379
11.13.1	REINITIATE	379
11.13.2	DELETE	380
11.14	存储或读取数据命令	380
11.14.1	SAVE_GES_WORKSPACE	380
11.14.2	READ_GES_WORKSPACE	381
11.15	其它命令	382
11.15.1	ADD_COMMENT	382
11.15.2	SET_INTERACTIVE	382
12	最优化模块(PARROT)	383
12.1	概述	383
12.1.1	热力学数据库	384
12.1.2	最优化方法	384
12.1.3	最小平方方法使用要求	385
12.1.4	其他优化软件	385
12.2	准备工作	386
12.2.1	实验数据文件: POP 文件	386
12.2.1.1	单相平衡	386
12.2.1.2	两相平衡	387
12.2.1.3	零变量平衡实验	387
12.2.1.4	三元及更高级实验	388
12.2.1.5	二元系和三元系实验同步使用	389
12.2.2	绘图实验文件: EXP 文件	389
12.2.3	系统定义文件: SETUP 文件	389
12.2.3.1	相模型	390
12.2.3.2	模型参数	390
12.2.4	工作文件或存储文件: PAR 文件	391
12.2.5	各种文件名及它们的关系	391
12.2.6	PARROT 模块的交互式运行	391
12.2.6.1	实验编辑	392
12.2.6.2	设置交互模式	392
12.2.6.3	绘制中间结果	392
12.2.6.4	实验数据的选择	392
12.2.6.5	实验数据和参数的临界集	393
12.2.6.6	优化和深度优化	393
12.2.6.7	几点线索	394
12.2.6.8	结果分析	394
12.2.7	参数的完善	394
12.2.8	交互式的改变需要重编译	395

12.3	交替模式.....	395
12.3.1	公切线构造.....	395
12.3.2	交替模式下 POP 文件的准备.....	395
12.3.3	SET_ALTERNATE_CONDITION 命令的更多例子.....	396
12.4	技巧和处理.....	397
12.4.1	矛盾数据.....	397
12.4.2	缺少数据或者不合适的数据.....	398
12.4.3	估计时间.....	398
12.4.4	参数的数目.....	398
12.5	命令结构.....	399
12.5.1	一些术语的定义.....	399
12.5.2	联系其他模块的命令.....	399
12.5.3	用户界面.....	399
12.6	常规命令.....	399
12.6.1	GOTO_MODULE.....	400
12.6.2	HELP.....	400
12.6.3	INFORMATION.....	401
12.6.4	BACK.....	401
12.6.5	SET_INTERACTIVE.....	401
12.6.6	EXIT.....	401
12.7	最常用的命令.....	402
12.7.1	CREATE_NEW_STORE_FILE.....	402
12.7.2	SET_STORE_FILE.....	403
12.7.3	COMPILE_EXPERIMENT.....	404
12.7.4	SET_ALTERNATE_MODE.....	405
12.7.5	SET_OPTIMIZING_VARIABLE.....	405
12.7.6	SET_FIX_VARIABLE.....	406
12.7.7	EDIT_EXPERIMENTS.....	406
12.7.8	OPTIMIZE_VARIABLES.....	406
12.7.9	LIST_RESULT.....	407
12.7.10	CONTINUE_OPTIMIZATION.....	411
12.7.11	LIST_ALL_VARIABLES.....	411
12.7.12	RESCALE_VARIABLES.....	412
12.8	其他命令.....	412
12.8.1	SET_OUTPUT_LEVELS.....	412
12.8.2	SAVE_PARROT_WORKSPACES.....	413
12.8.3	READ_PARROT_WORKSPACES.....	413
12.8.4	MACRO_FILE_OPEN.....	414
12.8.5	RECOVER_VARIABLES.....	416
12.8.6	REINITIATE.....	416
12.8.7	LIST_CONDITIONS.....	417
12.8.8	LIST_STORE_FILE.....	417

12.8.9	SET_SCALED_VARIABLE.....	418
12.8.10	SET_OPTIMIZING_CONDITION.....	418
12.9	来自吉布斯自由能系统(GES)的命令.....	419
12.9.1	LIST_PHASE_DATA.....	419
12.9.2	ENTER_PARAMETER.....	419
12.9.3	AMEND_PARAMETER.....	422
12.9.4	LIST_PARAMETER.....	424
12.9.5	LIST_SYMBOL_IN_GES.....	425
12.10	与其他模块和接口的联系.....	425
12.10.1	与 ED_EXP 模块的联系.....	425
12.10.2	与 GES 和 POLY 模块的联系.....	426
12.10.3	与 DICTRA 软件的联系.....	426
12.10.4	TCW 软件的实用性.....	426
13	Edit-Experiment 模块 (ED-EXP).....	426
13.1	简介.....	426
13.2	POLY 命令在 ED_EXP 模块中.....	428
13.3	仅在 ED_EXP 模块中可行的特殊命令.....	430
13.3.1	COMPUTE_ALL_EQUILIBRIA (计算所有平衡).....	431
13.3.2	EXPERIMENT (实验值).....	433
13.3.3	EXPORT (导出).....	434
13.3.4	IMPORT (导入).....	435
13.3.5	LABEL_DATA.....	435
13.3.6	MAKE_POP_FILE.....	436
13.3.7	READ (READ_WORKSPACE = READ_BLOCK).....	436
13.3.8	SET_ALTERNATE_CONDITION.....	437
13.3.9	SET_WEIGHT.....	439
13.3.10	TRANSFER_START_VALUE.....	440
13.3.11	STORE_ALL_WEIGHTS.....	440
13.3.12	RESTORE_ALL_WEIGHTS.....	441
13.3.13	LIST_ALL_EQUILIBRIA.....	441
13.4	实验数据文件的其他命令 (POP 或 DOP).....	442
13.4.1	TABLE_HEAD, TABLE_VALUES and TABLE_END.....	443
13.4.2	COMMENT.....	445
13.4.3	FLUSH_BUFFER.....	445
13.4.4	GRAPHICS_PLOT.....	445
14	System Utility Module (SYS).....	447
14.1	简介.....	447
14.2	一般命令.....	448
14.2.1	HELP.....	448
14.2.2	INFORMATION.....	448

14.2.3	GOTO_MODULE.....	450
14.2.4	BACK.....	450
14.2.5	EXIT.....	450
14.2.6	SET_ECHO.....	451
14.2.7	SET_LOG_FILE.....	451
14.2.8	MACRO_FILE_OPEN.....	452
14.2.9	SET_PLOT_ENVIRONMENT.....	455
14.3	Odd Commands.....	456
14.3.1	SET_INTERACTIVE_MODE.....	456
14.3.2	SET_COMMAND_UNITS.....	456
14.3.3	STOP_ON_ERROR.....	457
14.3.4	OPEN_FILE.....	457
14.3.5	CLOSE_FILE.....	457
14.3.6	SET_TERMINAL.....	457
14.3.7	HP_CALCULATOR.....	458
17	附录和索引.....	459
	附录 A. 热力学计算软件代表文件类型和联系.....	460
	附录 B. 热力学计算代表快速参考卡片.....	460
	附录 C 状态变量和派生变量的单位.....	467
	附录 D 参考状态和标准状态.....	486
	各模块中 Thermo-Calc 命令的索引.....	506
	关于各种类型文件中的 Thermo-Calc 命令的索引.....	523
	图形列表.....	528
	表格的列表.....	533

1 综述

1.1 计算热力学及动力学

过去的几十年里，计算机模拟在材料科学与技术中的应用对于材料设计的定量化产生了革命性的影响。各种热力学和动力学模型的组合使得预测材料加工过程中材料的成份、结构及性质成为了可能。

数学模型在产品研发和过程控制中日益显著的重要性佐证了对于热力学计算和动力学模拟的迫切需求。并且现代定量化的材料设计已经从计算热力学及动力学中获得了巨大的收益。

将多元多相体系中各元素/组元/相的热力学平衡和局部平衡信息以及材料加工过程中的相变动力学（以及化学反应、表面反应、形核、熟化、流体流动性等）信息整合在一个软件系统中对于解决化工、冶金、汽车、航天及电子工业中材料设计和过程控制中的实际问题是至关重要的，并将同时满足自然和环境工程中资源勘探、能源循环和废弃物处理的需要。热力学/动力学数据库最重要的特性之一就是提供了在不同外部和内部因素影响下研究热力学平衡以及动力学过程一种较之实验方法更为快捷的手段。此外，热力学及动力学数据库与工具手册相比可以为用户提供自相一致、可行的以及最新的数据。

一个通用的热力学/动力学数据库必将为多个传统上认为是不同的领域提供高品质的内部一致的数据，如冶金、钢铁/合金、陶瓷、高温气相平衡、溶液化学以及地球化学。在绝大多数的应用中，多元多相体系/过程中由于组分数量众多以至于必须采用计算机软件才可以快速并准确地计算各种热力学平衡及动力学过程。现有的 Thermo-Calc 和 DICTRA 数据库系统即是这样的成功的尝试，它是一套强大且精细的软件系统，简单易学同时可以用于计算各种热化学计算以及一些类型的动力学模拟。

通过 Thermo-Calc 进行热力学计算以及 DICTRA 进行动力学模拟可以显著地提高用户在研发设计新材料、选取热处理温度、优化制造过程、指导材料应用以及保护环境等方面的能力。这样一套功能全面的软件/数据库/接口程序在世界范围能被证明是最强大而灵活的工程软件，它可以大大减少耗时费力的实验，提高产品品质和控制环境影响。

1.2 Thermo-Calc 软件/数据库/接口

Thermo-Calc 是一个通用灵活的软件系统（Sundman *et al.*, 1985; 1993; Jansson *et al.*, 1993; Sundman and Shi, 1997, Shi *et al.*, 2004），可用于计算不同材料中各种热力学性质（不仅仅包括温度、压力和成份的影响，而且涵盖磁性贡献、化学/磁性有序、晶体结构/缺陷、表面张力、非晶形成、弹性变形、塑性变形、静电态、电势等信息）、热力学平衡、局部平衡、化学驱动力（热力学因子）和各类稳定/亚稳相图和多类型材料多组元体系的性质图。它可以有效的处理非常复杂的多组元多相体系，这一体系最多可含 40 种元素、1000 种组元和许多不同的固溶体以及化学计量相。其中还包含了强大的工具可以计算其他各种不同类型的图表，例如 CVD/PVD 沉积、有序-无序现象的 CVM 计算、Scheil-Gulliver 凝固模拟（可以处理间隙元素的背扩散）、液相面投影图、优势区域图、Ellingham 图、配分系数、气体中的分压等。Thermo-Calc 是仅有的可以计算一体系中最多含有 5 个独立变量的任意截面的相图的软件（这将非常有用，例如，计算 5 元系合金的最低溶化温度），也是唯一可以计算化学驱动力（热力学因子，即 Gibbs 自由能对成份的二

阶导数)的软件。化学驱动力为动力学模拟(如扩散控制相变、形核、熟化等)提供了重要信息。

与不同的数据库及接口连接的指代的是 **Thermo-Calc 软件/数据库/接口程序** 或 **Thermo-Calc 数据银行**。Thermo-Calc 软件最重要的目的是为科学和工业界提供最便捷和快速的热力学计算工具。Thermo-Calc 软件系统是基于吉布斯自由能最小化 Gibbs energy Minimizer, 其性能被后续所谓的全局最小化技术所改进(已纳入本发行版本)。Thermo-Calc 专为具有非理想相(通过使用精细的热力学模型处理)的复杂多元多相交互体系设计, 可以使用许多不同的热力学数据库, 特别是由 SGTE 组织(Scientific Group Thermodata Europe, 一个致力于热力学数据库发展的国际组织)和 CALPHAD (CALculation of PHase Diagrams, 相图计算)群体开发的。并且, 现在还有与 Thermo-Calc 计算引擎相连接的接口程序, 它们可以用来开发客户自己的程序或者使用第三方软件以进行材料性能计算和材料加工过程模拟。

Thermo-Calc 和其姊妹软件 **DICTRA** (Diffusion-Controlled phase TRAnsformation) 最初是由 KTH(瑞典皇家工学院)材料科学与工程系开发, 并被 **Thermo-Calc Software (TCS)** 公司从 1997 年开始后续开发。它们是 35 年, 3 万小时研发以及国际间广泛合作研究的产物。

Thermo-Calc 和 DICTRA 软件及其相关的一些数据库的版权归非盈利性机构(斯德哥尔摩计算热力学基金) Foundation of Computational Thermodynamics (STT) 所有。从 1997 年开始, 后续开发、经营/销售、技术支持以及其他一些与 Thermo-Calc 和 DICTRA 相关的活动均由 STT 下属的 TCS 公司管理。

现行的 Thermo-Calc 有两种不同的用户界面, 即 **TCC** (Thermo-Calc Classic) 和 **TCW** (Thermo-Calc Windows)。第一个 TCC 的版本是 1981 年发行的。从 1999 年开始, TCW (作为 Thermo-Calc 软件的第二代产品), 其包含全面的 GUI (Graphic User Interface) 驱动, 并向用户正式发行。Thermo-Calc 几乎每年更新现最新的版本为 2006 年 5 月发行的 TCCR 和 TCW4。

任何 PC 电脑 (Microsoft Windows NT/2000/XP, Windows 95/95/ME, Linux) 以及 UNIX 工作站 (SUN Sparc, Solaris, HP, IBM AIX, DEC Alpha OSF1, SGI) 均可使用 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件/数据库/接口程序。但是, 从 TCCP (Thermo-Calc Classic version P) 和 DICTRA22 (DICTRA version 22) 开始, 一些 UNIX 平台 (SUN Sparc, HP, IBM AIX and DEC Alpha OSF1) 不再被继续支持。

TCC (以及 DICTRA) 具有交互式的界面, 详细的文档和在线帮助工具。通用 GUI (Graphic User Interface) 驱动版本 TCW 适用于 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境。针对 UNIX 和 Linux 的 GUI 版本仍在开发中。

Thermo-Calc 已在世界范围内赢得声誉, 并被视为计算多组元相图最好的软件。现在 Thermo-Calc 已在世界范围内拥有超过 1000 个用户, 包括学术机构(大学和政府实验室)以及非学术机构(工业界和企业研发中心), 并被引用于科技文献中。许多应用实例可以在 **TCC 范例手册** 以及 **TCW 范例手册** 中获得, 或者通过访问我们的网站 (www.thermocalc.com) 进行查询。

一个热力学软件只有得到精确而有效的数据库支持才能发挥作用。而 Thermo-Calc 可以为您提供来自不同渠道(如 SGTE, CAMPADA, CCT, ThermoTech, NPL, NIST, MIT, Theoretical Geochemistry Group 等)经过严格评估的高品质数据库。这些数据库使用不同的热力学模型来处理一个指定的多组元多相交互体系中的每个相。现有的 Thermo-Calc 数据库涵盖广泛的材料类型, 包括钢铁、合金、陶瓷、熔体、炉渣、盐、玻璃、硬质材料、半导体/超导体、焊料、气/液、水溶液、有机物质、高分子、核材料、地球材料, 以及地球化学及环境系统。这些数据库可应用于企业研发和科学研究之中, 如 SSUB/SSOL 数据库用于无机和冶金体系中的物质和溶液, TCEF 适用于钢铁和铁合金, TCNI/TTNi 适用于 Ni 基高温合金, TTAI/TTMg/TTTi 适用于 Al/Mg/Ti 基合金, SLAG 对应于炉渣体系, ION 适用于碳化物/氮化物/氧化物/硅化物/硫化物(固/液/气), TCMP 适用于材料加工过程以及冶金、化工、废弃物处理中有关循环、重熔、烧结、焚烧和爆炸

方面环境问题的应用, SMEC 专为半导体设计, NSLD/USLD 适用于无铅焊料, SNOB 用于贵金属, NUMT/NUOX 适用于核物质及其氧化物, GCE 适用于矿物, TCAQ/AQS 用于水合溶液体系等。如需了解更多不同数据库的信息, 请参看 [Thermo-Calc 数据库指南](#)。

在 KTH-MSE 的 Thermo-Calc 和 DICTRA 研发小组已经举办和参与了许多国际合作项目以致力于开发通用而有效的数据库。Thermo-Calc Software AB 现正致力于开发更多侧重于应用的数据库以满足不同的工业需求。同时, 遍布世界各地的学术界和企业界的用户也在 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件的协助下建立起自己的数据库。

TCC 和 DICTRA 软件同时为用户提供了一个特别的工具 (即 **PARROT** 模块) 用于严格评估各类实验数据如 PVT-EOS、热化学性质、相平衡、相图、扩散系数等。通过使用该模块, 用户可以快捷而可靠的扩展已有的数据库或开发应用于特殊材料及用途的新数据库。事实上, 许多已有的应用于各种材料的数据库正是使用该模块进行研发的产物。

Thermo-Calc 软件系统拥有 3 个面向应用的编程接口, 名为 **TQ**, **TCAPI** 和 **TC MATLAB® Toolbox**。它们用于进行各类材料性能的建模和复杂材料加工过程的模拟。通过借助 Thermo-Calc 软件引擎 (加上一些 DICTRA 扩展) 的强大支持, 这些编程接口可以提供各种热力学性质、局部平衡以及驱动力的计算, 而这些信息正是用户编写或由第三方提供的材料性能和加工模拟软件所需要的。最成功的范例即是完整的 DICTRA[®] 软件包、MISCRESS[™] 软件和 PrecipCalc[™] 软件。最近, 利用这些编程接口耦合 Thermo-Calc/DICTRA 引擎和第三方软件如 Fluent[™] 和 Phoenix[™] 以及 FEM/PDE 计算和相场模拟的应用正不断涌现。

当前, 计算与实验的同步进行使得材料研发较之单纯依靠实验的试错法更为便捷且可靠。热力学计算方法的潜力通过 Thermo-Calc/DICTRA 软件、数据库和接口程序的不断发展而日益得到展现。现有的软件允许在冶金、合金设计、材料科学、半导体/超导体、化学、化工、地球化学、能源循环、电力、食品工业、核废料处理、环境治理的等领域进行实际的计算。图 1-1 展示了一系列计算的实例。

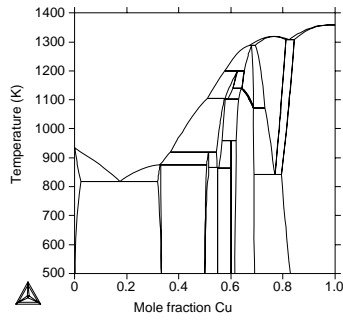
Thermo-Calc/DICTRA 软件开发的其中之一即是规划和减少花费不菲的实验。通过计算预测实验结果已经成为可能, 这将减少最终实验的数量。甚至计算本身得到的结果就是足以信赖而可直接使用的。

现在和将来, TCS, STT 和 KTH-MSE 将会全力以赴开发 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件以及适用于各类材料的数据库和接口程序。通过和遍布世界各地的研发伙伴以及 Thermo-Calc/DICTRA 用户的通力合作, 这些发展是指日可待的。

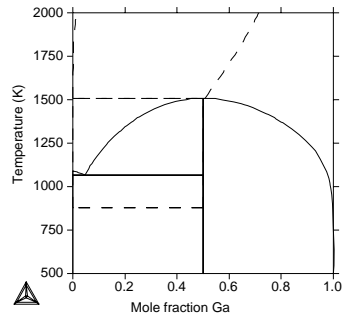
Thermo-Calc 软件的宗旨即成为科学家和工程师在实验室、企业中、课堂上得力的研发和教学工具, 同时通过将理论模型和严格评估的热力学和动力学数据有机结合以为解决实际问题提供新的启示。

Thermo-Calc 软件的最终目的是在最大程度上协助您节省在材料设计、生产和应用上花费的时间和金钱。

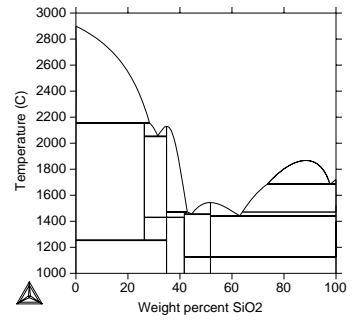
Thermo-Calc 软件的发展战略即为材料工业和研发机构提供迅速快捷的多元解决方案。



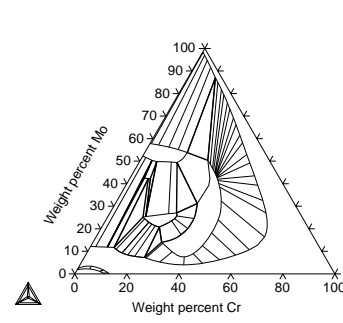
(a) Al-Cu



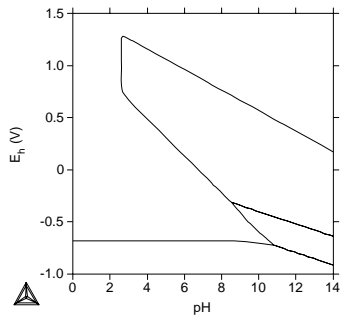
(b) Ga-As



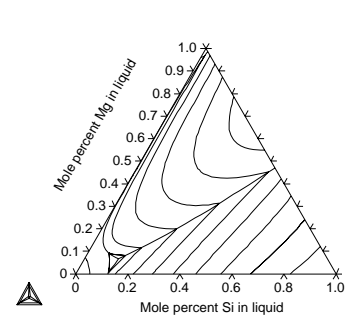
(c) CaO-SiO₂



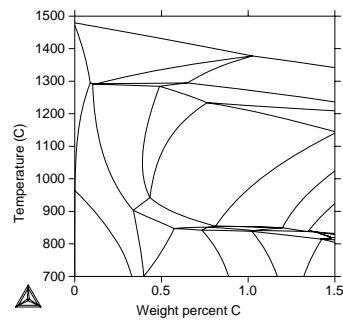
(d) Fe-Cr-Mo



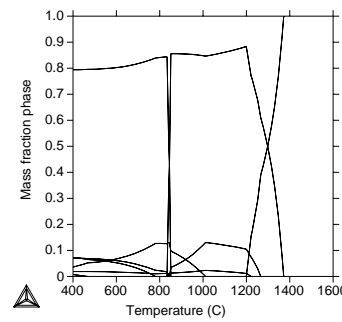
(e) Fe-O-H



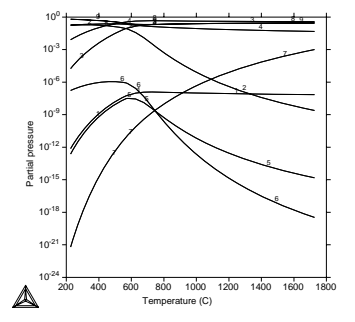
(f) Al-Mg-Si



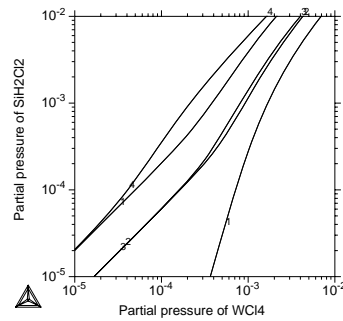
(g) M42 high speed steel



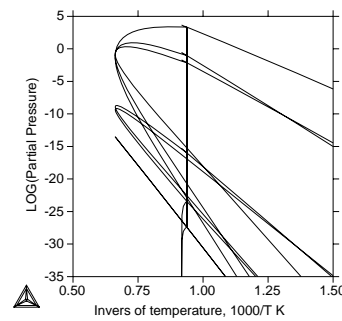
(h) M42 high speed steel



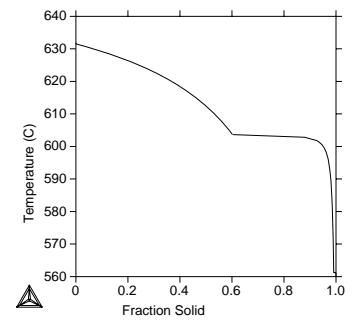
(i) Gas speciation



(j) Coating



(k) Partial pressures



(l) Solidification Simulation

图 1-1. Thermo-Calc 的计算范例

图 1-1 展示了使用 Thermo-Calc 计算得到的一些图形。大部分图片选自“Thermo-Calc 范例手册”，它会告诉你如何计算并绘制他们。所有的图形都是选定坐标和必须条件后通过 Thermo-Calc 计算得到的。Thermo-Calc 可以计算单个的平衡，事实上，通过内嵌的强大命令可以直接计算出许多重要的平衡。同时还有许多的图形只需调用 Thermo-Calc 的特别模块如 BINary, TERnary, POTential, POURBAIX, SCHEIL 即可立刻计算得到。

头两幅图形显示的是 Al-Cu 和 As-Ga 二元系。在图 b) 中，实线代表的是无气相存在时的亚稳体系。虚线显示的是有气相存在时的平衡。Al-Cu 的热力学数据是从 COST-507 数据库中得到而 As-Ga 则从 Group III-V 数据库中获得。图 c) 为 CaO-SiO₂ 伪二元系，其热力学参数取自 IONIC 数据库。以上所有的数据库均与 SGTE 数据库兼容。

第二行显示的是各种三元系相图。第一幅是 Gibbs 三角坐标下 Cr-Fe-Mo 合金体系 1000°C 的等温截面。第二幅是铁在水中的优势区域图。最后一幅是 Al-Mg-Si 体系的液相面投影图及等温线。

第三行显示的是含有 Co、Cr、Mn、Si、Mo、W、V、和 C 元素的 M42 钢的相图。第一幅图中其他合金成分固定而只有碳含量随温度变化。图上的线段围成了不同的稳定相区。第二幅图仍为 M42 钢只是此时碳含量是固定的，而不同相的含量随着温度变化。其它诸如碳活度，相成分等在计算中获取的变量以及状态函数等均可作为坐标轴进行绘图。最后一幅图显示的是 C-H-O 气体中主要组元的分压随温度的变化。

最后一行展示的是一些更具应用背景的图形。第一幅是用于 CVD 涂层设计，图上显示各种固相与 WCl₄ 和 SiH₂Cl₂ 的混合气体的在过量氩气条件下的相平衡情况。在图例的右下方，仅有固态钨可以沉积。图上的线段围成了单相或两相的沉积区域。数字标记是在线段上摩尔分数为零的相。而那个仅含有 wSi₂ 的狭窄区域很引人注目。第二幅图是从和第一行图 b) 同一次计算中得到，只是现在气相成分沿液相线的分压是随温度的倒数变化。竖直线表示的是共晶温度。分压的情况对控制从气相结晶生长非常关键。最后一幅显示的是所谓的 Scheil-Gulliver 凝固模拟，即假设固相无扩散。图中以 Al-Mg-Si 体系为例，曲线

1.3 致谢

在 Thermo-Calc 软件/数据库/接口程序过去 35 年的发展历程中，仅就 KTH 材料科学与工程系就投入了超过 28000 万小时在相关研发。同时，在这一过程中我们得到了来自 NUTEK (Swedish National Council of Technical Development, previously STU), NFR (Swedish National Council of Natural Science), Sandvik Steels AB, SGTE (Scientific Group Thermodata Europe), NIF (Nordisk Industrifond), CAMPADA Project (Swedish National Strategic Consortium on Materials), CCT Project (Center of Computational Thermodynamics)等机构和项目的支持。

Thermo-Calc 用户指南的各个部分最初由 KTH 材料科学与工程系的不同作者撰写。Bo Sundman 教授从 1981 年开始负责 Thermo-Calc 手册的持续更新，并且是手册几乎所有部分的主要作者。他和其他作者，如 Drs. Bo Jansson、Jan-Olof Andersson、Lars Höglund、Björn Jönsson 和 Malin Selleby 共同完成了这一工作，并得到了上述机构的资助。来自 KTH、SGTE 的同事和国际专家（尤其是 Mats Hillert 教授和 L. Lukas 教授）的宝贵评价和建议也添加入手册之中。以上的所有努力构筑了该手册坚实的基础，在此特别致谢。

TCCR/TCCQ/TCCP/TCCN 用户指南的现任编辑 (Thermo-Calc Software 公司的 Pingfang Shi 博士; pingfang@thermocalc.se) 非常感谢 Bo Sundman 教授、Åke Jansson 博士、Lars Höglund 博士、Qing Chen 博士、Anders Engström 博士、Jan-Olof Andersson 博士、Thomas Helander 博士和 Nathalie Dupin 博士对于手稿的严格评审。

我们同时感谢世界各地 Thermo-Calc 已有用户的评价和建议。正是通过这些反馈,我们可以进一步改进 Thermo-Calc 软件/数据库/接口程序及其说明文档。

1.4 版本更新历史

Thermo-Calc 软件几乎从 1981 年开始历年更新一次。Thermo-Calc 软件最新版本是 2006 年 5 月发行的 TCCR 和 TCW 4, 以及与其配套的 DICTRA 24 和编程接口 TQ6、TCAPI4 和 TC MATLAB Toolbox 4。每个新的软件发行版 (及其数据库和编程接口) 都是 TCS (Thermo-Calc Software)和 DCT(Division of Computational Thermodynamics, KTH-MSE)研发的结晶。

随着所有新软件的发行,一些数据库也随之升级和扩充以便配合软件功能的提高,同时一些新数据也不断被开发。这些升级或新的数据库都是 TCS, DCT、我们的合作伙伴及富有经验的用户共同努力的结果。

热力学编程接口 (TQ) 从 TCCL 版本开始发行,同时随后续的 TCC 软件版本不断更新。完全 Windows 版本 (TCW) 和应用编程接口 (TCAPI 和 TC MATLAB Toolbox) 从 TCCN 版本开始面世。

表 1-1 显示的是 1996 年后版本的更新历史,其中包括了软件的新特性、修正、编程接口的更新及数据库的增添。

不同的 Thermo-Calc 软件/数据库/接口程序中主要改进的全部细节均可在 Thermo-Calc 软件时事通讯 (期号在表格中列出) 或 Thermo-Calc 技术信息中找到。请访问 TCS 网站 (www.thermocalc.com) 查询最新的和历史的文档。

在此版本 Thermo-Calc 说明文档中,即 TCCR 用户指南、Thermo-Calc 软件系统、Thermo-Calc 数据库指南和 TCCR 范例手册,所有直至 TCCR 版本添加的新特性、提高的功能、新的或修改的模块、新的或升级的数据库、新的应用范例均记录在案。

请注意 Thermo-Calc 说明文档并不总随软件的更新而更新。但是,当说明文档由于某种原因而未更新时,一些包含软件/数据库/接口程序更新的辅助文档 (如 Thermo-Calc 技术信息、Thermo-Calc 特别数据库应用和 Thermo-Calc 参考书) 或其他特别文件将会发行。

表 1-1. Thermo-Calc 软件/数据库/接口程序更新历史

TCC 版本号	TCC 发行日期	主要更新: 软件 - 新特性和修补; 接口 - 升级和新发行; 数据库 - 增补 和新发行.	发行相关参考
K	1995 年 4 月	<ol style="list-style-type: none"> 两个简便易用的模块添加进系统以便自动计算相图: BIN 为二元相图绘制准备而 POTENTIAL 模块用于绘制 氧位图。 对 POLY, GES, PARROT, TAB and POST 模块中的许多功能进行了增强 例如 : <ul style="list-style-type: none"> 探测是否存在 溶解间隙 执行 MAP 命令时包含 “平面中的结线” 增加了如压力或外接条件对 Gibbs 自由能的影响 在执行 MAP 和 STEP 命令时自动添加坐标轴 TAB 模块中的直接绘图 U-分数的计算 STEP 命令中更优的收敛 许多 POLY 命令的修改 提高了 MACRO 文件 打开函数 新版本可以在 OS/2、MS-DOS、所有 UNIX 平台 以及 VAX/VMS 机器上运行。 ETTAN 软件接口对于 PC 用户已经发行, 以便使用 STEP 命令计算性质图。 发行 SSUB1 (SGTE Substances Database version 1)数据库; 扩充 IRSID SLAG 数据库; ThermoTech 公司的 Al/Ti/Ni 基金数据库被 Thermo-Calc 引进。 	Thermo-Calc 时事通讯 18 期
L	1996 年 11 月	<ol style="list-style-type: none"> 两个更为简便易用的模块添加进系统以便自动计算相图: SCHEIL 模块用于凝固过程的模拟; POURBAIX 模块 用于计算水溶液中 pH-Eh (优势区域图) 和其他许多性质图。 对 POLY, GES, PARROT, TAB and POST 模块中的许多功能进行了增强 例如 : <ul style="list-style-type: none"> 添加了 DEFINE_MATERIALS 新命令 改进了 STEP and MAP 命令 可优化的变量数从 100 增加为 1000 改进了用于计算短程有序的 CVM 模型 TQ 1 (与 TCCL 完全兼容) 正式发行。 TCCL 对应的名为 TC4A (版本号 N)的教学版本正式发行。 FEDAT1 钢数据库和 AEAT 核材料数据库发行。 	Thermo-Calc 时事通讯 19 期
M	1998 年 8 月	<ol style="list-style-type: none"> 用于自动计算三元相图的 TERN 模块添加进系统中。 	Thermo-Calc

Thermo-Calc 用户指导书

		<p>2. 对 POLY, GES, PARROT, TAB and POST 模块中的许多功能进行了增强 例如：</p> <ul style="list-style-type: none"> • 添加了 DEFINE_DIAGRAM 新命令 • 在 MAP 命令中添加了计算单变量线（mono-variant lines）的选项 • 添加了 ADD_LABEL、MODIFY_LABEL、LABEL_DATA 和 COMMENT 新命令 • 改进了 ADD_INITIAL 和 CALCULATE_ALL 命令 • 修改了 TAB 模块 <p>3. 替换模式被增添进 PARROT 模块中。</p> <p>4. 添加了随成分变化的体积变量。</p> <p>5. 改进了 POURBAIX 模块。</p> <p>6. 添加了多重数据库 目录结构和简化的数据库管理。</p> <p>7. 针对 WindowsNT/95/98 的新的绘图模块。</p> <p>8. TQ 2 (与 TCCM 相兼容) 正式发行。</p> <p>9. TCCM 对应的演示版本(TC4A 版本号 M)正式发行。</p>	<p>时事通讯 22 期</p>
N	2000 年 6 月	<p>1. 添加了 FLEXLM 许可证管理系统</p> <p>2. 在 Windows 界面下, 只需双击 Thermo-Calc Classic (TCC)和 DICTRA 软件图标即可启动软件。</p> <p>3. 引入了用于高分子体系的 Flory-Huggins 模型。</p> <p>4. 添加了同于离子液体的 准化学 (Quasi-chemical) 模型。</p> <p>5. 四面体 CVM 模型可与规则溶液过剩(Redlich-Kister)同时使用。</p> <p>6. 经过全面修改的用于水溶液的 HKF 模型已添加入系统, 并需要进一步测试。</p> <p>7. 对 POLY, GES, PARROT, TAB and POST 模块中的许多功能进行了增强 例如：</p> <ul style="list-style-type: none"> • POLY 模块扩展到可计算 40 个成分和 1000 个组元 • POLY 模块的新命令 COMPUTE_TRANSITION 可以简化溶解度极限的计算 • 相代码 F 节省了计算 4 个亚点阵有序需要的时间和内存 • 完全有序相可以包含无序过程能量 • MACRO 文件可以完成 5 级嵌套 • 为 GES 模块添加了 SET_INTERACTIVE 命令 • 改进了 TDB 模块错误反馈系统 • LIST_STATUS 输出得到了简化 • MAP 和 STEP 的输出得到了简化 • 改进了 PARROT 的输出 • 修正了 TDB 和 PARROT 模块的一些错误 <p>8. 对 POURBAIX 模块进行了深入的改造, 添加了用于 STEP 计算的选项 4。</p> <p>9. 完全 GUI 驱动的 Windows 版本, TCW1 (Thermo-Calc Windows 第 1 版, 即与 TCCN 兼容的 TCW-Basic)正在小范围内试用。.</p> <p>10. TCCN 的演示版(TC4A 版本号 N) 正式发行。</p>	<p>Thermo-Calc 时事通讯 24&25 期</p>

Thermo-Calc 用户指导书

		<p>11. TQ 3 (与 TCCN 相兼容) 正式发行。</p> <p>12. TCAPI 1 (与 TCCN 相兼容) 正式发行。</p> <p>13. TCFE 钢/Fe 合金 数据库升级到 TCFE2 (TCFE2K)。</p> <p>14. 5 个新的数据库正式发行:</p> <ul style="list-style-type: none"> • TCNI1 (适用于 Ni 基高温合金, v1) • TCER1 (用于 循环/重熔 过程, v1) • TCES1 (用于烧结/焚化/燃烧过程, v1) • AQS1 (用于使用 HKF 模型的水溶液, v1) • GCE1 (用于矿物和 亚/超临界流体, v1) • COST2 (用于轻金属, v2) 	
P	2002 年 11 月	<p>1. 添加了在单个平衡和 STEP 中自动计算 T_0 温度的选项。</p> <p>2. 添加了在单个平衡和 STEP 中自动计算类平衡 (para-equilibrium) 的选项。</p> <p>3. 添加了当相易于发生调幅分解时检测内部稳定的选项。</p> <p>4. 非理想溶体相最大可能组分数从 80 增加到 200。</p> <p>5. 提高了 COMPUTE_EQUILIBRIUM * 命令序列的收敛稳定性</p> <p>6. 改进了 COMPUTE_TRANSITION 命令, 使用关键词 ANY 替代相名称时可以查看随条件出现的新相。</p> <p>7. 自动对最小摩尔分数修正, 以便保证在计算单点平衡、特殊选项、STEP 和 MAP 时解的收敛; 用户可以通过使用 SET_NUM_LIMITS 命令设置需要的最小摩尔分数。</p> <p>8. 在 MAPPING 或 STEPPING 计算时使用的数据库和条件将自动添加到所绘相图上。用户可以使用 SET_PLOT_OPTIONS 命令或切换 WRITE_CONDITION 选项来取消显示条件 (尤其是当条件众多的时候)。</p> <p>9. TCCP 从绘制的三角和四面体相图中生成 VRML (Virtual Reality Modelling Language) 文件以产生 3D 图形; 这些文件可以通过添加 VRML 插件的浏览器或单独的程序进行观看和打印。</p>	Thermo-Calc 时事通讯 26、27&28 期

		<p>10. Windows 版本的 TCCP 允许将绘制的图形通过使用 DUMP_DIAGRAM 命令转做 PNG、BMP、PDF、JPEG 和 TIFF 格式的图形文件。</p> <p>11. 在 TDB 模块中, 新命令 SET_AUTO_APPEND 允许在相同体系定义下方添加数据库。</p> <p>12. 一个特别的程序增补进 TDB 模块用于 UNIX/Linux 与 Windows 平台文件格式的相互转换。当这一转换是必须时, 程序将发出警示信息。</p> <p>13. 每个商业数据库都添加了单独的数据库许可文件, 以确保对应于许可目录和安装类型的合理使用。关闭了通过 GES 模块查看加密商业数据库的功能。</p> <p>14. PARROT 模块的子模块 ED_EXP, 现在已经可以通过使用新的 STORE_ALL_WEIGHTS 和 RESTORE_ALL_WEIGHTS 命令来存储和调用为不同实验数据赋予的权重。</p> <p>15. 在 PARROT 模块的子模块 ED_EXP, 现在也可以通过使用 LIST_ALL_EQUILIBRIA 命令列出所有计算的平衡点, 同时可以立即使用 GRAPHICS_PLOT 命令 (等同于 POLY 模块下 STEP_WITH_OPTIONS 命令) 计算特定实验点下的性质图。</p> <p>16. 完全改进的用于计算水溶液的 HKF model 经过深入测试已经增补进系统中, 与之相伴的是 AQS2 水溶液数据库。</p> <p>17. 对 POURBAIX 模块进行了深入的改进, 现在可以适用于 TCAQ2 数据库 (SIT 模型) 或 AQS2 数据库 (HKF 模型) 以及其他固相纯组元和固溶体的数据库, 以便于处理 复杂的包含水溶液的多组元多相体系。</p> <p>18. 深入而详细的在线帮助系统已经写入各个不同的模块。这些帮助文件已经为所有基本模块完全修改过。</p> <p>19. TCW 完全版 2 (与 TCCP 相兼容) 正式发行。</p> <p>20. DICTRA 22 (与 TCCP 相兼容) 正式发行。</p> <p>21. TCCP (TC4A vP) 和 TCW2 (TC4U v2) 相对应的演示版正式发行。</p> <p>22. TQ 4 (与 TCCP 相兼容) 正式发行。</p> <p>23. TCAPI 2 (与 TCCP 相兼容) 正式发行。</p> <p>24. TCMATLAB[®] Toolbox2 (与 TCCP 相兼容) 正式发行。</p> <p>25. 采用了针对数据库名称的系统命名法 (详情请见 <i>Part 4</i>)。</p> <p>26. 应用了加密的商业数据库, 同时, 客户可以向 TCS 提出特别请求并且在签署 TCS 数据库协议的前提下, 得到个别商业数据库的非加密文本版本。</p> <p>27. 在 TCCP 和 TCW2 中新添和升级了许多数据库 (源自 TCS 及其合作伙伴):</p> <ul style="list-style-type: none"> • PURE4 (用于纯组元; 基于 PURE3) • SSUB3 (用于纯化和物/物质和气相组元, v3) • SSOL4 (用于合金溶体, v4; 基于 SSOL2 和 NSOL4) • TCFE3 (用于 钢/铁合金, v3; 基于 TCFE2/TCFE2K) • TCMP2 (用于材料加工过程, v2; 基于 TCER1) • SLAG2 (用于含铁和其他类型的炉渣, v2; 基于 SLAG1) • ION2 (用于离子溶液, v2) 	
--	--	---	--

		<ul style="list-style-type: none"> • TCAQ2 (使用 SIT 模型用于水溶液, v2) • AQS2 (使用 HKF 模型用于水溶液, v2) • GCE2 (用于地球化学和环境系统, v2) • SEMC2 (用于半导体, v2) • NSOL4 (用于合金溶体, v4); 其不就被 SSOL4 替代) • NSLD2 (用于多组元焊料合金, v2) • NAL5 (用于 Al 合金, v5) • NOX2 (用于氧化物固溶体相, v2) • SNOB1 (用于贵金属合金, v1) • USLD1 (用于多组元焊料合金, v1) 	
Q	2004 年 6 月	<p>1. <u>TDB 模块:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> • 从 TCCP 开始, 所有商业数据库均进行了加密以防止非法拷贝。但是这导致了使用不同类型数据库的一些不便。经过努力现在已经可以同时加密数据库之间和公共数据库联合使用。 • 现在可以为 TDB 文件中关键词 TYPE_DEFINITION 使用新的选项 AFTER。它和 GES 中的选项相似但是在所有参数写入后执行。这将非常有利于变换二元过剩 Gibbs 自由能模型(见 TCCQ 范例 50)。 • 新的关键词 ADD_REFERENCES 添加进 TDB 文件以便拥有更多的参考文献列表。 • 几个 ASSESSED_SYSTEMS 关键词已可在同一个 TDB 文件中使用从而可以拥有更多的已评估的体系列表。 <p>2. <u>GES 模块:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> • 两个不对称二元系过剩 Gibbs 自由能模型, 即简单多项式和 legendre 多项式, 已经添加进系统以补充现有的对称的 Redlich-Kister 模型。通过使用 AMEND_PHASE_DESCRIPTION 命令下的新选项 MIXED_EXCESS_MODELS 和 EXCESS_MODEL 可以在不同模型间切换 (见 TCCQ 范例 49)。 • 添加了 Toop-Kohler 三元系外推方法。在 AMEND_PHASE_DESCRIPTION 命令下使用新选项可以选择不同模型。 • 蒙特利尔 F*A*C*T 小组 Kongoli 等人发展的准化学模型在缩合液模型的基础上被添加进系统。在 AMEND_PHASE_DESCRIPTION 命令下选择 QUASICHEMI_KONGOLI T 选项即可实现。参与的缩合体或组元必须依据模型拥有化学计量比。(见 TCCQ Example 49)。 • 添加了新的命令 ADD_COMMENT 为用户提供了记录参数或其他相关信息的方便。ADD_COMMENT 命令将首先列出所有存储的笔记, 接下来即可对内容进行删除、修改和增补。 • 为 AMEND_PHASE_DESCRIPTION 命令添加了 DEFAULT_STABLE 新选项, 以便用户在初次计算时可以更好的猜测稳定相。 • 为 AMEND_PHASE_DESCRIPTION 命令添了 SITE_RATIOS 新选项, 	Thermo-Calc 时事通讯 29 期

		<p>用于将单亚点阵相的点阵数量改为不是 1 的任意数。</p> <p>3. <u>POLY 模块:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> 在 SPECIAL_OPTIONS 命令中添加了 NEVER_ADJUST_MINIMUM_Y 新选项, 可以关闭自动调整数值精度。 在 SPECIAL_OPTIONS 命令中添加了 TOGGLE_ALTERNATE 新选项, 对于从实验数据中优化参数非常有用 (在 PARROT/Ed-EXP 模块)。 在 SPECIAL_OPTIONS 命令中添加了 SHOW_OUTPUT_FILE 新选项, 用于将 SHOW_VALUE 命令输出到简单的文本文件中。与此同时输出结果仍在屏幕上显示。 在 STEP_WITH_OPTIONS 命令中添加了 MIXED_SCHEIL 新选项, 当条件正确设置时可以在 Scheil-Gulliver 凝固模拟中添加间隙原子在固态相中的背扩散。建议用户可直接进入 SCHEIL_SIMULATION 模块而进行自动模拟。 总体而言, 平衡计算的收敛性得到了提高。当计算第一个平衡出现问题时, 建议使用 COMPUTE-EQUILIBRIUM * 命令。 除 C 外的元素可以选为快速移动间隙成份, 并且通过使用 SPECIAL_OPTIONS 或 STEP_WITH_OPTIONS 命令可以在类平衡 (para-equilibrium) 计算中包含多于一种的间隙原子 (如 C, N, O, S 等)。 <p>4. <u>POST 模块:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> 改进了 ADD_LABEL 和 MAKE_EXPERIMENTAL_DATAFILE 命令。 现在可以在工作空间中存储和添加标签和它们的位置, 将来还可在 EXP 文件中保存。 GRAPH 窗口得到了进一步的提升。现在可以方便地在图形上自由拖动和编辑任何绘制的/添加的标签或文字。 <p>5. <u>PARROT 和 ED EXP 模块:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> 从 TCCP 开始实验数据可以从 POP 文件中使用 GRAPHICS 命令获取。 现在可以根据用户的喜好允许载入多组数据和使用不同的符号进行标识。 改进了 ALTERNATE 模式。现在可以在替换计算下将函数一同进行评估而且可以为每一个平衡选用替换模式。 在 POLY 模块下 SPECIAL_OPTIONS 命令中增添了 TOGGLE_ALTERNATE 新选项, 用于将 PARROT (ED-EXP) 模块中替换计算技术设置为 DEFAULT、ALWAYS 或 NEVER。 在 LIST_RESULT 命令中添加了 G 新选项, 用于构造包含两列的实验数据文件, 一列为实验值而另一列为计算值。这便于绘图和比较拟合的结果。 	
--	--	---	--

		<p>6. <u>REACTOR 模块:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> 升级了 REACTOR 模块。现在不仅可以计算稳态过程并且可以计算随时间变化的动态过程, 例如液态钢的脱碳。 <p>7. <u>SCHEIL Module:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> 在 SCHEIL_SIMULATION 模块下为用户添加了新的选项用来定义一个或多个快速扩散成份 (通常为间隙原子, 如 C、N、O、S 等)。从而它们在固态相中的背扩散可被自动纳入 Scheil-Gulliver 凝固模拟中。对于初晶相为铁素体的钢, 一个额外的选项(允许 BCC→FCC 转变) 可以用来考虑在奥氏体中可能发生的相变。(见 TCCQ 范例 48)。 <p>8. 添加了 3 个新的范例(TCCQ 范例 48 到 50), 同时现存的范例也进一步得到改进。</p> <p>9. 在各个不同模块加载了深入而详细的在线帮助手册。对所有基本模块的帮助文件进行了全面的修订。</p> <p>10. TCW 3 (与 TCCQ 相兼容) 正式发行。</p> <p>11. DICTRA 23 (与 TCCQ 相兼容) 正式发行。</p> <p>12. 与 TCCQ (TC4A vQ) 和 TCW3 (TC4U v3) 对应的演示版正式发行。</p> <p>13. TQ version 5 (与 TCCQ 相兼容)正式发行。</p> <p>14. TCAPI version 3 (与 TCCQ 相兼容) 正式发行。</p> <p>15. TCMATLAB® Toolbox v3 (与 TCCQ 相兼容)正式发行。</p> <p>16. 在 TCCP 和 TCW2 中新添和升级了许多数据库 (源自 TCS 及其合作伙伴):</p> <ul style="list-style-type: none"> 对所有十个公共数据库(即 PURE4、PSUB、PBIN、PTER、PKP、PCHAT、PG35、PION、PAQ2 和 PGEO) 进一步修正, 它们新的子版本已经免费的包含进 TCCQ 和 TCW3 中。 对一些商业数据库(即 SSUB3、SSOL2、SSOL4、TCMP2、SLAG2、ION2、TCAQ2、AQS2、GCE2、SMEC2、NSLD2、SNOB1、TTNi6、TTAI3 和 TTMg2) 进一步修正 (绝大多数作为子版本), 并且当用户具有相同的主数据库 (即从 TCMP2.1 到 TCMP2.2) 有效许可证时, 同样可以获得这些版本的更新; 否则, 只有在购买数据库更新的条件下, 才能从某个旧的主数据库 (即从 TCMP2.1 到 TCMP2.2) 升级到新的版本。 最近, Thermo-Calc Software 公司购买了原属于 AEA Technology plc. (UK)、UES Software Inc. (USA) 和 ESI Group (Switzerland) 的 NUMT2、NUOX4、NUTO1 和 NUTA1 数据库 的所有版权和知识产权。 	
R	2006 年 8 月	<p>1. <u>POLY 模块:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> Thermo-Calc 软件新版本程序 TCCR 和 TCW4 (同样包括各种 Thermo-Calc 接口程序)最大改进是采用了<u>全局最小技术</u>, 这将确保在设定条件下平衡计算中的极小值是最稳定的极小点。这项基于<u>传统</u> 	Thermo-Calc 时事通讯 31&32 期

		<p><u>GEM (Gibbs 自由能最小) 方法</u> (即先前版本中 POLY 模块中使用的最值技术) 的新技术将会最终防止在设定体系中出现不希望得到的亚稳或局部平衡, 并将自动探测可能的溶解间隙和为出现一个或多个溶解间隙的溶体相添加额外的成份集 (即用户不需再事先设定)。</p> <ul style="list-style-type: none"> 在执行 COMPUTE_EQUILIBRIUM 命令计算单点平衡时, 全局最小技术被默认使用。用户可以选则关闭或打开该功能 (详情见下文)。 在现有的 TCCR 和 TCW4 中, 全局优化技术完全支持的平衡条件有: T, P, N, N(成份)、X(成份)、B, B(成份) 和 w(成份)。在其他平衡条件下 (现有的 TCCR 和 TCW4 中), 程序将首先使用 POLY 模块的最值技术 (使用传统的 GEM 方法), 再使用全局最小技术进行探测和修正直到发现最小值为止。 考虑单点平衡的计算的情况, 现在使用 COMPUTE_EQUILIBRIUM 命令时有一些必须的变化: <ul style="list-style-type: none"> ➤ COMP_EQ 使用全局最小技术 ➤ COMP_EQ - 使用传统 GEM 方法 ➤ COMP_EQ * 由于全局最小技术更加稳定, 因此当该功能打开时, 无须再使用此命令! 仅当全局最小技术关闭时才有必要使用。 在 STEP 和 MAP 计算时, 全局最小技术只在初始时使用, 而并非在全部步进/绘图中一直使用。这样做的目的是为了减少计算时间。STEP 和 MAP 命令的完全改造仍在进行中, 并可望在下个主版本中推出。 POLY 模块中的新命令 SET_MINIMIZATION_OPTION 用于选择如何进行 Gibbs 自由能最值 (在 TCW4 中使用“Global Minimization...”选项)。全局最小技术在 TCCR/TCW4 的 POLY 模块中计算单点平衡 (和 STEP 和 MAP 计算中的初始阶段) 中默认使用。用户可以使用该命令永久性的 (在 TCC 软件启动后的所有计算中) 关闭全局最小技术 (当然之后可以使用这一命令将此功能开启), 接下来就可以使用 POLY 模块中通常最优化程序 (就像使用先前的版本, 如 TCCQ/TCW3, TCCP/TCW2 等)。通过使用这一命令, 用户又可以调整通常求最小值的方式 (主要是就如何控制平衡态下求 Gibbs 自由能最小值而言)。当在平衡计算中使用全局最小技术时, 用户可以在 STEP 和 MAP 计算中进一步调整分配格点和处理溶体相新的成份集的方式。由于全局优化技术在一些计算中同时使用通常的 POLY 优化程序, 因此可以通过调整平衡态下 Gibbs 自由能寻优步骤以提高收敛性。 <p>2. <u>GES 模块:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> 在 Thermo-Calc 软件中完全加入了广义 PVT 模型(或 广义 Thermal EOS 模型, 由 Chen 和 Sundman 发展, 2005), 用于计算多种材料[即非晶 和其他类型固体/矿物 (碳化物、氮化物、氢化物、氧化物、硫化物、氢氧化物、硼化物、亚磷酸盐、岩盐、硅酸盐、碳酸盐、硫酸盐、硝酸盐、磷酸盐等)]中体积和压力对 Gibbs 自由能的贡献。这个模型基于基本物理; 与传统的 Murnagham 模型、Birch-Murnagham 	
--	--	--	--

		<p>模型 和修正的 Birch-Murnagham 模型(这三个模型已经包含于 Thermo-Calc 软件并且用于现存的 Thermo-Calc 数据库)相比较,它不会在高温高压下发生异常并且允许使用更少的参数精确描述/计算温度和压强对体积、热膨胀、体模量/压制性和其他物理性质的影响。感谢上述它较之传统 PVT 模型的显著优势,新的模型已经应用于严格评估不同钢/铁合金经过的体积数据,所得的结果(基于 Lu 和 Sundman 的工作, 2005)已经并入新开发的 TCFE4 数据库 (从 TCFE3 升级而来)。</p> <ul style="list-style-type: none"> • 为 <code>AMEND_PHASE_DESCRIPTION</code> 命令 添加 了 <code>FRACTION_LIMITS</code> 新选项。当热力学模型和严格评估的数据只能在设定的成分范围内使用时,用户可以设置某一模型下溶体相的适用成分极限 (就相中元素的摩尔分数而言)。例如, <code>FE_LIQUID</code> 溶体相在 <code>SLAG</code> 数据库中只适用于 炉渣体系的富铁液体,并且 现在必须设定所需溶体相的适用成分极限(在引入全局最小技术的现行 <code>TCCR/TCW4</code> 和 Thermo-Calc 接口程序中); 否则,一些额外的成分集(来自可能的溶解间隙)也许会在模型和数据适用成分范围外自动生成。类似的例子是 <code>TCAQ2/PAQ2</code> 和 <code>AQS2</code> 数据库中的 <code>AQUEOUS</code> 溶体相。用户同样可以在自有数据库或特定计算中为一些溶体相使用这个新选项。 <p>3. <u>TDB 模块:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> • 为 <code>GES</code> 命令 <code>AMEND_PHASE_DESCRIPTION</code> 添加的新选项(如上所述)同样可被 <code>TDB</code> 文件中的关键词 <code>TYPE_DEFINITION</code> 所使用。这正是随 <code>TCCR/TCW4</code> 发行的 <code>SLAG2</code>、<code>TCAQ2/PAQ2</code> 和 <code>AQS2</code> 数据库所采用的方法。因此,用户在使用这些数据库时无需再为 <code>SLAG</code> 和/或 <code>AQUEOUS</code> 溶体相添加 <code>FRACTION_LIMITS</code> 的描述。 <p>4. <u>POST 模块:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> • 现在可以在 PC Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境中将图形保存到可编辑的 EMF (Enhanced Windows Metafile) 图形文件。通过选择新的图片格式(使用 <code>SET_PLOT_FORMAT</code> 命令 并接着选中设备 19) 同时绘图即可 (使用 <code>PLOT</code> 命令)。这样的图形文件(包含 EMF 默认扩展名) 可以在适当的图形编辑器中修改和操作 (如 MS PowerPoint)。 • 使用新命令 <code>LIST_DATA_TABLE</code> 可以在屏幕上列出不同的性质 (不仅计算后性质图的 Y 轴) 随自变量 (即性质图中的 X 轴)的变化。同时可将性质图的数据输出到 MS Excel 格式的电子表格中 (使用用户自定义的文件名和默认的扩展名 XLS)。这使得在 Thermo-Calc 软件系统外可以进一步对文件(使用 MS Excel 程序)编辑/操作或用于可视化。 • 进一步对 <code>GRAPH</code> 窗口进行了改进。它现在允许: <ul style="list-style-type: none"> ➤ 通过简单的在线段上方或邻近处移动鼠标指针,可自动探测性质图中的线段/曲线(X-/Y-坐标和性质图的名称将同时在 	
--	--	--	--

		<p>GRAPH 窗口下方显示)。这个特性仅当标准变量作为一坐标轴 (自变量作为另一坐标轴)时才能实现(而非适用于用户自定义或模块预先定义的符号)</p> <ul style="list-style-type: none"> ➤ 通过简单的将鼠标指针移到相区中,可自动探测等温截面或垂直截面中的稳定相 (X-Y-坐标和稳定相的名称将同时在 GRAPH 窗口下方显示)。 ➤ 通过简单的点击鼠标右键(在将鼠标指针移入相区后)并在下拉菜单中选择“Add Label”选项,可自动在等温截面或垂直截面中添加相的标签。 ➤ 在 SET_PLOT_OPTION 命令下使用新选项 PLOT SYMBOLS AT NODE POINTS , 可以在实际计算节点处添加符号, 并可使用该命令下的新选项 SYMBOL SIZE 改变符号大小。 ➤ 通过在已绘制好的相图或性质图中点击鼠标右键,用户可以从下拉菜单中选择直接“Print”到已连接的打印机, 或 “Save EMF to file” (为固定的不可编辑的 EMF 图形格式) 或 “Copy EMF to Clipboard”。在同一下拉菜单中, 用户也可添加自选文字 (通过 “GD_ITEM/Add text item” 选项) 或 (如上文所述) 在已绘图形上自动添加/识别稳定相区的标签(通过 “Add Label” 选项, 当然其不适用于已绘好的性质图)。 <p>5. <u>TERNARY 模块:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> • 在 TERNARY 模块中添加了新选项 Liquid Surface , 用于计算已评估的三元合金体系包含液相的单变量线和等温线 (在设定温度间隔下)。这个选项可以自动识别和标识所绘液相面投影图中不同零变量反应的类型和细节, 并在屏幕上显示或存储进图形文件和简单文本文件中。 • 进一步改进/修改后的 TERNARY 模块现在可以计算任何三元合金体系, 即使是需要切换的数据库 (尤其是一些现存的具体合金溶体数据库) 并不含有 选定三元系具体的 ASSESSED_SYSTEM 信息(此时, 屏幕上会显示一条警示信息)。当然, 需要切记的是: 用户在选择数据库时需要了解清楚数据库必须包含所选体系充分而合适的的数据, 并且所需计算的三元系作为一整体是已经通过严格评估; 否则, 使用 TERNARY 模块计算得到的结果将是不完全或完全错误的 (在最糟的情况下)。 <p>6. <u>SCHEIL 模块:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> • 进一步修改/改进的 SCHEIL 模块现在可以在所模拟区域的非平衡计算方法[使用传统的 Scheil-Gulliver 模型]或局部平衡方法[即使用改进的 Scheil-Gulliver 模型, 其考虑快速扩散成份(通常是间隙原子)的背扩散 和 可能的 BCC→FCC 相变]上自动叠加完全平衡时[通过使用简单杠杆定律计算]的凝固通道。但是, 这一叠加图形只适用于在使用 SCHEIL 模块模拟后 绘制的首幅图形[默认即“温度 vs 所有固相摩尔分数”, 绘制 $T(^{\circ}\text{C})$-NS 图]。 <p>7. 对 TCC 中现存的一些例子进行了进一步修正。</p>	
--	--	--	--

		<p>8. 对 <i>TCC 用户指南</i> 的结构进行了大幅度的调整：从 TCCR 版本开始，5 个独立的文件从 TCC 用户指南的相关章节中分离出来。这是由于：</p> <p>a) <i>用户指南</i> 在后续版本中变得越来越大，以至于越来越难于维护和阅读；</p> <p>b) 一些章节（在一定程度上）独立于软件版本，并且普适于其它软件(如 TCW 和 DICTRA) 和应用编程接口 (例如 TQ、TCAPI 和 TC MATLAB Toolbox)。新的文档集包括 5 个独立的部分：</p> <ul style="list-style-type: none"> ➤ <i>TCCR 用户指南</i>； (本文档) ➤ <i>Thermo-Calc 软件系统</i>； ➤ <i>Thermo-Calc 数据库指南</i>； ➤ <i>DATA PLOT 用户指南和范例</i>； ➤ <i>Thermo-Calc 参考文献列表</i>。 <p>这些文档的许多章节已被深入地修改和更新。</p> <p>9. 针对不同模块/命令的在线帮助系统也随之被修改/更新。</p> <p>10. 与 TCCR 相兼容的其它软件和编程接口也被同时发行：</p> <ul style="list-style-type: none"> ➤ TCW4 (TCW 软件版本号 4)； ➤ DICTRA24 (DICTRA 软件版本号 24)； ➤ TCCR (TC4A vR) 和 TCW4 (TC4U v4)的演示版； ➤ TQ6 (TQ 编程接口版本号 6)； ➤ TCAPI4 (TCAPI 编程接口版本号 4)； ➤ TC MATLAB® Toolbox 版本号 4； <p>11. 新的公共数据库，TCBIN (TC 二元溶液数据苦，版本号 1) 随 TCCR/TCW4 软件免费附送。但是，与其它公共数据库不同，它只能以加密数据库形式进行发行，并只能用于 BIN 模块 (在 TCCR 中) 或 Binary Phase Diagram 模块 (在 TCCW4 中)。</p> <p>12. 许多新开发或升级的商业 Thermo-Calc 数据库(源自 TCS 及其合作伙伴)已随 TCCR/TCW4 软件相继面世：</p> <ul style="list-style-type: none"> • TCFE4 正式发行。它由 TCS 基于 TCFE3 开发，并整合了经过严格评估的摩尔体积数据 (以及使用新引进的广义 PVT 模型考虑温度对其的影响)。 • 由我们的合作伙伴 ThermoTech 开发的 TTNi7 (由 TTNi6 升级)、TTAl5 (由 TTAl4/TTAl3 升级)、TTMg3 (由 TTMg2 升级)、TTTi3 (由 TTTi2 升级) 和 TTZr1 (新) 数据库正式发行。 • CCC1 (由我们的合作伙伴 CCT Project 新开发) 正式发行。 • STBC1 (由我们的合作伙伴 MPI-MF 和 SGTE 新开发) 正式发行。 • 对一些商业数据库(例如 SLAG2、ION2、SSOL4、TCMP2、TCAQ2、AQS2、NSLD2、NOX2) 进一步修正 (绝大多数作为子版本)，并且当用户具有相同的主数据库 (例如从 SLAG2.0/SLAG2.1 到 SLAG2.2) 有效许可时，同样可以获得这些版本的更新；否则，只有在购买数据库更新的条件下，才能从某个旧主数据库 (例如从 	
--	--	--	--

		SLAG1.1 到 SLAG2.2) 升级到新的版本。 • 一些可被 TCCR/TCW4 软件使用的新的/升级的数据库即将发行。预知详情, 请参考即将推出的 Thermo-Calc 软件时事通讯。	
--	--	---	--

1.5 Thermo-Calc 软件包的总体结构

图 1-2.显示了 Thermo-Calc 软件包的总体结构

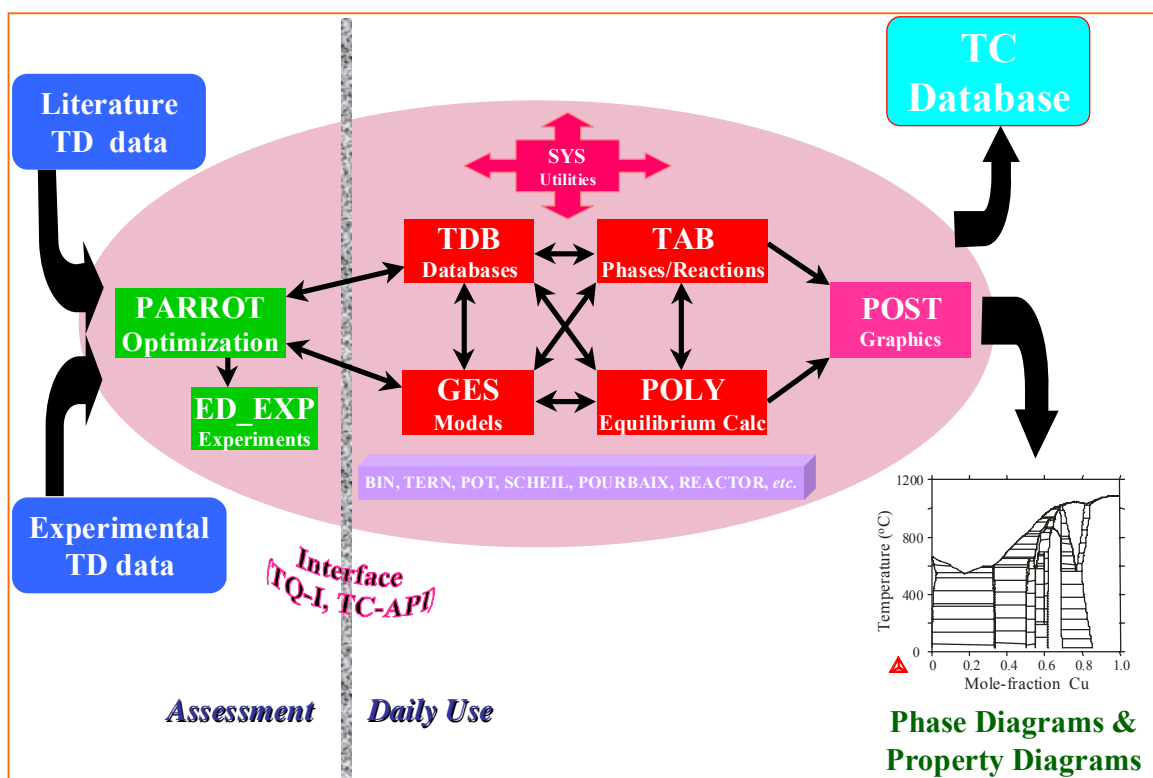


图 1-2. Thermo-Calc 软件包的总体结构

TCC (Thermo-Calc Classic) 软件由 7 个模块组成, 即:

- TDB 用于调用和管理数据库;
- GES 用于处理不同相的热力学模型和数据;
- TAB 用于将相和反应的热力学性质制表;
- POLY 用于多组元多相平衡步进/绘图计算;
- POST 用于各种相图和性质图的后处理;
- PARROT 用于数据评估中的参数优化; 和

- ED_EXP 用于实验数据的编辑和相平衡计算。

所有这些基本模块在热化学计算或模拟中通常都是必需的。并且，这些模块是内在相连的，但是不同的模块(例如: SYS, GES, POLY and PARROT)具有独立的工作空间。POST 模块通常被认为是 POLY 模块的子模块，而 ED_EXP 则是 PARROT 的子模块；直接通向这两个子模块的路径通常开始于各自 POLY 和 PARROT 模块；而且 POLY 与 POST 模块、PARROT 和 ED_EXP 模块的工作空间绝大部分是共享的（并非完全）。TAB 和 POST 模块直接同样具有连接。在 TCC 软件中，还有一些特别模块或被称作快捷使用模块（除了最后那个 REACTOR 模块），用于特别的计算和模拟，即：

- BIN 用于计算二元相图；
- TERN 用于计算三元相图；
- POT 用于计算氧位图；
- POURBAIX 用于计算区域优势图和性质图；
- SCHEIL 用于 Scheil-Gulliver 凝固模块；以及
- REACTOR 用于模块稳态反应。

这些特别模块经过特别设计可使用户无需直接面对基本模块 (除去 REACTOR 模块，其仍像基本模块一样具有相似的人机交互方式)；而只要回答一些简单的问题即可。软件/数据库系统可自动进行计算和模拟并将结果以高水准的图形方式展现出来。类似的用于特别用途的模块将不断的添加进 Thermo-Calc 软件包中。

TCC 软件总是先由 SYS 模块初始化，这个模块被设计用于每个计算机及其环境的设定 (即与不同操作系统间交互)。同时它也是一个转换到所有基本模块和特别模块的中转中心。

TCW (Thermo-Calc Windows) 软件具有不同的用户界面，但其内嵌的模块结构和 TCC 软件有诸多相似之处。如需了解 TCW 软件结构的详细内容，请参阅 TCW 用户指南和 TCW 范例手册。

除了 TCC and TCW 软件，两个名为 TQ 和 TCAPI 的编程接口可用于与 Thermo-Calc 引擎 (以及 DICTRA 扩展)和 Thermo-Calc (和 DICTRA) 数据库相连接。这些编程接口被设计用于用户编写的侧重应用的程序或第三方软件包，从而可以对其他类型材料的性质及加工过程进行计算和模拟。强大的 Thermo-Calc 引擎可以提供准确、可信并且快速的热力学计算。这些接口同时服务于一些第三方软件包 (例如 MATLAB® 软件中的 TC MATLAB Toolbox)中与 Thermo-Calc 软件/数据库相关并现存的工具箱，使之可在其它许多领域中进行热化学计算和模拟。

通过使用这些软件/数据库和编程接口，所有用户都可以在日常工作中进行热化学计算和模拟以及数据评估。强烈建议用户通过不同编程接口使用 Thermo-Calc 引擎 (以及 DICTRA 扩展) 在各类研发活动中构建各自的应用程序。

1.6 Thermo-Calc 软件包在不同硬件设备上的适用性

从 2000 年 5 月起，Thermo-Calc 软件被视为下述的两个独立版本：

Thermo-Calc Classic (TCC) --- 基于命令行的 Thermo-Calc 软件
Thermo-Calc Windows (TCW) --- 基于 Windows-图形用户界面 的 Thermo-Calc 软件

Thermo-Calc Classic 开发于 Thermo-Calc 历史的最早期，并在后续版本中仍继续保留。它包含的一些特性一直被许多用户（特别是那些以使用 TCC 多年的用户）所推崇。例如，MACRO-File-Open 特性使得用户只需对 MACRO 文件稍作修改即可完成类似的计算，而无需重复计算步骤，因此简化了日常工作。并且，通过交互地使用不同的模块和命令，用户可以在最大程度上学习软件的使用、探索处理复杂体系的可能性和更好的理解软件的工作原理。

完全图形界面驱动的 *Thermo-Calc Windows* 从 TCCN 开始独立于 TCC 存在。它的最新版本 TCW4 与 TCCR 完全兼容。它对于初学者和教学而言，大大地简化了热力学计算。TCW 用户可以在界面友好的 Windows 环境下直接进行计算。但是，用户可能需要更多的时间用来解读计算出的图形，这意味着简便易得 TCW 计算结果可能需要合理的理解和应用。

重要提示：本版本的 *Thermo-Calc* 手册不仅包括 TCCR 用户指南 和 TCCR 范例手册 同时含有与 Classic 版本相关的 Thermo-Calc 软件系统 和 Thermo-Calc 数据库指南（从本版本开始，它们特意从 TCCR 用户指南中分离出来；见 2.1 节）。Thermo-Calc Windows 版本拥有独立的手册，TCW4 用户同样被建议参看 Thermo-Calc 软件系统、Thermo-Calc 数据库指南 和 TCCR 用户指南的一些章节。

现行的 Thermo-Calc Classic (版本号 R) 适用于多种硬件设备(见 表 1-2)。

表 1-2. 适用于 Thermo-Calc Classic (版本号 R)的硬件设备

硬件		操作系统	版本	评注
PC		Windows	NT3/NT4/2000/XP	
			95/98/ME	有一些不便之处(见 <i>Thermo-Calc 技术信息</i> , No. 9812)
		Linux	2.2 或以上	
UNIX-平台	SPARC	SOLARIS	2.5 或以上	
	SGI	IRIX	5.3 或以上	

注: 从 TCCP 开始, 一些之前可用的 UNIX 平台 [如 SPARC (SunOS)、 HP (HPUX)、 DEC AXP (DEC Unix) 和 IBM RS6000 (AIX)]、 以及 Macintosh (PowerMac 和 iMac)将不再予以支持。

现有两个特别版本(在 PC Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下), 只适用于大学中教学和学术使用以及企业用户的测试和演示。它们是:

Thermo-Calc For Academic (TC4A) --- TCC (Thermo-Calc Classic)的演示版
Thermo-Calc For University (TC4U) --- TCW (Thermo-Calc Windows)的演示版

TC4A 和 TC4U 均可用于热力学和相图计算并可评估至多 3 个元素的体系(在 PC Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下)。它们对于无经费支持的大学教学和学术使用是免费的, 并且企业用户也可无偿的进行测试和演示; 但是, 它们绝对不能用于任何商业目的。捆绑的 **TC4A/TC4U 通用公共许可协议**约束了它们的使用。

所有由 Thermo-Calc Software (TCS) 及其遍布世界的代理提供的软件、 数据库和接口程序的安装均由一个非常友好的证书管理系统 (**FLEXlm® Software Licensing Management System**) 控制。它允许在单独的电脑和/或服务器上对用户指定的安装、更新和升级。预知详情, 请参看 2.2 节和有关的 **安装指南**。

表 1-3 使用 Thermo-Calc Classic 版本号 R 在不同硬件上对特定体系的基准计算。这些信息便于用户选择最适合自己的硬件装备。

表 1-3. 一个 Thermo-Calc Classic (版本号 R)的基准计算

在计算中同样体系的定义	使用 SSOL 数据库计算 Fe-Cr-C 体系垂直界面				
	参与的相: LIQUID FCC_A1 BCC_A2 GRAPHITE SIGMA CEMENTITE M23C6 M7C3 M3C2 条件: 1 atm, 13 weight percent Cr 计算范围: 0 to 2 weight percent C, 0.05 weight percent steps 800 to 2000 degrees Kelvin, 30 degrees Kelvin steps 初始点: 1200 degrees Kelvin, 1 weight percent C				
硬件	CPU	操作系统	版本	时间 (s)	编译器
PC INTEL	PII 266MHz	NT	4.0	9	VF5.0
PC INTEL	PII 400MHz	Linux	2.2.1	13	g77

PC INTEL	Pentium 266MHz	NT	4.0	16	VF5.0
SPARC	Ultra-1	SOLARIS	2.6	21	SC3.0
PC INTEL	PPro 200MHz	Linux	2.2.1	26	g77
SGI	Indy MIPS R4600	IRIX	5.3	29	g77
SGI	Indy MIPS R4600	IRIX	5.3	30	
PC INTEL	Pentium 166MHz	Linux	2.0.24	43	g77
SPARC	10	SOLARIS	2.5	70	SC3.0

当然, Thermo-Calc 与最近上市的这些处理器均兼容, 并且已经对计算方法, 算法和程序进行了改进以便减少计算复杂体系所需的时间。Thermo-Calc 用户因此建议参看包含计算基准的最新参考手册, 以便查找 Thermo-Calc 软件所支持的新硬件设备。

1.7 使用 Thermo-Calc 软件的益处

Thermo-Calc 是在计算热力学和动力学领域中最强大且灵活的软件/数据库/接口程序。它广泛适用于各种相平衡和多组元相图的热化学计算。适用于绝大多数的平台, Thermo-Calc 软件为您提供了基本的热力学需要, 如多组元体系中的平衡计算、相图和性质图以及热力学因子(驱动力)。

Thermo-Calc 包含广泛的模型, 可以计算包含热力学的复杂问题。

Thermo-Calc 由几个基本模块和特别模块组成, 用于相平衡计算、相图和性质图计算、热力学数据的制表、数据库管理、模型参数的评估、实验数据的处理以及高品质图形输出的后处理。

Thermo-Calc 促成了一个全面的数据银行的建立, 其包含不同体系中各相经过评估的热化学数据。它同时使用许多涵盖广泛工业材料和应用的大型数据库。

Thermo-Calc 允许用户通过严格评估不同实验数据迅速建立起可信的自有数据库。

Thermo-Calc 使用了一套非常灵活的用户界面(TCC, Thermo-Calc Classic)。并且, 完全图形界面驱动版本, 即 TCW (Thermo-Calc Windows)已被开发。而其生成的结果适用于高品质的文档。

Thermo-Calc 所提供的热力学计算引擎拥有最快速和最稳定的数学及热力学解。其它任何需要精确热化学量的程序(用户自编程序或第三方软件包)可以便捷地与 Thermo-Calc 引擎(以及 DICTRA 扩展)相连接。它现在拥有两个强大的应用编程接口(即 TQ and TCAPI) 和一个在 MATLAB®软件中综合的热力学计算工具(即 TC MATLAB Toolbox)。

它适用于绝大多数现代计算机平台, 并允许在单独的电脑和/或服务服务器上进行用户指定的安装、更新和升级。同时, 它与一个非常友好的许可证书管理系统(即 FLEXlm® License Manager)相连接。

Thermo-Calc 的优势是它的多重应用性。同一公司、研究所和大学中的几个部门可以使用该软件用于不同的目的。以证实的工业应用例子包括通讯、航天、输运和制造。在 Thermo-Calc Software (TCS)的帮助下, 用户可以优化材料加工过程并以更低的成本得到更高的产量和更好的产品。

如需了解 Thermo-Calc 全部功能和应用列表, 请参看说明文当 Thermo-Calc 软件系统。

2. 如何成为一位 Thermo-Calc 专家

Thermo-Calc Software AB 公司非常乐意和它的合作者就 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件家族中各种软件/数据库/界面产品的应用和改进进行各种交流。这些交流包括成功实例，出版物，问题报导，意见及改进建议。所有的有用信息将有助于我们对软件/数据库/界面产品和服务进行更新和改进。

此外，公司会向用户提供技术支持和顾问服务，以便帮助用户成为 Thermo-Calc 和 DICTRA 的专家。

这一部分就如何高效地利用 Thermo-Calc 给出了一些提示，包括：

- ◆ 如何轻而易举地运用 Thermo-Calc 手册系列：TCCR 用户指南，TCCR 实例，Thermo-Calc 软件系统以及 Thermo-Calc 数据库指南（后两者在 TCCR 版本中已经与用户指南分开）；
- ◆ 如何恰当的安装和维护 Thermo-Calc 软件/数据库/用户界面包；
- ◆ 如何在你的研发中，高效地使用 Thermo-Calc 软件/数据库/用户界面包；
- ◆ 如何迅速地从 Thermo-Calc 软件公司及其合作者那里获得各种支持和顾问服务；
- ◆ 如何建设性地帮助 Thermo-Calc 软件公司进一步改进其各种软件/数据库/用户界面等产品。

2.1 怎样应用这本用户指南

这本 TCCR 用户指南是 TCC 手册系列中的第一部分，推荐结合 TCC 手册的第二部分——TCCR 实例——一块使用。当前的修订版手册主要针对 2006 年 5 月推出的 R 版软件。

重要提示：随着新版本的不断推出，TCC 用户指南的内容变得越来越多，给维护和阅读带来不便。而且，某些章节的内容与软件的版本无关，且同样适用于其它软件（如 TCW 和 DICTRA）以及一些应用程序界面（如 TQ, TCAPI 以及 TC MATLAB 工具箱）。因此，从这一版本（TCCR）开始，我们把这些章节从 TCC 用户指南的相关章节中独立出来，分别用五个独立的文档说明。为了便于用户参考前面的版本，在这一版本的结构上，我们仍保留了这五个章节，只是用一个页面给出很简要介绍。

下面是对这五个独立章节（及他们在 TCC 用户指南原始结构中与其他章节的关系）进行的简单描述：

 **TCCR 用户指南:** (本文档)

 **Thermo-Calc 软件系统:** (提取自 TCC 用户指南第 3 章)

本章节对整个 Thermo-Calc 软件包/数据库/界面进行了总体概括。类似于一本详细的参考书目，本章详细阐述了基本概念/术语、热力学框架、未来发展策略、现有功能及可能应用等等。阅读这一章节将帮助用户获得关于软件包的整体印象。尤其当用户寻找常用术语来描述一个特殊模型、数据库或模块相互作用时，本章内容特别有用。另外，当用户阅读 TCC, TCW, DICTRA 软件以及 TQ, TCAPI, TCMATLAB 工具箱程序界面手册的其他部分时，本章可以作为一个交叉的参考书目。

Thermo-Calc 数据库指南: (提取自 TCC 用户指南的第 4 章和第 6 章)

这一章给出了一个可用于 Thermo-Calc 软件 (TCC 和 TCW)、DICTRA 软件以及各种应用程序界面的所有可用 Thermo-Calc 数据库的总体描述。这也有助于用户决定在其研发项目中是否需要进一步掌握其他数据库,规划自己数据库的开发。在这一章内容的指导下,用户也可以找到关于 Thermo-Calc 数据库和 DICTRA 数据库扩展名的数据结构和格式的各种详细资料。

DATAPLOT 用户指南和实例: (提取自 TCC 用户指南的第 15 章)

这一部分介绍 Thermo-Calc(TCC/TCW)以及 DICTRA 软件如何运用一个名为 DATAPLOT 绘图代码(由 KTH 的 MSE 部门开发)的特殊数据处理代码工具在后处理器中绘图。TCC 和 DICTRA 中的 POST 模块与 TCW 中的图表定义下拉窗口就是用这种代码同各种计算/模拟模块进行信息传递。这个文档详细说明了如何安排各种绘图设置以及如何处理各种类型的计算和模拟结果。当施加一套 DATAPLOT 语句之后,我们将获得一副非常专业的 TCC/TCW/DICTRA 图表曲线。这一章同时给出了一些有关 DATAPLOT 文件的例子和附录代码。

Thermo-Calc 参考目录: (提取自 TCC 用户指南的第 16 章)

该部分列出了关于 Thermo-Calc 软件、数据库、程序界面以及应用的一些参考文献,用户可以在当地图书馆或者因特网上找到这些参考目录。另外,我们鼓励用户向我们提供自己的各种成功应用的发表物和稿件,以便我们将这些列入以后版本的 Thermo-Calc 参考目录中。如果许多用户将他们的研究论文和技术报告贡献给 Thermo-Calc 软件公司,我们也可以汇编成一本 Thermo-Calc 参考书并编入以后的手册中。

这册 *TCCR 用户指南* 的排版格式是章一节一小节,共分 17 章(顺序同 TCCQ/TCCP 用户指南)。然而,如上所述,本指南的四章已经提出作为四个独立的部分,同时,每章用一个单独的页面来保持他们独立的结构。其中,前 4 章(其中两章独立详细介绍)总体介绍了 Thermo-Calc 软件、数据库、界面包,详细描述了现有数据库。接下来的 11 章(其中两章独立详细介绍)主要介绍各个 Thermo-Calc 模块和属性,最后的两章(其中一章独立介绍)提供了一些主要参考文献、实用的附录以及帮助的索引。为了用户的方便,每一个对于模型/数据处理、计算/模拟以及结果显示的特殊模块都以该模块中的所有执行命令开始描述。

不熟悉 Thermo-Calc 的用户应该从本章和 Thermo-Calc 软件系统 文档着手。已经取得一些经验的用户可以直接从一个特殊模块(即,第 5—14 章和 DATAPLOT 指南)开始。为了跟踪更新信息,我们同样推荐阅读第 1—2 章, Thermo-Calc 软件系统 以及 Thermo-Calc 数据库指南。

第 1 章大体介绍了 Thermo-Calc 软件/数据库/界面包的发展史,基本结构和用途。同时给出几个简单的例子,应用户需求给出相应的建议,并提供了有益于用户研发的意见。

第 2 章(本章)在一般意义上介绍了如何应用数据包,如何成为 Thermo-Calc 专家从数据包中获得最大受益以及如何同 Thermo-Calc 软件公司及其合作者进行交流。

第 3 章(对 Thermo-Calc 软件/数据库/界面包的概要描述)从本版本开始已经从 Thermo-Calc 用户指南中独立出来编入 Thermo-Calc 软件系统 中。

第 4 章(对所有可同 TCC/TCW/DICTRA 软件以及各种应用程序界面一起使用的各种 Thermo-Calc 数据库的完整描述)从本版本开始已经从 Thermo-Calc 用户指南中独立出来并作为一章编入 Thermo-Calc 数据库指南 中。

第 5 到 14 章(其中第 6、15 章除外, 从本版本开始已经独立出来。第 6 章编入 Thermo-Calc 数据库指南, 第 15 章编入 DATAPLO 用户指南和实例) 广泛地收录了各种 Thermo-Calc 模块和相关的属性。用户根据需要可以选择所需的章节。这些章节是按照其使用顺序排版的。一般而言, 模块首先是用于不同计算, 而后才是理解。Thermo-Calc 古典包中, 每一个模块中所有的可用命令都有详细解释。在大多数情况下, 我们用例子解释为什么用到这个命令, 这个命令是如何执行的。类似于所有模块, 首先编排的是重要的和常用的命令, 而后是其他的命令。

第 5 章描述了怎样应用 TDB 模块来选择/添加数据库, 获得所选数据库信息, 定义/丢弃/恢复系统(元素, 物质, 相以及相组成), 重新找回数据库中数据等的指南方针。

第 6 章(指向数据库管理者或者想要创建一个用户指定的数据库、数据或者数据文件的熟练用户; 包括一些管理 Thermo-Calc 数据库的典型实例以及一些 DICTRA 迁移率数据库的拓展) 从本版本开始已经从 TCC 用户指南中独立出来并编入 Thermo-Calc 数据库指南中。

第 7 章陈述了如何应用 TAB 模块把各类物质(线性化合物或者固溶度相)或者化学反应的各种热力学性质列表并绘图。

第 8 章描述了最重要的模块-平衡计算模块(POLY)。该模块用于多组元体系各种平衡的复杂热力学计算。在计算中, 对平衡中的一点点的计算, 需进行一个特殊的选择, 即在一维上(选择 STEP)还是在二维上(选择 MAP)。在本章中, 更多有关定义各种热力学体系的信息以及在热力学平衡计算或优化中出现的问题将在讨论各种 POLY 命令之前给出。一些特殊的例子将告诉用户怎样对某些复杂相或者复杂现象(例如有序/无序转变, 水溶相)进行各种计算。这一章还对一些出现在平衡和相图计算中的常见问题采用问答的方式给出了一些有用的提示。

第 9 章介绍了 POLY 模块之后的后置处理程序模块(POST)。这个模块以高度专业的绘图标准便利地显示成功的计算结果。本章举例说明了怎样简单、有效地从各种计算中绘制相图和其他的性能曲线。并举例说明了产生 vrm1(实体模块代码)文件、应用一个可从网络浏览器中免费得到的插件绘制 3D 图的步骤。

第 10 章(一些特殊模块)介绍了一些计算、绘图的简便方法。这些模块简化了某些类型计算和相图以及/或者性能曲线的绘图。在这些容易使用的模块帮助下, 用户仅需回答出现在自动计算或绘图程序中的几个简单问题即可。这几个特殊的模块是: 计算二元相图的 BIN 模块, 计算三元相图的 TERN 模块, 计算势图的 POT 模块, 模拟凝固的 SCHEIL 模块, 计算 Pourbaix 图和性能图的 POURBAIX 模块, 以及模拟稳态反应的 REACTOR 模块。这些特殊的模块在最近的 Thermo-Calc 软件包中已经出现, 并且将会变得越来越规范。

第 11 章(吉布斯自由能模块 GES)对所有已经执行的热力学模块提供了相当全面的描述。在一个较宽的物理-化学条件下将各种相导入 Thermo-Calc 软件/数据库/界面包的可靠热力学模型的执行是很重要的一步。只有做好了这一步, 我们才能成功地计算或模拟实际存在的复杂体系或问题。另外, 这一章还从数据结构, 热力学量计算以及模块的应用界面介绍了这些模块如何组成了 Thermo-Calc 软件的核心。从 GES 模块中, 我们可以获得的信息有: 相组成, 热力学性质, 定义的符号, 模型选择等等。也有关于作用于模型, 访问数据的各种命令的广泛描述。

第 12 章介绍了优化模块 (PARROT)。具体介绍了 PARROT 模块的强大的评估特征, 并给出了许多有用的提示。具有用各种模块处理数据, 平衡和相图计算, 绘图的丰富经验, 用户可用这一模块来进行数据评估从而改善现有的数据库或者用户化的数据或数据文件。内容上, 本章首先介绍了怎样准备一个实验数据文件 (POP), 怎样创建一个图解实验数据文件 (EXP), 怎样产生一个系统设置文件 (SETUP) 以及怎样保存和交互式访问一个优化文件 (PARROT)。然后, 给出了一些例子用于说明用命令、特殊模型、处理优化的各种步骤。其中有关 ED_EXP 模块 (作为 PARROT 的一个命令) 的信息将在 13 章中详细介绍。接下来介绍了 PARROT 模块和其他模块 (例如, GES, TES, POLY 以及 POST) 的必要联系, 以及该模块在 DICTRA 软件、TQ 和 TCAPI 应用程序界面、TCW 绘图用户界面以及 TC_MATLAB 界面中的有效性。

第 13 章介绍了实验编辑模块 (ED-EXP)。该模块介绍了为获得一个好的优化, 如何用一种适当的方式编辑实验数据点。内容涉及: 组织数据块, 设立相关权重, 实验点的包含和剔除, 设定选择条件等方面。这个模块主要与 PARROT 和 POLY 模块有联系, 因此包含了一些等同的基本命令 (必要时见第 8 章和 12 章)。

第 14 章 (系统应用模块, SYS) 讨论了配置操作系统 (O/S) 的一些检修问题。这些问题取决于错误信息导出和绘图环境单元的参数。另外, 本章还详细解释了怎样创建, 修正和维护一个 MACRO 文件。一些独特的附加工具, 例如补丁/痕迹/中止系统调试, HP-计算器等也有相应解释。

第 15 章 (对数据处理特殊代码工具 (DATAPLOT 绘图语言) 的描述。该代码用于 TCC/TCW/DICTRA 软件的绘图显示) 从本版本开始已经独立出来并编入 DATAPLOT 用户指南和例子。

第 16 章 (一些有关 Thermo-Calc 软件, 数据库, 程序界面和应用的重要的参考目录) 从本版本开始已经独立出来并编入 Thermo-Calc 参考文献目录。

第 17 章介绍了一些有用索引的附录, 包括在各式计算机平台安装 Thermo-Calc 产品包的指南, 各种 Thermo-Calc 文件类型及其相关性的总体看法以及一个 Thermo-Calc 产品快捷参考卡。另外, 本章对所有 TCC 命令从参考目录到各种模块和位置作了索引。在章末同样列出了图片和表格的索引。

最后, 请注意一些之前可用但是并不常见或者有用的特征或命令可能不能再使用; 因此这些命令将不再纳入目前的手册当中。另外, 某些已经执行但没有进一步测试或完全释放的模型和数据库, 将在本手册中描述。这些附加的特点可能没有完全在发布的版本中体现。例如, 聚合体的 Flory-Huggin 模型是可用的但是没有数据库在产品包中提供。在这种情况下, 请耐心地等待目前版本的补丁发布 (执行表将在 Thermo-Calc 软件公司网站上出现, 用户可以凭借有效的通行证进行下载), 或者下一版本预发布补丁 (仅面向特殊要求)。

2.2 怎样安装和维护 Thermo-Calc 包

2.2.1 许可证要求

以前,安装 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件/数据库/界面包是基于一个双边签署的许可证协议,来预防软件包的非法拷贝和使用。2000 年 6 月版(TCCN, TCW1, DICTRA21, TQ3, TCAPI11 和 TC MATLAB 工具箱),开始使用著名的 FLEXLM 软件许可证管理系统。这也意味着了应用 TCS 提供的软件、数据库和程序界面的许可证协议通常不需要签名,但是用户安装时必须同意 Thermo-Calc 软件终端用户许可证协议(EULA),必须迅速的向 Thermo-Calc 公司提供指定硬件的恰当的充足信息,以及安装包将被安装和使用的指定网点的清晰的本地定义。这同样适用于 TCCR, TCW4, DICTRA24, TQ6, TCAPI4, 和 TC MATLAB 工具箱以及 Thermo-Calc 公司直接发行的一些商用数据库。

发行时通常是先提供一个临时的面向所有购买软件 / 数据库 / 界面条款初始安装的 FLEXLM 许可证文件,这个文件通常可在出货后几周有效;依据指定硬件以及指定站点的本地设置(也就是说,一台计算机的区别号(即 HOSTID)只能完成一单台计算机的许可/安装,一个联合的服务器名称,服务器主机和 IP 域名地址排列成的一个单一浮动或站点许可证 / 安装)的 FLIXLM 的许可证信息收据, Thermo-Calc 公司即刻将发给用户一个修改的 FLEXLM 许可证钥匙文件(永久性还是周期性使用,取决于许可证的有效性及其维护签署文件的有效性)。如果一个用户对于一个特殊的软件 / 数据库 / 界面包拥有维护权,那么, Thermo-Calc 公司会向该用户传送一个新的主版本释放跟一个新的永久 / 周期性 FLEXLM 许可证钥匙文件。

在大多数情况下, FLEXLM 许可证管理器仅仅是被 TCC/TCW/DICTRA 软件, TQ/TCAPI 程序界面和 TC MATLAB 工具箱检测的一个许可证钥匙文件(具有所有购买的软件 / 数据库 / 界面包的许可证信息)。这相当于当安装或应用 MISCRESS™ 或者 PrecipCalc 软件时,无论 TQ 还是 TCAPI 程序界面,均是一个完整的一部分。如果存在一个 Single_Floating 或者站点的许可证/安装, FLEXLM 许可证管理器必须要安装在指定的服务器上。然而,如果一个协会在具有相同或不同 CPU 类型的不同的计算机/服务器上安装同一个 LFLEXLM 许可证管理器,那么,每一次安装必须是同一个文件。

具有有效软件维护合同的用户当接收到一个新版本时,也必须安装这个 FLEXLM 许可证管理器。面向当前最新版的 TCC/TCW/DICTRA 软件以及 TQ/TCAPI/工具箱程序界面的 FLEXLM 许可证文件也同样适用于这些软件或程序界面对应的老版本(例如,一个 TCCR 许可特征同样适用于 TCCN/TCCP/TCCQ),但是,反之绝对不能适用。然而,一个特殊数据库的许可特征取决于数据库的版本号,不能在不同版本号的数据库中使用(例如:TCFE4,TCFE3,TCFE2,FEDAT 以及 TCFE1 数据库的许可特征相互之间完全不同)。

FLEXLM 许可管理器可以处理各种硬件,即, PC Microsoft Windows NT/2000/XP 或者 Windows 95/98/ME, PCLinux, SUN Solaris, SGI 等等,但每一个 CPU 类型需求一个独立的许可。

为了使 TCC/TCW/DICTRA 软件和数据库以及 TQ 程序界面的安装可以一步同时安装,这些软件 / 数据库 / 程序一般是绑在一起,以 TCS 标准产品 CD 的形式发布。但是,这些产品(特别是 TQ 程序界面)也可分别安装。另外购买的数据库是用另外一张可以自动安装的 CD(有时候,对某些特殊的安装,会有一个详细的安装向导,详见 2.2.2.2 节)。TCAPI 程序界面以及 TC MATLAB

工具箱的安装也是独立的，因此 CD 也是独立的。请注意，一个程序界面通常不必要安装在与 TCC/TCW/DICTRA 软件/数据库包相同的目录下，用户可以在自己的安装程序中自行定义安装途径。对于安装和使用程序界面的细节，请参考程序指南和实例 Programming Guide and Examples。

请注意 TCS 提供的所有手册（User's Guider, Examples Books 以及 ReferenceBook）和技术信息单（更新的软件/界面发展，特殊数据库应用）的版权也是同 Thermo-Calc 软件终端用户许可协议 (EULA) 的一般设置绑定在一起的。因此，任何拥有这些版权的用户禁止违反普通许可协议和 FLEXLM 软件许可管理系统中规定的条款。

2.2.2 安装步骤

根据收到的 Tcc/TCS/Dictra 软件 / 数据库以及 TQ 程序界面包（或类似的，TCAPI 程序界面 / TC MATLAB 工具箱或特殊数据库）的“TCS Standard Product CD”（或者安装磁带或软盘）用户可以根据安装向导安装产品。安装向导会在你的硬盘上产生一系列目录，并扩展一些必要的文件在目录中。按照下面简述的程序和“TCS 软件安装向导”中的细节，用户可以轻易、恰当地完成 TCC/TCW/Dictra 软件，Thermo-Calc/Dictra 数据库和程序界面的整个安装程序到用户指定的计算机和服务器中。

对于个人计算机 Windows NT/2000/XP 或者 Windows 95/98.ME, 在插入 CD 到 CD 驱动器（或打开 Install.exe 程序）后，安装向导会自动启动安装。

为了在你的硬件系统上找到 FLEXLM 许可信息（即，唯一的 HOSTID 的辨别号码），在安装过程中有一个附加的单独程序，需要用户在 UNIX/Linux 上运行或者自行在个人计算机 Windows NT/2000/XP 或者 Windows 95/98.ME 上切换。对于指定计算机或指定服务器的 FLEXLM 许可信息（对于后者，必须另外包含服务器名称和指定客户机的域名地址范围），用户必须反馈给我们的公司，我们将通过邮局或电子邮箱的方式向你提供一份恰当的 FLEXLM 许可钥匙文件（可以是临时的或永久的或年度的）。

独立计算机或服务器的 FLEXLM 许可信息也可以用一个 LMHOSTID 程序或相关的支持工具（这些工具是固定安装软件包和许可证过程出现的问题）在安装程序包以前找到。这些程序和工具可以从我们的网站（www.thermocalc.com/Download/License_and_support_tools.html 对个人计算机安装 / 许可，对于服务器安装 / 许可，网址为：www.thermocalc.com/Download/License_server_files.html）上获得。

从我们的公司，用户可以跟安装程序一起或稍后获得一个临时的 FLEXLM 许可钥匙文件，这个文件允许用户在某一时间段（一般为几周）内应用 TCS 提供的软件 / 数据库 / 界面程序包。在从 TCS 公司获得永久或周年的 FLEXLM 许可钥匙文件后，你才可以永久或者一年内在制定的计算机和服务器上运行软件包。

2.2.2.1 安装整个的 TCC 软件包 / 数据包

“TCS 软件安装向导”给出了个人计算机 Windowa NT/2000/XP, Windows 95/98/ME, 以及 UNIX 平台（Solaris, SGI, PC Linux, 等等）下，安装 TCC/TCW/Dictra 软件 / 数据库 / 界面包（从一张 TCS 标准产品 C D 或类似媒介中）的安装向导。在公司发布的 CD-ROM（或磁带，磁盘）中，大多数文件是压缩的，不能够直接拷贝。安装程序会自动产生一系列目录到你的硬件中，并扩展一些必须的文件到这些目录中。

在 Windowa NT/2000/XP, Windows 95/98/ME 环境下，TCW 安装共享大多数 TCC 目录文件结构（特别是对于数据库亚文件目录和文件）还是拥有各自的文件目录结构，取决于用户在安装程序中的选择。

类似地, Dictra 在 Windowa NT/2000/XP, Windows 95/98/ME 环境下的安装也共享某些 TCC 安装目录结构(例如, Dictra21 同 TCCN, Dictra22 同 TCCP, Dictra23 同 TCCQ, Dictra24 同 TCCR)。因此, 安装程序会自动地在同一个 \数据\区分配 Dictra 执行程序、readme/license 文件以及图标文件, 在 \帮助\区插入帮助文件, 产生所有 Dictra 标准例子的 \DIC_EXA\ 文件目录及次文件目录。

成功安装后, 用户可以依据自己的喜好来修改某些文本文档, 检查附上的标准文件。有时候, 用户(作为管理员或本地权限用户)可以进一步修改安装的环境参数; TCPATH 在 Windowa NT/2000/XP, Windows 95/98/ME (在“注册编辑”或“系统属性”窗口); TC-DATA, TC_TDBHLP, TC_GESHLP, TC_POLYHLP, 等等在 Linux, UNIX 平台。

对于所有的安装和修正细节, 请参考相关的安装向导。

2.2.2.2 在一个已经安装的 TCC 包中添加数据库

在用户在计算机或服务器(具有某一 CPU 类型)上成功安装 TCC/TCW/Dictra 软件 / 数据库 / 界面后, 需要添加自己制作的或者从 TCS 及其代理商处购买的数据库。如果这个数据库是从 TCS 购买的, 那么此数据库通常(但非一定)刻在一张具有安装向导的 CD 上, 用户可以自动的安装到已经安装的数据库中。

如果一个用户定义的数据库需要手动添加, 那么有三个步骤:

1) 检查该附加的数据库(以恰当的文档格式)必须跟已经安装的数据库(特别是发表的数据库, 例如 PBIN, PTERN, PFIRB 等等)具有相同的数据格式。

2) 给这个添加的数据库产生一个次文件目录, 例如 Windowa NT/2000/XP, Windows 95/98/ME 下, 在 DATA 目录下的 TCADD 或 MYOWN 或者各种 UNIX 平台(Solaris, SGI, PC Linux 等等)下, 在 data 目录下的 tcadd 或 myown。然后简单拷贝所有的数据库文件到这个次目录中。一个添加的数据库可以含有一个文件(即, setup 文件)或者多个独立的文件, 但 setup 文件必须含有类型定义及内部相关文件的正确的路径(例如, 参数文件、函数文件、FTP 函数随即文件、参考文件等等)。详见 Thermo-Calc 数据库文件的数据库管理器向导部分。

3) 修改数据库初始文件, 即 Windowa NT/2000/XP, Windows 95/98/ME 下, 在 DATA 目录下得 TC_INITD 文件, 或者各种 UNIX 平台(Solaris, SGI, PC Linux 等等)下, data 目录下的 initd.tdb 文件。关于数据库初始化文件怎样建立的细节, 请参考 Thermo-Calc 数据库向导文档的数据库管理器向导部分的 3.2 节。对于每一个添加的数据库, 我们推荐定义一个简短的名称, 给出其安装路径, 并在 Windowa NT/2000/XP, Windows 95/98/ME 系统写用一行写一个简短的描述。例如:

```
TCADD TCPATH\DATA\TCADD\ADDSETUP.TDB TCS Additional Database !
```

```
MYON TCPATH\DATA\MYOWN\OWNSETUP.TDB My Own Additional Database !
```

如果, 一个 TCADD 数据库以加密的形式提供, 对应的行应该为:

```
TCADD TCPATH\DATA\TCADD\ADDSETUP.TDC TCS Additional Database !
```

对于各种 UNIX/Linux 平台, 应该另外添加一行, 如:

```
tcadd TC_DATA/tcadd/addsetup.tdb
```

```
TCS Additional Database !
```

```
Myown TC_DATA/myown/ownsetup.tdb
```

```
My Own Additional Database !
```

如果, 一个 TCADD 数据库以加密的形式被提供, 对应的行为:

```
tcadd TC_DATA/tcadd/addsetup.tdc
```

```
TCS Additional Database !
```

2.2.3 维护当前和以前的版本

Thermo-Calc(TCC/TCW)和 Dictra 软件/数据库包的安装和运行一般对版本很敏感;Dictra 软件/数据库包共享 TCC/TCW 软件/数据库包相同的版本结构。不同版本的软件包可能具有不同文件目录结构和文件内容。然而,后面版本的自动安装程序将用同样的之前版本的上一级文件夹结构,但是有一个不同版本等级(例如对于 TCCR/TCW4 及 Dictra24 的 VERR 或 verr),和版本等级下的所有的子目录。

在 Windows NT/2000/XP, Windows 95/98/ME 环境下, TCC 安装程序也可以自动的产生一个类似同版本的\WORK\文件夹,通常会在显示屏上产生一个 TCC 快捷键图表(指向工作区)。然后,通过点击这个图表, TCC(TCW 或者 Dictra)将被初始化,所有的输入文件(除了数据库文件)将从这个工作文件读出,所有的输出文件将被保存在这个工作文件中。用户可以将这个文件夹重新命名,例如, \WORK\为了区分的输入输出文件跟一个确定的 VERR 一同应用。用户也可以拷贝这个快捷图表到另外一个(或产生一个新的 TCC/TCW/Dictra 可执行文件的快捷键)具有不同启动路径的快捷键窗口,在这个快捷键窗口,用户可以产生或保存各种关于特定目的或研究项目的输入或输出文件。当然,最简易的方式是在一个已经存在的快捷图表上简单的修改启动路径。通过这种方式,用户可以在不同的工作目录,不同的驱动器上,或者在一个连接的服务器上分配各种二元和文本文档(详见 Thermo-Calc 软件系统的 4.4 节)。

在各种 UNIX 平台(例如 Solaris,SGL,PC Linux 等等)下, TCC/Dictra 恰当的安装允许所有在指定的站点(组)的制定用户在制定计算机/服务器的某一目录下启动 TCC/DICTRA 软件。如果存在任何有关此类问题,请联系当地计算机系统管理员。

另外,不同版本的 TCC/TCW/Dictra 软件/数据库包对于某些二元数据类型(如*.GES,*.POLY3 或者*.PAR 文件)可以有少量不同的数据结构;然而,文本数据类型(如*.TCM,*.LOG,*.TDB,*.DAT,*.TXT,*.SETUP,*.POP 或者*.EXP 文件)通常保持相同或者相似(关于这些文件类型的意义,请参见相关章节和附录 B)。这表明:

(1) 用以前版本保存的二元数据文件可能不会被后面的版本接受,但是一个新版本有时候能够读取一个由老版本产生的二元文件。

(2) 由一个以前版本产生的文本文件通常可以被后面的版本接受,一般反之亦可(除了那些后面添加或者作了较大修改规定而保存在这样的文本文件中的 GES/POLY/POST/PARROT/ED_EXP 命令)。这也是我们为什么极力推荐用户尽可能的保存那些重要的计算为文本文档(*.TCM,*.TDB,*.TXT,*.SETUP,*.POP 以及*.EXP)而不是二元文件的原因。目的即,在以后的版本中重复以前的计算,并且有时候在多种版本之间作一些比较。

(3) 默认的输出文本文件(如*.DAT,*.TXT 或*.TAB)和绘图文件(如 EMF,PNG,BMP,PDF,JPEG,TIFF,PostScript-PS5/6,HPGL-P7/8 等)与版本无关,且只可在软件包之外,用恰当的文本编辑器,文字处理和绘图编辑工具随时打开。

2.2.4 使 TCC 运行更为便捷

在 Windows NT/2000/XP, Windows 95/98/ME 环境下,可创建几个 TCC(TCW,DICTRA)快捷图标(对应不同的软件版本,区别某些系统和工程)。这些图标的属性可通过点击右键,选择“属性”选项而很容易的修改。

对于各种版本的 TCC/TCW/DICTRA 软件,可在目标区点击执行程序的属性对话框快捷键;如上所述,对于不同的区别某一系统/属性的目的,用户可以在开始菜单上确定工作区。

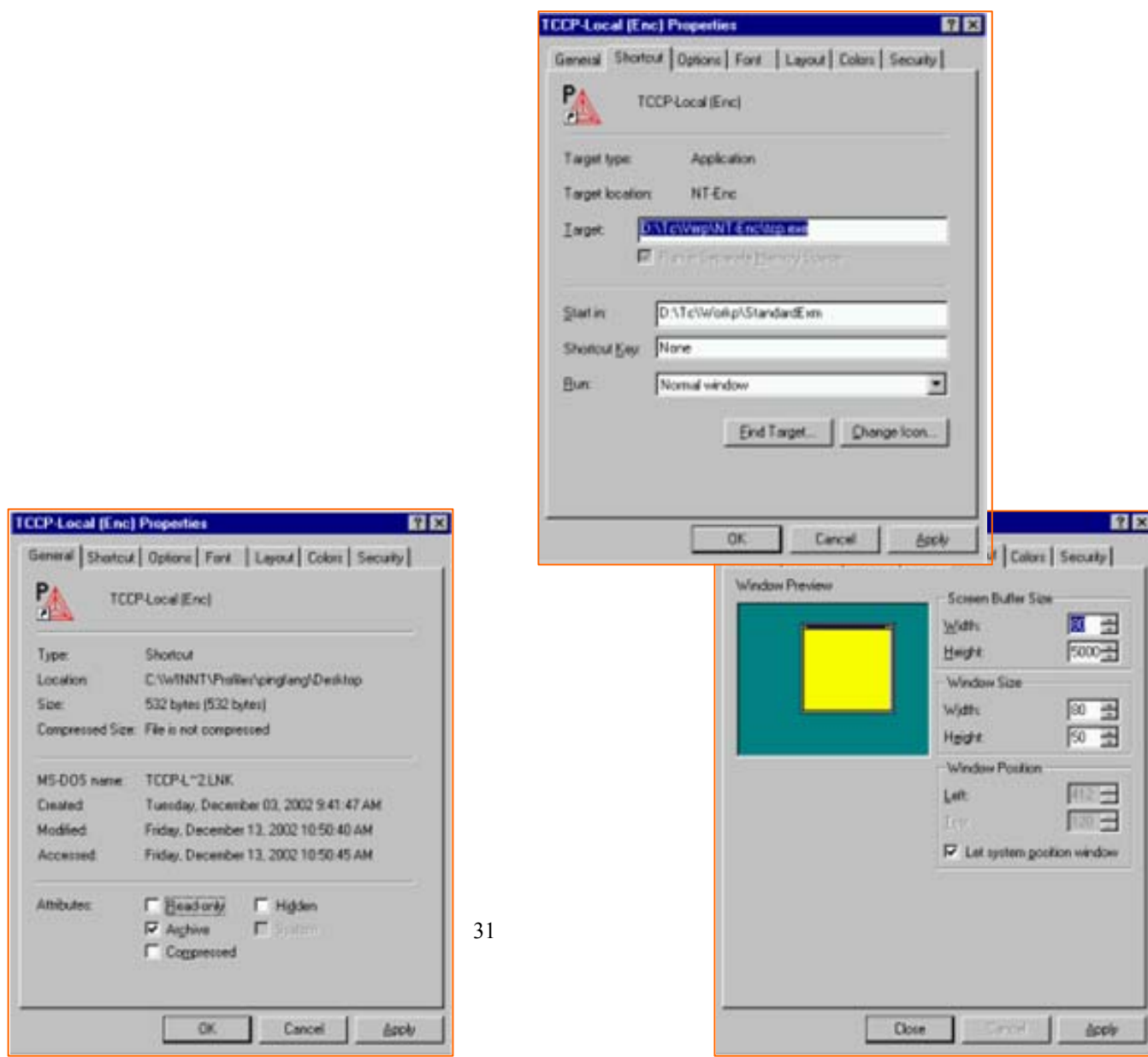
为了使 TCC/DICTRA 方便用户的使用，可以在 Windows NT/2000/XP 运行环境下，对图标的属性（如图 2.1 所示）进一步修改“选项”（指针大小，显示窗口大小，缓冲器大小，键入命令的缓冲数，以及快速编辑和插入模式），“字体”（字体类型和字体大小）“颜色”（屏幕和 popup 窗口的文本和背景颜色类型和数量）。

在各种 UNIX 平台（Solaris, SGI, PC Linux 等等）下，你的本地系统管理员将会告诉你怎样设置更优越的工作环境，以及怎样使 TCC 和 DICTRA 方便你的工作。

然而，你也可以用一个适合的 Tektronix-window 程序安装，从一个基于 Windows 的计算机访问一个 TCC 或者 DICTRA 的 Linux/UNIX 版本。

例如，从 Windows NT/2000/XP 上用一个 TeraTerm 程序登陆到一个 Linux/UNIX 服务器上，并运行 TCC 或 DICTRA 软件/数据库包，如图 2.2 所示。我们首先推荐修改 TerTerm 窗口的外观的某些设置，改变一些“设置”选项，例如，终端（终端大小，自动 VT<->TEK 开关），窗口（卷轴缓冲器线和文本/背景颜色）字体等，并保存设置为以后应用。

除绘图之外的所有的任务工作完善。产生计算图表的绘图文件也工作满意。如果想在屏幕上绘图，可以在执行任何的 TCC/DICTRA 命令前用设备号码 1（对于 Tektronix 4010）来使用 SYS 命令 SET_PLOT_ENVIRONMENT，也可以在键入 POLY_DIAGRAMM 命令前（接下来接受 SCREE 为 PLOTFILE）用设备码 1 使用 POST 命令 SET_PLOT_FORMAT 命令。也推荐在 PLOT 命令之前应用“Control”命令的 Open TEK 选项。请注意，当在 TEK 亚窗口绘图时，你可以在亚窗口拷贝/粘贴并打印内容，接着在主 Tera Term 窗口的任何的 TCC 行动之前在 TEK 亚窗口进行编辑。



Thermo-Calc 用户指导书

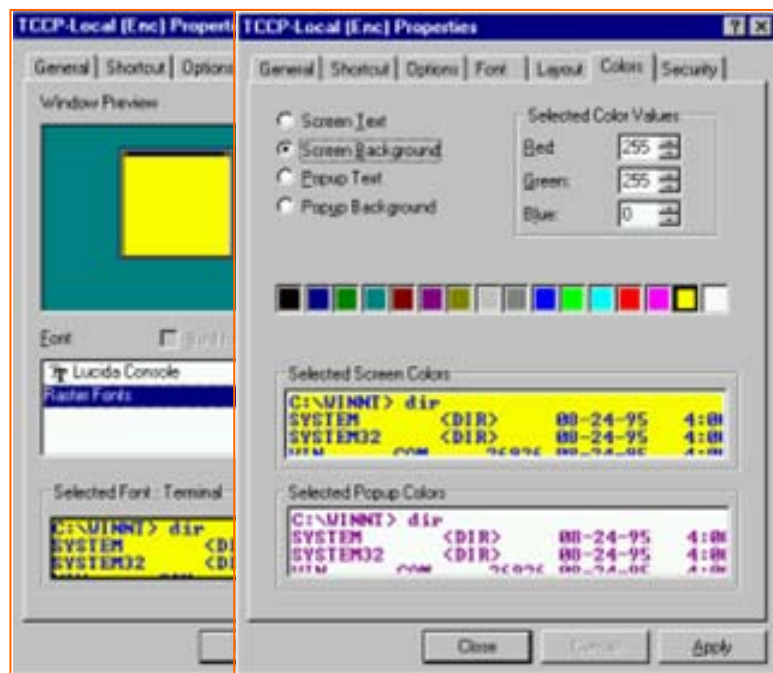
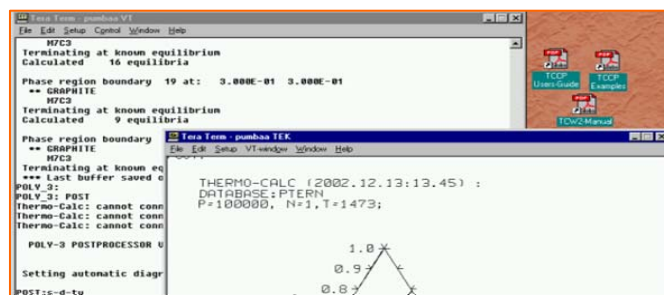


图 2-1. 修改你的 TCC 快捷方式 (用推荐值)



**图 2-2. 在 TeraTerm 对话框运行 TCC 的 Linux/UNIX 版
(从 Windows NT/2000/XP 计算机进入)**

2.3 怎样成为一位 Thermo-Calc 专家

所有的 Thermo-Calc 和 Dictra 软件/数据库/界面包的用户是而且永远是 Thermo-Calc 软件的力量来源。

他们将我们的专业产品作为他们研发活动中高效、可靠的引擎工具以及教学实践中高级的、科学发展教学的必须品。

他们是我们改进产品和服务的主要贡献者。他们给我们提供有价值的建议，报道漏洞和问题，参与我们的发展工程，担任我们软件顾问和我们客户顾问，在当地安排我们新的、预期用户的培训活动，并向他们提供杂志出版物，计划报道以及其他各种参考资料，参与我们用户或用户集团会议等等。

他们在大学、政府研究所、私人研发以及顾问公司、个人公司促进了我们的专业产品，并帮助我们建立个人专业的产品、问题解决、咨询和客户网络。

他们经常在各种学术活动及工业交流中担任领导地位，并在计算热力学和动力学（在材料设计和工程、材料制备和应用、汽车和航空工业、化学工程、矿业、环境保护、核燃料以及废弃物处理、生产食物等等）中担任拥护者和专家。

我们高度推荐并且愿意尽我们全力来辅导我们的客户在各种研发和教学活动中成为应用这些软件包的专家。我们愿意作出以下推荐：

2.3.1 从 Thermo-Calc 软件公司和他的全球代理处获得即时的技术支持

目前，Thermo-Calc 软件公司在全球范围内大约有 10 个高质量的代理。这些代理的具体地址和联系人，可以通过访问我们的网址 www.thermocalc.com 得到。

Thermo-Calc 软件公司和他的代理商组织世界范围内规律性的 Thermo-Calc (TCC/TCW) 和 Dictra 培训课程。关于课程的描述和时间，同样请访问我们的总公司或者代理商的网址，或者给我们发送一个填写好的 Thermo-Calc 课程申请表或者 Dictra 课程申请表（在我们的网站上可以下载，http://www.thermocalc.se/Service_and_support/Training_courses.html）。有时，根据客户的特殊要求，我们会在特别地方安排一场特别的训练课程；如果您有这类需要或可能性，请联系我们。

关于基本的有关我们公司提供的软件、数据库以及用户界面安装和运行的技术问题，您可以从我们公司或者代理商那里获得迅捷的支持（我们总公司的联系方式如下，地址：Thermo-Calc Software AB, Stockholm Technology Park, SE-113 47 Stockholm, Sweden；邮箱：support@thermocalc.se；电话：+ 46-8-5459 5930；传真：+ 46-8-673 3718；网址：www.thermocalc.com）。我们的网站上按时间顺序公布了各种技术更新和文献，例如时事通讯、技术信息、常见问题解答列表、软件新特征和改进、特殊数据库应用、精选的应用参考、软件演示下载、更新软件下载（对于有效的许可证拥有者）、更新手册下载、即将开设的课程信息及注册等等。基于客户软件维护，一些深奥的技术帮助以及即发问题也可以从我们公司或者当地代理商处获得支持。

关于我们软件/数据库/应用界面以及顾问服务的更多信息，请给我们发送邮件（info@thermocalc.se）。

Thermo-Calc 软件公司和他们子公司或代理商以及一些 Thermo-Calc 公司的特别搭档（特殊应用领域的专家），可以对于我们的客户，实施一些顾问服务（实施计算，设计数据库或者特殊的数据库）。用户也可以向我们发送你们的需求以及说明书（consult@thermocalc.se）。我们将立即联系你们并安排顾问协议，然后实施我们的顾问活动。

如果您在运行我们的任何软件、数据库或者程序界面时遇到了任何漏洞或者问题，我们非常乐意你将迅速的向我们反馈（support@thermocalc.se）。我们将竭尽全力以正确和更新的版本中解决问题，并及时向您提供解决方案。

2.3.2 每日应用 Thermo-Calc 的各种功能

一位新的 Thermo-Calc 用户可能始于特殊的模块（BIN,TERN,POT,POURBAIX 以及 SCHEIL）来进行一些相图和性能图的计算。标准的例子，在计算区域/TCEx/存储为宏文件（TCM），具体请见 TCCREXAMPLE 一书，书中给出了各种基本模块和特殊模块（SYS, TDB, TAB, PLOY, POST, PARROT, ED_EXP; BIN, TERN,

POT, SCHEIL<POURBAIX, REACTOR) 的说明。用户可以拷贝这些宏文件到自己的要求目录下, 经过一些必要修正(关于温度、压强、成份和其他条件)后对一些特殊应用进行计算或模拟。

在您的日常研发和教学活动中, 您可以用 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件、数据包作为可靠和高效的工程工具, 来进行各种热力学计算和动力学模拟。软件包的强大功能可以为您提供最快捷和最精确的热力学平衡和动力学路径的描述, 帮助您理解出现在各种材料体系和材料处理过程中的复杂问题和现象。

在获得应用模块计算和模拟的丰富经验以后, 您可以应用在 TCC 和 Dictra 软件中都有 PARROT 模块对您感兴趣的体系进行严格的评估。用你自己的有关某一特殊材料体系和材料处理过程的实验结果和可靠的文献信息, 您可以优化修正一些已经存在的数据, 并且很轻而易举的建立您自己的数据库、数据组或者数据文件。

如果您对于 Thermo-Calc 引擎中的插件(通过 TQ / TCAP I 应用程序界面)感兴趣, 也可以参照《TQ / TCAP I 程序指南和例子》中简单例子, 自己编写有关材料性能计算和材料处理模拟的程序。您也可以应用 TCMATLAB 关于 MATLAB 软件包的工具箱来计算材料性能, 模拟材料的处理过程, 控制材料工程。

2.3.3 以一种专业和高质量标准的方式显示你的结果

应用一些使用 Thermo-Calc 和 Dictra 软件包的经验, 你可能很快就会建立自己最喜欢的流程和方式来总结计算和模拟结果, 发表科学论文, 进行科技报告并出席会议。

按照特殊要求, Thermo-Calc 公司可能关于怎样演示你的计算和模拟结果(通过使用 Thermo-Calc 和 Dictra 软件包)为您提供一些建议, 使你的结果以各种高专业、高标准的图表显示出来。在现代高级文档、数据处理以及绘图处理软件的帮助下, 你可以很容易, 并高效的编辑并导出你获得的计算、模拟图表到你需要的位置。

2.3.4 通过其他的渠道同他人交流你的经验

Thermo-Calc 公司高度欣赏您在各种研发和教学活动中应用 Thermo-Calc 和 Dictra 软件、数据库、软件界面的知识、经验和建议, 并将非常欣赏你的成功的独特例子。这里有很多渠道为您同公司、代理商和发展/顾问搭档以及所有的全球范围内的用户交流经验。

我们诚挚欢迎您对我们改善和扩展软件功能、用户界面、程序界面、数据库设计和应用, 以及我们的技术支持和顾问服务方面提出的建议。

通过在不同学科的各种会议上和经常在科学杂志和科技报告会刊上发表你的研究成果, 其他一些用户和搜寻者将能够分享你的经验和教训。Thermo-Calc 公司和它的代理商将经常参与各种会议和展览, 在这些会议上, 我们将作报告, 演示我们的产品, 并举行工作组会议和用户小组会议。

更经常的, 为了保持文献的更新和完整, 我们公司一直希望能够得到你的有关你的文章和报告的再版和你的基于 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件、数据库、界面包的自己设计的程序和数据库的备份。

我们非常鼓励和感激你, 如果将你成功实例, 发表文章的再版, 研究报告的复印版和你的建议发送给我们。我们的邮箱为: info@thermocalc.se。

5 Database Module(TDB)

5.1 介绍

多组元体系相图计算的困难之一是找出描述各种平衡的有效参数。与此相关的问题是通过在所有相中对元素使用同一参考态来获得参数。

将已有参数转换到相同的标准态是沉闷的工作, 而且很容易出错。该工作的完成对在以后的应用中使用相同的参数是非常有利的。目前世界上有几个课题组在从事这种类型的工作。而在该领域实力最强的当属 Scientific Groupe Thermodata Europe (SGTE), 它收集并整理了来自两个不同数据库文件中的大量数据。

为能够轻松便利地得到热力学数据, 我们开发了 **Thermodynamic DataBase module**, 即 TDB 模块。

TDB 组件被包含在 Thermo Calc 和 DICTRA 软件包之中执行管理、选择和获取各种不同类型的热力学和动力学数据。

TDB 模块中可用的命令主要有:

TDB_SSOL: ?

AMEND_SELECTION	EXIT	NEW_DIRECTORY_FILE
APPEND_DATABASE	GET_DATA	REJECT
BACK	GOTO_MODULE	RESTORE
DATABASE_INFORMATION	HELP	
SET_AUTO_APPEND_DATABASE		
DEFINE_ELEMENTS	INFORMATION	SWITCH_DATABASE
DEFINE_SPECIES	LIST_DATABASE	
DEFINE_SYSTEM	LIST_SYSTEM	

TDB_SSOL:

⇒ TDB-组件使用指南的校订历史:

1986 年十一月 (由 Jan-Olof Andersson 和 Björn Jönsson 编辑)

1993 年十月 第二次校订并且扩大发行 (由 Bo Sundman 编辑)

2000 年六月 第三校订并且扩大发行 (由 Pingfang Shi 编辑)

2002 年十一月 第四次校订发行;(由 Pingfang Shi 编辑) 2004/2006 有较小的改变。

注: TCCP 中增加了 SET_AUTO_APPEND_DATABASE 命令, 同时以前版本中两个命令 (EXCLUDE_UNUSED_SPECIES 和 MERGE_WITH_DATABASE) 在 TCCN 和 TCCP 被相应地删除了。

5.2 TDB 模块的用户界面

TDB 模块的用户界面是为计算机交互模式而构造。界面的主要特征是一个控制程序运作的命令屏幕，它通过输入相应的命令来管理程序运作。它也是一个可供选择的界面，通过它，一个应用程序可以将命令发送到屏幕。。

TDB 的命令通常由一个连字号或一个下画线分开的一些字母组成。连字号和下画线被视为是相同的。一些主关键字包括第二关键字。这个第二个关键字可以与一个连字号或下画线一起连接到主关键字中或着是像一般参数一样，由命令关键字的空格或一个逗点分开。为了减短连字符两端字母的长度，命令可以由明确的缩写字符组成。

如果命令的剩余部分不是区分命令所必需的话，它可以指被省略。许多命令需要特定的参数值。按下 <RETURN> 键，程序将提示相关的参数值。

通常，默认的命令值在斜线中间提示，这些值可以通过<RETURN>键来选择。如果用户知道命令(与它的第二个关键字，如果可用的话)所必需的参数，那么所有的参数可以通过一行命令输入；否则，那些参数可以通过后面的提示依次分开输入。

5.3 Getting Started

TDB 模块由 Thermo Calc 和 DICTRA 系统运行，它允许用户定义一个体系并从一个的数据库中提取该体系所需要的热力学和动力学数据。这样做的一个直接方法是使用以下的命令。他们当中，有一些命令是必须的，而另一些则只是供选择的，但他们也可以提供很多有用的信息。

5.3.1 SWITCH_DATABASE

SWITCH_DATABASE 用来改变默认数据库。TDB_XYZ 的第二部份用来指示当前数据库，比如说 TDB_SSOL 指当前数据库为 SSOL。

5.3.2 LIST_DATABASE ELEMENT

LIST_DATABASE ELEMENT 列出当前数据库可获得的一系列元素。关键字 ELEMENT 可以被 SPECIES, PHASE or CONSTITUENT 替换。

5.3.3 DEFINE_ELEMENTS

DEFINE_ELEMENTS<list of element>，这个命令用来提示用户输入所有需要在体系中定义的元素。

5.3.4 LIST_SYSTEM CONSTITUENT

LIST_SYSTEM CONSTITUENT，这个命令列举出所有能够在已定义的体系中形成的相，并在相名称后面列出那个相的元素组成。

5.3.5 REJECT PHASE

REJECT PHASE <list of phases>, 这个命令告诉数据库不为任何已选定的相读取数据。关键字 SYSTEM 能用来重新启动数据库。

5.3.6 RESTORE PHASE

RESTORE PHASE <list of phases>, 这命令与 REJECT 命令相反,但关键字 SYSTEM 不能够使用。

5.3.7 GET_DATA

GET_DATA, 该命令搜寻数据库并且将已定义的体系输入 GES5 及[或] DICTRA。只有在运行这命令之后, 才可以进入其它任何一个应用程序中, 如 GES, POLY 或 DICTRA, 并使用被读取的数据。

5.4 Description of All Available TDB Monitor Commands

在 TDB 显示屏中, 所有可执行的命令按依字母顺序排列(如<介绍>所示的第 5.1 节。)大多数的命令后会紧接着列出要求参数的提示。当然并不是所有的那些提示都明确地在这本章节中解释, 只有那些被认为是必需的。

5.4.1 AMEND_SELECTION

Description: 这命令只有在元素, 种类或者体系已经被定义之后才能被使用 (与命令 DEFINE_ELEMENTS, DEFINE_SPECIES 和 DEFINE_SYSTEM 一起)。紧接着的提示说明: 允许对被预先定义的系统进行修改。通过回答 Y(是的) 或 N(不), 先前指定的每个元素、种类或相, 而不是成份或整个的系统, 能被接受或拒绝。关于修改其它东西的提示也可以通过回到 Q (Quit) 来退出因为要作其他的修正也能通过回答 Q。

提要: AMEND_SELECTION [keyword]

相继提示: Keep <name1> NO/Quit /Yes/:
Keep <name2> NO/Quit /Yes/:
... ..

选项: keyword -- ELEMENTS/SPECIES/PHASES
name& -- names of the pre-defined or pre-selected elements/species/phases

5.4.2 APPEND_DATABASE

Description: 这命令从一个文件或另外的数据库中追加数据到当前正在被另外一个数据库读取的数据中来。已经被此系统阅读和存储在 **Gibbs energy system** 中的数据保存在 GES5 工作区

APPEND_DATABASE 命令也需要输入所有的附加参数 (如相组成、 **G0** 和化学反应参数, 等等。)加入到已经存在的相当中。而且相中所有的现有参数 (相组成, **G0** 和化学反应参数, 等等。) 将会被从附加数据库读取的参数值代替。

APPEND_DATABASE 命令与 **SWITCH_DATABASE** 命令相似, 但它并不需要重新初始化 **TDB** 模块和 **GES5** 工作区。因此, 它的顺序与 **SWITCH_DATABASE USER** 命令的顺序相同。详细信息, 请见 **SWITCH_DATABASE**。

所有直接相连的数据库由初始数据库文件预定义(在那 **/DATA/** 区域中的 **TC_INITD** 文件, 在 **PC, Windows NT/2000/XP** 或 **Windows 95/98/ME** 环境下,; 或在 **\data** 区域 中的 **initd.tdb** 文件, 在各种 **UNIX/Linux** 平台下), 或者通过用户使用 **NEW_DIRECTORY_FILE** 产生的初始文件定义, **<RETURN>** 键后而被列出来, 而不给出任何理由。用户也能够通过首先给出 **argument USER**, 紧接着是数据库名称, 如果它不是在当前工作目录, 则还包括它的正确路径来提供他自己的数据库。

在第一次运行此命令之后, **TDB_XYZ:** 提示 (**XYZ** 代表主要地转变的数据库的名字) 被改变到 **APP:**提示与附加数据相关的需进一步进行的命令。

提要 1: **APPEND_DATABASE <additional database name>**

提要 2: **APPEND_DATABASE**

相继提示: **Use one of these databases**

```
...
PURE   = SGTE pure element database
...
SSUB   = SGTE substance database 1997
...
USER   = user defined database
DATABASE NAME /XYZ/: <额外数据库的名称>
```

选项: 额外数据库的名称 -- 一个现有的数据库的名称或是一个与附加数据库相对应的用户数据库定义文件 (*****setup.TDB**)的名称。

注: 在 **Windows NT/2000/XP** 或 **Windows 95/98/ME** 环境下, 如果 **USER** 数据库名称或它的路径没有在 **APPEND_DATABASE** 命令的同一行给出, 或着名字或路径不完全或者不正确给出, 一个 **Open file** 窗口将会被关闭。所以, 路径 (**in the Look in box**) 和数据库命名 (in the **File name box**) 可以被确定。这样用户就能打开被选择的 **USER** 数据库, 或是取消此窗口; 在后者情况, 程序将会列出所有的预定义数据库, 然后用户可以从他们当中选择一个来进行切换或再一次进行 **USER** 选项

在 **Windows NT/2000/XP** or **Windows 95/98/ME** 环境下, 如果附加两个或较多的数据库到要主要转换的数据库中, 这命令可以使用多次。而在各种不同的 **UNIX/Linux** 平台之下, 第二次和进一步的附加数据库只有用 **SWITCH_DATABASE USER** 命令来完成。

在运行完这命令以后, 那些定义体系 (根据元素或种类)、删除/修复相或种类的命令, 以及那些读取数据的命令一定得被重新执行; 然而, 他们的第二关键字和参数值可能会与先前的值不同。

5.4.3 BACK

描述: 这个命令用来返回到最近的模块。 也见 GOTO_MODULE 。

提要: BACK

5.4.4 DATABASE_INFORMATION

描述: 在使用这个命令后, 通常会给出关于当前数据库的简短描述。这其中所影藏体系的信息, 已使用过的模块, 以及参数在温度, 组成, 主要应用等等方面上的可靠范围。

提要: DATABASE_INFORMATION

5.4.5 DEFINE_ELEMENTS

描述: 这命令可以用来根据元素定义体系。 所有能由给定元素形成的种类将会从数据库中读取。 不同元素之间一定要用空格或逗点分开。在元素名称的共同部份使用一个通用字符"*", 那么所有含此公共部分的元素被定义到体系之内。那些元素必须是在当前切换或追加的数据库中可获得的。 注, 自从 TCC, N 版本以后, 最多 40 种元素能在一个体系之中定义。(先前 20 种元素)

提要: DEFINE_ELEMENTS <e 元素 1, 元素 2, ...>

选项: 元素& -- 需要在体系中定义的一系列元素

注: 当附加数据库的时候, 这命令, 或者是 DEFINE_SPECIES, DEFINE_SYSTEM, 一定得用相同或相似的元素重复, 而那些元素是已经在首先切换的数据库中已定义的。详细信息请参考 在命令 DEFINE_SYSTEM。

5.4.6 DEFINE_SPECIES

描述: 这命令用来根据种类定义体系。 只有已经给出的种类才能被读取。 不同种类之间一定要用空格或逗点分开。在种类名称的共同部分后使用一个通用字符"*, 那么所有以公共部分开头的种类将被定义到体系之内。那些种类必须是在当前切换或追加的数据库中可获得的。 注, 自从 TCC, N 版本以后, 体系中可定义的种类多达 1000 种。(先前 400 种种类)

提要: DEFINE_SPECIE <种类 1, 种类 2, ...>

选项: 种类& -- 需要在体系中定义的一系列种类。

注: 当追加数据库的时候, 这命令, 和 DEFINE_ELEMENTS, DEFINE_SYSTEM, 一定得用相同或相似的元素重复, 而那些元素是已经在首先切换的数据库中已定义的。 详细信息, 请参考命令 DEFINE_SYSTEM。

5.4.7 DEFINE_SYSTEM

描述: 这命令或根据 ELEMENTS (与 DEFINE_ELEMENT 相同) 或根据 SPECIES (与 DEFINE_SPECIES 相同)来定义体系。某些数据库的关键字有一个默认的参数值(如 ELEMENTS 或 SPECIES)来反映在定义体系时什么才是最适合的。

不同种类或元素之间一定要用空格或逗点分开。在种类或元素名字的共同部分后使用一个通用字符"*, 那么所有的以公共部分开头的种类或元素将被定义到体系之内。那些种类或元素必须是在当前切换或追加的数据库中可获得的。

提要 1: DEFINE_SYSTEM <元素 1, 元素 2, ...>

提要 2: DEFINE_SYSTEM

相继提示: ELEMENTS: <元素 1, 元素 2, ...>

提要 3: DEFINE_SYSTEM

相继提示: SPECIES: <种类 1, 种类 2, ...>

选项: SPECIES or ELEMENTS (默认关键字) – 只有在某些情况下才需要

元素& --定义体系所需要的一系列元素需要给出。

种类& --定义体系所需要的一系列种类需要给出。

注: 当附加数据库的时候, 这个命令, 以及 DEFINE_ELEMENTS 和 DEFINE_SPECIES, 一定得用相同或相似的元素重复, 而那些元素是已经在首先切换的数据库中已定义的。然而, 用户应该明白不同的数据库可能包含不同的元素而且种类有不同的定义, 所以他/她应该避免定义在附加数据库中消失的元素/种类, 否则, 程序将会提示这些元素/种类, 并在后来的操作中忽略他们。但是另外的元素/种, 当然还有另外的相, 在首先切换的数据库中不可获得的, 能够在附加数据库中定义而且读取

注, 自从 TCC, N 版本以后, 达到 1000 种种类和 40 种元素能在一个体系之内定义。(先前 400 种种类和 20 种元素)

5.4.8 EXCLUDE_UNUSED_SPECIES

描述: 为了节省程序工作空间, 这命令用来将不进入当前任何一个已定义的相的种类从种类列表中删除掉(通过 LIST_SYSTEM SPECIES 命令按顺序显示),。然而, 它自从 TCC 版本 N 以后就已经被无效, 因为计算机空间目前已不是一个大的问题。

5.4.9 EXIT

描述: 这命令结束程序并回返到操作系统。除非已经执行了 SAVE 命令 (在 GES, POLY 或 P ARROT 模块中), 否则所有的数据和结果将会丢失。

提要: EXIT

5.4.10 GET_DATA

描述: 这命令用来将已定义系统的元素、种类, 相和从最初切换的数据库或另外追加的数据库中得到的参数输入到 GES 及[或] DICTRA 工作空间。这条命令对于从数据库中读取所有关于系统定义的信息是必须的

提要: GET_DATA

注: 只有在运行这命令之后才有可能进入到其他任何一个应用程序如: GES, POLY 或 DICTRA, 并使用读取的数据。当追加数据库时, 这命令一定被重复执行, 为了获得另外的体系定义, 参数以及功能。

5.4.11 GOTO_MODULE

描述: 这命令在模块之间进行切换。必须输入需要切换的模块的名称。使用 <RETURN> 键, 可以获得一系列的模块的名称。

提要 1: GOTO_MODULE <模块名称>

提要 2: GOTO_MODULE

相继提示: MODULE NAME: <模块名称>

选项: 模块名称 -- 需要依次打开的模块的名称。

注: 在没有输入一个指定或唯一的模块名称的情况下, 使用 <RETURN> 键可以获得一系列的 TCC 模块的名称, 正如下面所示:

```
NO SUCH MODULE, USE ANY OF THESE:
    SYSTEM_UTILITIES
    GIBBS_ENERGY_SYSTEM
    TABULATION_REACTION
    POLY_3
    BINARY_DIAGRAM_EASY
    DATABASE_RETRIEVAL
    FUNC_OPT_PLOT
    REACTOR_SIMULATOR_3
    PARROT
    POTENTIAL_DIAGRAM
    SCHEIL_SIMULATION
    POURBAIX_DIAGRAM
    TERNARY_DIAGRAM
MODULE NAME: <module name>
```

5.4.12 HELP

描述: 这命令用来列出可得的命令或者对指定的命令进行解释。

提要 1: HELP <命令名称>

提要 2: HELP

相继提示: COMMAND: <命令名称>

选项: 命令名称 -- 需要获得 HELP 命令 (TDB 命令之一) 的名称

注: 使用 <RETURN> 键而不输入任何一个命令名称将会列出所有的可得 TDB 命令。

指定一个唯一的 TDB 命令, 则将会在荧屏上显示出那命令的解释。(通常与使用指南中列出的内容一样)

然而输入不唯一的命令缩写将会列出所有的相符合命令。被需要的命令数据能通过输入其特有的缩写或完全的命令名字来获得。

5.4.13 INFORMATION

描述: 这个命令提供一些关于数据库模块和数据库管理的一些方面的信息

提要: INFORMATION

相继提示: WHICH SUBJECT /PURPOSE/: ?

Specify a subject (or its abbreviation as long as it is unique, e.g., EA, EXT, EXA, etc.) on which information should be given, from the following subjects that are important to the use of the TDB Module:

PURPOSE

==> 想让 INFORMATION 命令做什么。

HELP

==> Description 怎样获得关于各种各样 TDB 命令的帮助。

USER INTERFACE

==> Description TDB 模块的使用者界面是如何工作的。

EASY TO USE GUIDE

==> Description 怎样开始使用 TDB 模块。

EXTENDED COMMANDS

==> Description 怎样使用 TDB 模块中的命令。

DATABASES

==> Description 如何开发和提供 TC 数据库的。

MANAGEING DATABASES

==> Description 怎样维持 TC 数据库的。

INITIALIZATION OF TDB MODULE

==> Description 怎样初始化 TDB 模块。

SHORT USER-DEFINED DATABASE GUIDE

==> 对于自定义数据库的简短指引。

LONG USER-DEFINED DATABASE GUIDE

==> 对于自定义数据库的详细指引。

DICTRA EXTENSIONS

==> Description TDB 模块中的 DICTRA 的扩展名。

EXAMPLES OF DATABASE DEFINITION FILES

==> 数据库定义文件的一些例子。

WHICH SUBJECT /PURPOSE/: <a specified and unique subject>

选项: 下列主题需要被指定并且唯一:

PURPOSE --提供关于 TDB 模块的介绍, 如第 5.1 节所示。

HELP -- 指导怎样获得各种各样的 TDB 命令帮助, 如第 5.4.12 节所示。

USER INTERFACE -- Description TDB 模块的用户界面, 如第 5.2 节 (用户界面)所示。

EASY TO USE GUIDE -- 列出所有基本的命令, 如第 5.3 节 (开始) 所示。

EXTENDED COMMANDS -- 列出所有的在第 5.3 和 5.4 节 Description 过的命令。

DATABASES --Description 在 Thermo-Calc 数据库型谱,包括自由地被分配的那些、和其他那些商业可得的。

MANAGING DATABASES -- Description 一个 Thermo-Calc 数据库是怎样形成和管理的, 如 *Thermo-Calc Database Guide* 的第 3.1 节所示。

INITIALIZATION OF TDB MODULE -- Description 怎样初始化 TDB 模块, 如 *Thermo-Calc Database Guide* 的第 3.2 所示。

SHORT USERDEFINED DATABASE -- 给出对于怎样构建一个用户数据库的简短 Description。

LONG USERDEFINED DATABASE --给出对于怎样构建一个用户数据库的详细 Description, 如 *Thermo-Calc Database Guide* 的第 3.3 节所示。

DICTRA EXTENSIONS -- 给出对于怎样在一个用户数据库中使用 DICTRA 扩展名的详细 Description, 如 *Thermo-Calc Database Guide* 的第 3.4 所示。

EXAMPLES OF DATABASE DEFINITION FILES --

示范两个用户自定义数据库的例子, 如 *Thermo-Calc Database Guide* 第 3.5 所示。

5.4.14 LIST_DATABASE

命令描述: 此命令列出当前数据库的所有元素, 物种, 相和相的组成。

提要: LIST_DATABASE [keyword]

选项: 关键字--必须使用关键字 ELEMENTS, SPECIES, PHASES 和 CONSTITUENT 的其中之一来指明将要列出的对象。

ELEMENTS --所有可用元素, 他们的参考态, 原子质量, H298-H0 以及 S298. 一些元素的参考态栏为空. 这意味着库内没有存储此元素的相关参数。

SPECIES --所有带有化学计量因数的可获得的物种。

PHASES --所有带有亚点阵以及每个压点阵的点数目的可获得的相。

CONSTITUENT --所有可得的相, 亚点阵数目, 每个压点阵中的点数目以及每个相所含有的物种数目。不同亚点阵中的物种用冒号分隔。请注意下面

所讲的例子,一个相可能由 Fe, Mo, V 和 Cr 组成, 他们的热力学参数可以来自二元体系: Fe-Mo, Fe-V, Fe-Cr 和 Mo-Cr。这些参数可以对 Fe-Cr-Mo 三元体系的相角进行一个相对较好的描述,但对于 Mo-Cr-V 体系来说,这些数据的描述是很糟糕的.基于这个原因,那些来自二元系统而没有被包含在数据库中的交互参数将会被系统默认的设置为零。

5.4.15 LIST_SYSTEM

命令描述: 此命令列出所定义系统中的所有元素, 物种, 相和相组成。它只有在系统已经被定义的情况下才能发挥作用。

提要: LIST_SYSTEM [keyword]

选项: 关键字 – 必须使用关键字 ELEMENTS, SPECIES, PHASES 和 CONSTITUENT 中的一个 (正如在 LIST_DATABASE 命令描述的一样) 来指明要列出的对象。

5.4.16 MERGE_WITH_DATABASE

命令描述: 此命令用来从一个文件或附加的数据库中获取数据并将他们和从另外一个数据库读取的数据融合起来。已经从另外一个数据库读取并存储在 Gibbs 能量系统的数据被存放在 GES5 工作区。它取代了老的 APPEND_DATABASE 命令, 除了可以输入参数到已存在的相中外,此命令基本上与最新的 APPEND_DATABASE 命令相同。但是这条命令自从 TCC P 版本以来就已失效。推荐使用 APPEND_DATABASE 命令。详见第 5.4.2 节 (APPEND_DATABASE 命令)。

5.4.17 NEW_DIRECTORY_FILE

命令描述: 此命令打开由一个本地数据库管理器或者使用者生成的一个新的数据库初始化文件 (或称为数据库 目录文件),以访问不是在原始数据库初始化文件中预先定义的附加数据库。自从 TCC 版本 M 以后, 它就可以使用了。

原始数据库初始化文件自动被 TCC 安装原本复制到主数据库区域内, 这区域在一个本地电脑以获得一个独立的安装位置, 或在一个相连的服务器以获得一个安装服务器。那就是在\DATA\区域内 TC_INITD (或 TC_INITD.TDB) 文件, 这区域在 PC Windows NT/2000/XP 或 Windows 95/98/ME 环境下的 TCPATH 参数所定义的目录下; 或是在\data/区域的 initd.tdb 文件, 这区域在 PC Linux 以及各种 UNIX 平台 (SUN Solaris, SGI, 等等)环境下的 TC_DATA

参数所定义的目录下。然而，如果有太多数据库在同一个安装或有一些使用者指定的具有特别目的数据库,那么本地数据库管理器能产生一些额外的数据库开始文件, 或每个使用者可以有他自己的开始文件。

此命令实现原始及附加数据库初始化文件中 TDB 模块数据库群的运行初始化的切换, TCC 能够使用几个附加数据库初始化文件，这些文件定义了不同数据库群的访问路径(不同数据库位于由 TCPATH 或 TC_DATA 参数所定义目录的不同子目录下)。所有可直接使用的数据库始终在同一个群中，直到这个命令被执行或再次执行。

提要 1: NEW_DICTORY_FILE <another database-initiation-file name>

提要 2: NEW_DICTORY_FILE

相继提示: File with database directory /TC_INITD/:
<database-initiation-file name>

选项: 另一个数据库-初始化文件的名称 --下一个需要被打开的数据库初始化文件(或另外或原始的) 的名称.

说明: 如果 TCC 是在 Windows NT/2000/XP 或 Windows 95/98/ME 环境下使用，文件名或它的路径没有在 NEW_DICTORY_FILE 命令的同一行给出，或文件名不完全给出或不正确的情况下，屏幕上将会弹出一个 *Open file* 窗口等待确定新数据库初始化文件。这样，路径（在 **Look in** 箱中）和数据库初始化文件名称（在 **File name** 箱中）能够被恰当的选择。取消这个窗口可以退出程序。然而，如果 TCC 是在 UNIX/Linux 平台上运行，新的数据库初始化文件必须放在当前工作目录下（TCC 开始的地方）。

怎样构建附加数据库初始化文件的详细信息，请参考第 6.2 节 (TDB 模块的初始化)。

5.4.18 REJECT

命令描述: 此命令去除由定义的元素和物种形成的元素，物种，相和相组成。由定义的系统所可能形成的物种/相/组成与系统目录上的相/种类/组成是无关的（由命令 LIST_SYSTEM 所示）。目录上没有的相/种类/组成在没有复原之前是不能输入的。不同的名称必须用一个空格或逗号分开。可以在名称相同部分的后面使用通用符“*”，这样所有以公共部分开始的在当前打开的或添加数据库中可得的元素/种类/组成名称就可以被定义的数据库所删除。

此命令也能去除一个定义的系统, 进而重新初始化整个的 TDB 组件内存和 GES5 工作空间。.

提要 1:	REJECT [keyword]	(如果关键词 = ELEMENTS 或 SPECIES 或 PHASES)
相继提示:	keyword: <name1, name2, ...>	
提要 2:	REJECT [keyword]	(如果关键词 = CONSTITUENT)
相继提示:	PHASE: <phase name> SUBLATTICE NUMBER: <sublattice number in the phase> CONSTITUENT: <constituent(s) in the sublattice of the phase>	
提要 3:	REJECT [keyword]	(如果关键词= SYSTEM)
选项:	keyword -- ELEMENTS/SPECIES/PHASES/CONSTITUENT/SYSTEM name& -- 预定义元素,物种,相以及组成的名称.	
说明:	必须使用关键字 ELEMENTS, SPECIES, PHASES, CONSTITUENT 或 SYSTEM 中的一个来指明删除的对象:	

ELEMENTS: 所给出的元素将被删除。

SPECIES: 所给出的物种将被删除, 使它不能够从已定义的元素中形成。

PHASES: 所给出的相将被删除, 使它不能够从已定义的元素或相中形成

CONSTITUENT: 所给出的某相中的组成将被删除。

SYSTEM: TDB 模块将恢复到最初的情况; GES5 将重新启动而且已经在 GES5 中的数据将会失。

万一要恢复组成, 须要指定更多的提示信息, 如下:

PHASE: 包含组成的将要被删除的相的名称。

SUBLATTICE NUMBER: 组成所进入的亚点阵位置(第 1 个亚点阵是 1). 如果这里只能存在一个可能的亚点阵, 系统将忽略这个问题。

CONSTITUENT: 被删除的组成的名称。

5.4.19 RESTORE

命令描述: 此命令的功能与 REJECT 命令相反, 它恢复已经明确被删除的元素, 物种, 相或者组成; 但是它不能恢复一个完全被删除的系统。可以从已定义的元素或种类中形成的相/种类/组成可以被输入到相/种类/组成系统的目录中 (如 LIST_SYSTEM 所示)。目录上没有的相/种类/组成现在可以被加到目录上去。不同的名称之间必须用一个空格或逗号分开。可以在名称共同部分的后面加一个统配符“*”, 这样所有以公共部分开始的在当前打开的或添加数据库中可得的元素/种类/组成名称就可以被定义的数据库所删除。

- 提要1: RESTORE [keyword] (如果关键词 = ELEMENTS 或 SPECIES 或 PHASES)
- 相继提示: keyword: <name1, name2, ...>
- 提要2: RESTORE [keyword] (如果关键词 = CONSTITUENT)
- 相继提示: PHASE: <phase name>
 SUBLATTICE NUMBER: <sublattice number in the phase>
 CONSTITUENT: <constituent(s) in the sublattice of the phase>
- 选项: keyword -- ELEMENTS/SPECIES/PHASES/CONSTITUENT
 name& --主要定义的元素/种类/相/组成的名称。
- 说明: 必须使用关键字 ELEMENTS, SPECIES, PHASES 或 CONSTITUENT 中的之一，
 用来指出需要恢复的对象:

ELEMENTS: 所给出的元素将会被恢复。

SPECIES: 所给出的种类将会被恢复，而且是可以从已定义的元素中形成的。

PHASES: 所给出的相将会被恢复，而且是可以从已定义的元素或种类中形成的。

CONSTITUENT: 所给出的在一个相中的组成将会被修复。

万一要恢复组成，须要指定更多的提示信息，如下:

PHASE: 包含组成的需要恢复的相的名称。

SUBLATTICE NUMBER: 组成所进入的亚点阵位置(第 1 个亚点阵是 1)。

CONSTITUENT: 需要恢复的组成的名称。

5.4.20 SET_AUTO_APPEND_DATABASE

命令描述: 此命令会自动地执行程序: 为在当前数据库（也就是说是 TDB 模块所默认的数据库，或是由 SWITCH_DATABASE 命令所设定的数据库）中所定义的相同的系统以及相同的相，从一个附加数据库（被这条命令所设立的，请看第 5.4.21 节）中，追加热力学数据。当执行 DICTRA 模拟时，它对于为一个已定义的系统同时获取热力学和动力学数据是相当有用的。

这个命令必须在定义一个系统（由命令 DEFINE_SYSTEM, DEFINE_ELEMENT, 或 DEFINE_SPECIES 来实现）和从主切换数据库中检索数据之前使用（此操作由 GET_DATA 命令执行）。

它的工作方式与 APPEND_DATABASE 数据库名称命令的序列相似(参见第 5.4.3 节)，但只有主切换数据库中的相将被附加。不允许人为地列出，删除或恢复任何在附加数据库中可获得的相。当通过执行 GET_DATA 命令来获取数据以后，所有在附加数据库中存在而在主切换数据库中不存在的相会被自动地删除。

对于主切换数据库 TDB_XYZ (XYZ 代表主要转换的数据库的名称) 来说, 提示将会被保存直到 GET_DATA 命令的执行。

Therefore, if one wants to selectively append more phases from a secondary database to a system that will be defined and retrieved from a primarily switched database, then the APPEND_DATABASE command and those sequential commands (such as DATABASE_INFORMATION, DEFINE_SYSTEM, DEFINE_ELEMENT, DEFINE_SPECIES, LIST_SYSTEM, REJECT, RESTORE and GET_DATA) should be used instead.

提要 1: SET_AUTO_APPEND_DATABASE <附加数据库名>

提要 2: SET_AUTO_APPEND_DATABASE

相继提示: DATABASE NAME /XYZ/: <附加数据库名>

选项: 附加数据库名称--一个现存的数据库的或者是和附加数据库对应的 USER 数据库定义文件 (***setup.TDB) 的名称。

说明: 虽然从附加数据库中人工列举, 删除, 或恢复任何相, 但是 TDB 模块会自动的忽略那些在主切换数据库和附加数据库中都不存在的相, 而且仅仅从附加数据库中为相 (在主切换数据库中同样可以得到) 附加数据, 正如当执行 GET_DATA 命令以后屏幕上所告知的。

5.4.21 SWITCH_DATABASE

命令描述: 此命令从当前数据库切换(或改变)到一个新的数据库, 也为定义一个系统和 GES5 工作区以存储检索数据而重新初始化整个 TDB 模块。所有直接关连由原始数据库开始文件 (PC Windows NT/2000/XP or Windows 95/98/ME 环境下, 在 /DATA/中的 TC_INITD 文件或是在 UNIX/Linux 平台下, 在 /data/区域的 initd.tdb 文件) 或者执行 NEW_DIRECTORY_FILE 命令后用户指定的数据库初始化文件所预先定义的数据库, 会通过按〈RETURN〉键被列举出来, without giving any argument。使用者也可以通过首先给出 USER 然后给出数据库名称的方式提供自己的数据库, 如果它不是存储在当前工作域中的话, 还要给出它的正确路径。提示 TDB_XYZ 的第二部分指明当前数据库 XYZ。

提要 1: SWITCH_DATABASE <新数据库名>

提要 2: SWITCH_DATABASE

相继提示: Use one of these databases

...

PURE = SGTE pure element database


```
...
SSUB   = SGTE substance database 1997
...
USER    = user defined database
```

DATABASE NAME /XYZ/: <新数据库名>

选项: 新数据库名 --一个现存的数据库的或者是一个 USER 数据库的定义文件 (**setup.TDB) 的名称。

说明: 数据库名: 新的数据库可以在一个预定义数据库之前输入数据库名的缩写来确定.为了在转换/追加你自己的数据库时,或者从 TCS 或它的代理商购买数据库时的方便,你可以简单地把他们加入到你的 TCC/TCW/DICTRA 安装包裹的数据库初始化文件 TC_INITD 或 initd.tdb 中的预先定义的数据库目录中去;另参见第 2.2.2.2 小节,第 3.2 小节或者是 *Thermo-Calc Database Guide* 的第 3.2 小节。

如果 USER 选项已经选择,包含 USER 数据库定义和它的路径的一个文件必须被提供。在不同的 UNIX/Linux 平台下,USER 数据库的名称或是预定义的名称之一可以根据下面的提示来使用:

文件名: 一个有效的 USER 数据库定义文件(**setup.TDB)的文件名称或一个预先定义的带有正确路径的数据库名称。默认的文件扩展名是.TDB。

在 Windows NT/2000/XP 或者 Windows 95/98/ME 环境下,如果一个 USER 文件名或它的路径没有在 SWITCH _DATABASE 命令的同一行给出,或不完全给出或不正确的情况下,屏幕上将会弹出一个 *Open file* 窗口以确定新数据库初始化文件。因此,路径(在 **Look in** 箱中)和数据库定义文件名称(在 **File name** 箱中)能够被恰当的确定。使用者这时可以打开选择的 USER 数据库,或是取消这个窗口任务,在后一种情况下,程序会列出所有的预先定义的数据库,这样使用者可以指定其中之一来进行数据库切换或重新执行 USER 选项。

USER 数据库是在没有初始化 Gibbs 能量系统的情况下使用的,因此不同数据库之间的数据可以融合,这样 SWITCH_DATABASE USER 命令的顺序与 APPEND_DATABASE 命令是相同的。融合的结果必须被仔细的检查,因为标准状态,相模型,相名称之间的差异可能是灾难性的。如果相同的参数出现在几个这样的切换或附加数据库中,那么最后一个被检索的数据库将用于计算。把这个方法使用在大型数据库上是不明智的,因为装载将特别慢。在使用这个命令后,用于定义系统(根据元素或种类),删除/恢复相或物种,检索数据以及从附加数据库中添加数据的命令能够被继续执行。

5.5 Extended Commands

所有以下命令可以接受一个统配符* 来作为<list of names>中的第 1 名称，来指示一个特殊含义特殊名称/所有的都是可得的。问题标记给出一个选项来执行每个条目的命令。下面是特别有用的关于 the DEFINE, REJECT 和其他的 TDB 命令。

```
DEFINE [keyword] <list of names>
RESTORE [keyword] <list of names>
REJECT [keyword] <list of names>
LIST_SYSTEM [keyword] <list of names>
LIST_DATABASE [keyword] <list of names>
```

Some examples:

```
DEF_SYS /?                (All elements are query defined)
DEF_SYS /ALL              (All elements are defined)
DEF_SYS * FROM va TO fe   (Elements from VA to FE are defined)
DEF_SYS * FIRST LAST      (All elements are defined)
DEF_SYS /? FIRST fe       (Elements up to FE are query defined)
DEF_SYS * va fe           (Elements from VA to FE are defined)
DEF_SYS * 1 5             (The five first elements are defined)
```

众多原理的命令就如命令 LIST_DATABASE 一样

A *也可以在一个名字的结尾用，来指出所有的以字母开头的名字，直到* 被提及。

7 列表模块 (TAB)

7.1 简介

在 Thermo-Calc 软件中，列表模块，简称 TAB，它以表格形式列出各种物质、纯化学计量相或溶液体系相、以及反应的所有类型的热力学函数。

现行的 TAB（列表模块）经常计算出一种物质在同类状态或者反应中的最稳定相（物种），结果以表格形式列出，或者绘制成图形。

除以上功能外，本模块（TAB）还可以列出纯化学计量相或者具有固定组成的溶液系相的热力学函数。

而且，本模块也可以列出纯化学计量相或者给定组成的溶液系相的各种部分衍生物。

在现行列表模块（TAB）中将会有以下命令：

TAB: ?

BACK	LIST_SUBSTANCES	SWITCH_DATABASE
ENTER_FUNCTION	MACRO_FILE_OPEN	TABULATE_DERIVATIVES

ENTER_REACTION	PATCH	TABULATE_REACTION
EXIT	SET_ENERGY_UNIT	TABULATE_SUBSTANCE
GOTO_MODULE	SET_INTERACTIVE	
HELP	SET_PLOT_FORMAT	

TAB:

⇐ 列表模块用户指导手册修订简史:

- 1985.11 第一版 (Bo Sundman 编著)
- 1993.10 第二次修订版 (Birgitta Jönsson 和 Bo Sundman 编著)
- 1998.9 第三次修订版(Bo Sundman 编著)
- 2000.6 第四次修订版和增补版(Pingfang Shi 编著)
- 2002.11 第五次修订版(Pingfang Shi 编著); 2004, 2006 年稍有改动。

7.2 基本命令

7.2.1 HELP

命令描述: 此命令以表格形式列出可用命令或者解释一个命令。

概要 1: HELP <命令名称>

概要 2: HELP

相继提示 t: COMMAND: <命令名称>

选择 s: 命令名称 – 要获取帮助的命令 (某一 TAB 模块命令) 名称。

说明 s: 在不输入任何命令名称情况下, 按<RETURN>键, 程序可以列出所有可用的 TAB 命令。

指明一个特定 TAB 命令, 程序就会在屏幕上打印出该命令解释 (内容常与用户指导手册保持一致)。

输入非特定的命令缩写, 程序将会列出所有符合命令缩写的命令, 通过输入命令特定缩写或命令全称可以获得想要命令的信息。

7.2.2 GOTO_MODULE

命令描述: 此命令可实现模块之间转换, 而且必须要输入目标模块名称。

概要 1: GOTO_MODULE <模块名称>

- 概要 2:** GOTO_MODULE
- 相继提示:** MODULE NAME: <模块名称>
- 选择:** 模块名称-随后打开的模块的名称。
- 说明:** 在不输入任何特定模块名称情况下, 按<RETURN>键, 将会列出所有的可用 TCC 模块, 如下所示:
- ```
NO SUCH MODULE, USE ANY OF THESE:
SYSTEM_UTILITIES
GIBBS_ENERGY_SYSTEM
TABULATION_REACTION
POLY_3
BINARY_DIAGRAM_EASY
DATABASE_RETRIEVAL
REACTOR_SIMULATOR_3
PARROT
POTENTIAL_DIAGRAM
SCHEIL_SIMULATION
POURBAIX_DIAGRAM
TERNARY_DIAGRAM
MODULE NAME: <模块名称>
```

### 7.2.3 BACK

- 命令描述:** 此命令将控制转向最当前模块, 也可参见 GOTO\_MODULE 命令, 从 POST 模块 (后信息处理) 出发, 执行 BACK 命令后, 控制只会转向 TAB 或者 POLY 模块 (从 POST 模块进入的地方开始)

- 概要:** BACK

### 7.2.4 EXIT

- 命令描述:** 此命令用来终止程序, 返回操作系统。终止程序前, 务必输入 SAVE 命令到 GES, POLY 或者 PARROT 模块, 否则所有数据和结果将会遗失。

- 概要:** EXIT

## 7.2.5 PATCH

**命令描述:** 此命令用于排除系统中的错误，知道如何使用此命令者方能使用。

**概要:** PATCH

## 7.3 重要命令

### 7.3.1 TABULATE\_SUBSTANCE

**命令描述:** 此命令可以以表格形式列出一种物质（给定化学式，但不能确定它在哪种状态或者相中可以形成），或者一纯化学计量相（从某一特定物质数据库如 SSUB3 或者某一特定溶液数据库如 SSOL2 和 TCFE3 中获取数据），抑或是固定组成的溶液体系相在某一恒压不同温度下（从某一特定溶液数据库如 SSOL2 或 TCFE3 中获取数据）的各种热力学性质。

对于某一种物质来说，默认数据库被设定为 SSUB 数据库，用户可以在 TDB 或者 TAB 模块中使用 SWITCH\_DATABASE 命令来设定一个合适数据库作为当前数据库以获取数据表格。一种物质的化学式记法不区分大小写，因此只有一个字母的元素其后必须跟随一个化学计量系数，即使系数是 1 也不例外。记号 CO 将被当作钴，所以一氧化碳必须写作 C1O1（或者 O1C1）。在书写化学式时，如何安排元素的排列顺序没有多大关系，（例如，方解石[一种天然晶状碳酸钙]可记为 CaC1O3 或者 CaO3C1 或者 C1O3Ca 或者 C1CaO3 或者 O3C1Ca），这是因为在限定元素和化学计量系数后，TAB 模块将会在当前数据库中搜寻可用（已有）物种。假如所搜寻物种在当前数据库各相中不存在，屏幕上将会出现（检索数据时）输入信息不完全或者不合适的提示，继而输出列表失败，。基于这个原因，此命令对带电物质不适用，比如 GAS 相中的 H2+1, H1+1, H1-1, LIQUID 相系中的 Fe1/+2, Cr1/+3, O1/-2, AQUEOUS 相系中的 Fe+2, H+1, OH-1。请注意模块将会自动找出物质在给定压力下一温度范围内的最稳定形式（相），因此列表列出的各种热力学性质总是适用于各种温度下的最稳定物质。

对于纯化学计量相或固定组成的溶液系相，在使用 TAB 命令之前，用户必须事先限定系统，并且从 TDB 某一合适的溶液数据库中获取热力学数据。相的名称可用大写，小写或者大小写混合形式表示，并且可以缩写，直至它是特定的，如 fcc, BCC, Liq, cem, Al5Fe2 等等，正如使用 SSOL 数据库获取列表。或者 GAS, FE-S, wustite, Fe2O3-hem 等等，正如 SSOL 数据库的使用。当程序提示输入各种有可能占据亚点阵的物质的点-小数时，模块将有选择性的仔细检查某一特定相的一个特定的亚点阵或者所有的可能的亚点阵，并且仔细检查当前系统（已限定）

的整个框架（包括所有已确定的元素和物种，如果当前数据库需要，还应包括默认的确切缺口和电子）。（这几句不会翻）Therefore, one can tabulate thermodynamic properties for a pure phase, or for a solution phase as a pure end-member (with a composition definition for the corresponding non-interacting species on all necessary sublattices in the end-member), or for a solution phase as a real solution (with a composition definition for related interacting species on all necessary sublattices in the solution).

而且，对于某一物质、纯化学计量相、或者具有固定组成溶液系相，它们被列出的性质的多样性可以依据温度绘制成图形或者作为实验性文件保存（扩展名为.EXP）。

提要: TABULATE\_SUBSTANCE

相继提示: Substance (相): <物种或相的名称>

对于某一物质来说，给出它的化学式，如 Fe, H<sub>2</sub>, C<sub>1</sub>H<sub>6</sub>, FeCl, CaCl<sub>2</sub>, MgSiO<sub>3</sub> 等等，当 TABULATE\_SUBSTANCE<物质>命令在 TAB 模块中被第一次使用时，它经常把 SSUB 数据库作为默认数据库使用。如果现行 TCC 安装后，SSUB 数据库仍不能使用，并且某一特定数据库还没有被打开的情况下，它会在屏幕上提示确定一个合适的物质数据库或者是溶液数据库（比如输入 SSUB2, SSUB3, SSOL2, TCFE3 等等）。在使用此命令前，用户可事先使用 SWITCH\_DATABASE 命令在 TAB 模块中设定当前数据库，如果某一溶液数据库被设定为当前数据库，那么只有那些能够以相的形式独立存在的中性物质才能以列表形式列出。

注意：在其他相继提示出现之前，已用数据库，已获得的数据列表，参考资料等等的目录将会出现在屏幕上，通过这些信息，用户可以得知 TAB 模块在执行哪些命令和任务。

对于纯化学计量相或溶液系相，给出相名称，比如，FCC, CEMENTITE, LIQUID, SLAG, AQUEOUS, GAS, Al<sub>5</sub>Fe<sub>2</sub>, Fe-S, Wustite, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Hematite,等等。务必谨记：在使用 TAB\_SUB 命令之前，用户必须事先限定系统，并且从 TDB 某一合适的溶液数据库中获取热力学数据,这一点十分重要.程序会自动提示其他选项和相组成确定的必要输入。

对于单一亚点阵的纯化学计量相（如 Fe-S, Wustit 和 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Hematite），不需要对组分进行进一步的限定。

对于单一亚点阵的溶液系相（如 AQUEOUS 溶液，GAS 混合物和 SLAG 溶液），它需要输入 n-1 组相组分的点-小数数据（在当前限定的系统中，如果确定相中含有 n 种物质，应包括所有的已确定的元素和物种。如当前数据库需要，还应包括默认的确切缺口和电子），剩余的组分比例数值将自动分配给第 n 种物质。注意所输入点小数之和不能超过 1。例如，你可在 Fe-Cr-Ni-C-N-O 结构的某一 LIQUID 溶液相（来自

SSOL 数据库)中看到以下提示和输入(注意, 剩余的组分比例数值将默认的分配给未提示物种 Ni)。

```
FRACTION OF CONSTITUENT (RETURN FOR PROMPT): <RETURN>
C /1/: .05
CR /1/: .1
FE /1/: <RETURN>
SUM OF FRACTIONS EXCEED UNITY, PLEASE REENTER
FE /1/: <.8>
N /1/: .005
```

对于含有两个或者两个以上亚点阵的纯化学计量相(如 Al<sub>5</sub>Fe<sub>2</sub> 纯化学计量相)和含有两个或者两个以上的亚点阵的溶液系相(如 FCC 合金溶液和 ION\_LIQ 离子液体溶液), 系统首先询问哪一个亚点阵的组分点小数数据将被确定: 对于所有可能的亚点阵的默认值为 0, 对于确定的亚点阵为某一给定的正数(当然此数字对于当前确定相来说必须合理, 比如它必须小于相总的亚点阵数目), 然后对于给定亚点阵或者所有亚点阵, 如果确定相中的亚点阵含有 n 种物质, 它会在每一个亚点阵中针对可能组分的点小数输入做 n-1 次提示, 亚点阵的第 n 种物质将被自动分配剩余的组分比例。例如 Fe-Cr-Ni-C-N-O 结构中的某一 FCC 溶液相中, 你会看到以下提示和输入(注意, 亚点阵 1 的未提示物质 O 和亚点阵 2 的未提示物质 VA 将被默认的分配剩余组分点的数量比例)。

```
SPECIFY SUBLATTICE (0 FOR ALL) /0/: <RETURN>
FRACTIONS IN SUBLATTICE 1
CR /1/: .1
FE /1/: .8
NI /1/: .0995
FRACTIONS IN SUBLATTICE 2
C /1/: .05
N /1/: .05
```

Pressure /100000/: <pressure of interest, in pa>  
确定常压条件, 单位为 Pa.

Low temperature limit /298.15/: <T-low, in K>  
确定起始温度, 单位为 K.

High temperature limit /298.15/: <T-high, in K>  
确定终了温度, 单位为 K.

Step in temperature /100/: <T-step>  
确定输出列表的温度阶差.

Output file /SCREEN/: <RETURN for SCREEN, or type a file name>

如果输入<RETURN>,被选定物质或确定的纯物质相或者是固定组成的溶液系相的一系列基本热力学函数将以列表的形式展现出来(在以下的输出例子中展示),继而命令结束.

假如输入一个文件名,程序不但会在屏幕上显示列表,而且将列表保存为\*.EXP 或者\*.TAB 文件,继而程序将会提示以下问题:

Graphical output /Y/: <Y or N>

如果回答 N(不),程序将在屏幕上生成列表,并在当前工作域中将列表保存为默认扩展名是.TAB 的简单文本文件.在这种情况下,不会有图形输出.

如果回答 Y(是),程序不但生成具有各种热力学函数的列表,而且会绘制图形并输出,该图形 X 轴代表温度,Y 轴代表列表中被选中的某一列的热力学性质(性质的相关数据在屏幕上用图形显示,并保存为.EXP 文件).随后,程序将进一步询问列表中哪一列的热力学性质的相关数据被绘制成图形输出

Plot column ? /2/: <1 or 2 or 3 or 4 or 5 or 6>

确定输出图形中 Y 轴所代表的热力学性质,同时,列表中的所有热力学性质和输出图形中 Y 轴的设置将以数据图形的格式写入.EXP 文件.默认列表中的第 2 列的热力学性质为热容,第 3 列为焓,第 4 列为熵,第 5 列为吉布斯自由能,附加的第 6 列为用户输入的函数.列表将在屏幕上照常出现,随后图形将在屏幕上显示,其后跟随一个 POST:提示,POST 模块自动打开,用来优化输出图形的所有类型的 POST 模块命令可能会被使用.这包括设定 X,Y 轴的比例,改变 X,Y 轴代表的性质等等.POST:提示中的 BACK 或 EXIT 命令总会指引你返回到 TAB 模块.

输出事例 1: 对于 FCC 合金相的一固定组成的非理想溶液相 [Fe0.80,Cr0.10,Ni0.0995,O0.005] [C0.05,N0.05,VA0.90] (使用 SSOL2 数据库),下列表格是在提示“Output file /SCREEN/”下,通过输入<RETURN>命令得到的:

---

```

O U T P U T F R O M T H E R M O - C A L C
2002.10.23 11.55.46
Phase : FCC Pressure : 100000.00
Specie: CR1/--2

T Cp H S G
(K) (Joule/K) (Joule) (Joule/K) (Joule)

```



## Thermo-Calc 用户指导书

```


298.15 2.70517E+01 6.23824E+03 4.40241E+01 -6.88755E+03
300.00 2.70889E+01 6.28832E+03 4.41916E+01 -6.96915E+03
400.00 2.87304E+01 9.08420E+03 5.22235E+01 -1.18052E+04
500.00 2.99904E+01 1.20222E+04 5.87742E+01 -1.73649E+04
600.00 3.10889E+01 1.50770E+04 6.43408E+01 -2.35275E+04
700.00 3.21116E+01 1.82375E+04 6.92106E+01 -3.02100E+04
800.00 3.30994E+01 2.14982E+04 7.35633E+01 -3.73524E+04
900.00 3.40742E+01 2.48569E+04 7.75182E+01 -4.49094E+04
1000.00 3.50483E+01 2.83130E+04 8.11586E+01 -5.28456E+04
1100.00 3.60268E+01 3.18667E+04 8.45449E+01 -6.11327E+04
1200.00 3.70143E+01 3.55187E+04 8.77219E+01 -6.97476E+04
1300.00 3.80149E+01 3.92700E+04 9.07241E+01 -7.86713E+04
1400.00 3.90311E+01 4.31222E+04 9.35784E+01 -8.78875E+04
1500.00 4.00649E+01 4.70768E+04 9.63064E+01 -9.73827E+04
1600.00 4.11174E+01 5.11358E+04 9.89256E+01 -1.07145E+05
1700.00 4.21896E+01 5.53010E+04 1.01450E+02 -1.17165E+05
1800.00 4.33555E+01 5.95774E+04 1.03894E+02 -1.27433E+05
1900.00 4.58528E+01 6.40379E+04 1.06306E+02 -1.37943E+05
2000.00 4.75402E+01 6.87138E+04 1.08704E+02 -1.48694E+05

```

(Note that for a phase, as either an end-member or real solution, the listed specie name is irrelevant!).

输出事例2: 将 H<sub>2</sub> 作为纯物质(使用 SSUB3 数据库), 以下表格是在“Output file /SCREEN/”提示下通过输入<RETURN>命令得到的, 输出图形是在“Plot column /2/”提示下输入数字 5 生成的:

```

O U T P U T F R O M T H E R M O - C A L C
2002.10.23 14. 5.26

Phase : GAS Pressure : 100000.00
Specie: H2

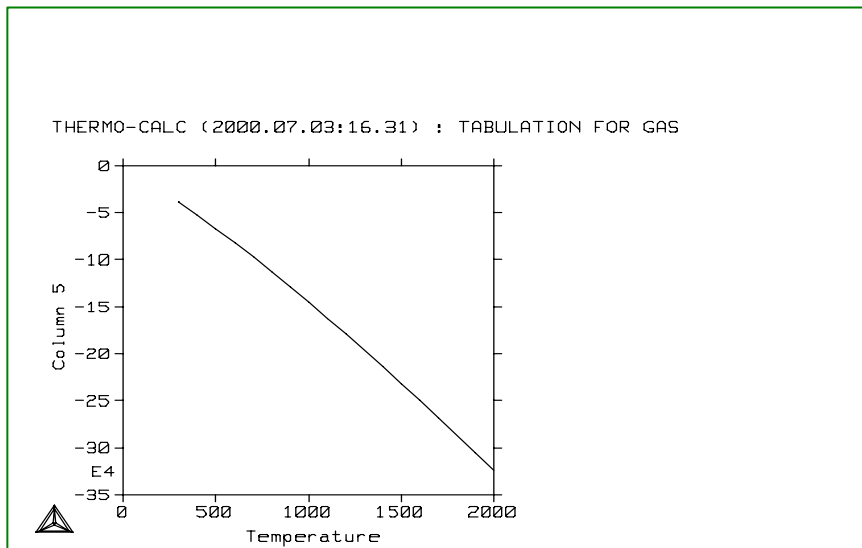
T Cp H S G
(K) (Joule/K) (Joule) (Joule/K) (Joule)

298.15 2.88369E+01 3.17684E-06 1.30680E+02 -3.89622E+04
300.00 2.88473E+01 5.33580E+01 1.30858E+02 -3.92042E+04
400.00 2.91591E+01 2.95686E+03 1.39209E+02 -5.27268E+04
500.00 2.92650E+01 5.87874E+03 1.45729E+02 -6.69856E+04

```

|         |             |             |             |              |
|---------|-------------|-------------|-------------|--------------|
| 600.00  | 2.93441E+01 | 8.80908E+03 | 1.51071E+02 | -8.18336E+04 |
| 700.00  | 2.94579E+01 | 1.17488E+04 | 1.55602E+02 | -9.71730E+04 |
| 800.00  | 2.96320E+01 | 1.47027E+04 | 1.59547E+02 | -1.12935E+05 |
| 900.00  | 2.98786E+01 | 1.76776E+04 | 1.63050E+02 | -1.29068E+05 |
| 1000.00 | 3.02043E+01 | 2.06810E+04 | 1.66214E+02 | -1.45533E+05 |
| 1100.00 | 3.05319E+01 | 2.37171E+04 | 1.69108E+02 | -1.62302E+05 |
| 1200.00 | 3.09281E+01 | 2.67897E+04 | 1.71781E+02 | -1.79348E+05 |
| 1300.00 | 3.13615E+01 | 2.99040E+04 | 1.74274E+02 | -1.96652E+05 |
| 1400.00 | 3.18115E+01 | 3.30625E+04 | 1.76614E+02 | -2.14197E+05 |
| 1500.00 | 3.22641E+01 | 3.62664E+04 | 1.78824E+02 | -2.31970E+05 |
| 1600.00 | 3.27094E+01 | 3.95151E+04 | 1.80921E+02 | -2.49958E+05 |
| 1700.00 | 3.31406E+01 | 4.28078E+04 | 1.82917E+02 | -2.68151E+05 |
| 1800.00 | 3.35526E+01 | 4.61426E+04 | 1.84823E+02 | -2.86539E+05 |
| 1900.00 | 3.39415E+01 | 4.95175E+04 | 1.86648E+02 | -3.05113E+05 |
| 2000.00 | 3.43045E+01 | 5.29300E+04 | 1.88398E+02 | -3.23866E+05 |

TAB:



图形来自于 TAB 模块,展示了纯物质  $H_2$  的吉布斯自由能(输出列表中第 5 列的热力学性质)与温度(K)之间的关系(从 SSUB 数据库中检索数据).图形可在 POST 模块

中优化.

## 7.3.2 TABULATE\_REACTION

**命令描述:** 此可以将一个化学反应的热力学性质变化绘制成表格,或者将某一被选定的热力学性质的变化依照温度绘制成图形或保存为实验性文件(扩展名为.EXP),热力学数据将从 SSUB 数据库自动检索(默认),或者从通过 SWITCH\_DATABASE 命令设定的当前数据库(因此在此命令之前没有必要使用 TDB 模块)中检索.通过 TDB 模块中的 SWITCH\_DATABASE 命令,用户可以选定其他任何数据库

一个重要的原则就是要时刻谨记确定一个反应:

- 1) 通过输入反应物和生成物,来确定一个反应.比如  $\text{Ga}+\text{S}=\text{GaS}$ ,  $5\text{Al}+2\text{Fe}=\text{Al}_5\text{Fe}_2$ . 在 UNIX/Linux 系统环境下,对化学方程式不区分大小写 (比如  $\text{ga}+\text{s}=\text{GaS}$ ,  $5\text{Al}+2\text{Fe}=\text{al}_5\text{fe}_2$ ); 但在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 系统环境下,TAB 模块只承认大写形式,如  $\text{GA}+\text{S}=\text{GAS}$ ,  $5\text{AL}+2\text{FE}=\text{AL}_5\text{FE}_2$ .
- 2) 只有一个字母的元素其后必须跟随一个化学计量系数,即使系数是 1 也不例外.记号 CO 将被当作钴,所以一氧化碳必须写作 C1O1 (或者 O1C1).
- 3) 在当前使用的数据库中,所有的反应物和生成物都必须确定为纯化学计量物种.换句话说,反应只将已确定的纯化学计量物种作为反应物和生成物,例如,如果数据库中没有  $\text{Al}_5\text{Fe}_2$  的纯化学计量物种 (如 Al 和 Fe (不是  $\text{Al}_5\text{Fe}_2$ )) 可能被确定为物种,并且  $\text{Al}_5\text{Fe}_2$  可能被确定双亚点阵纯化学计量相图,而不是一个单一亚点阵的纯化学计量相图[ $\text{Al}_5\text{Fe}_2$ ],因此,反应  $5\text{AL}+2\text{FE}=\text{AL}_5\text{FE}_2$  不会有列表输出.
- 4) 应当确保一纯化学计量相图的吉布斯自由能表达式与纯化学计量物种一一对应.例如一个数据库含有针对  $1/7 \text{ Al}_5\text{Fe}_2$  公式的函数定义  $\text{GAL}_5\text{FE}_2$ ,关系式  $\text{G}(\text{Al}_5\text{Fe}_2)=7*\text{GAL}_5\text{FE}_2$  必须事先确定.否则,所列出的关于反应  $5\text{AL}+2\text{FE}=\text{AL}_5\text{FE}_2$  的热力学性质是错误的.

**Synopsis:**           TABULATE\_REACTION

**Ensuing Prompt:** Same reaction? /Y/: <Y or N>

假如程序中含有至少一个通过 ENTER\_REACTION 或者 TABULATE\_REACTION 命令确定的反应,提示将出现,如果回答 Y(是),确定反应的下一步提示将不会出现.

Reaction: <chemical reaction equation>

& <RA+RB=PC+PD>    (一个长的反应可以多行输入,反应以“;”或者一条空格线结束.)

(a list showing the used database, defined elements, getting-data sequence, references, etc.)

Pressure /100000/: <pressure of interest, in pa>

确定常压条件, 单位为 Pa.

Low temperature limit /298.15/: <T-low, in K>

确定起始温度, 单位为 K.

High temperature limit /298.15/: <T-high, in K>

确定终了温度, 单位为 K.

Step in temperature /100/: <T-step>

确定输出列表的温度阶差.

Output file /SCREEN/: <RETURN for SCREEN, or type a file name>

如果输入<RETURN>,被选定反应或确定反应一系列基本热力学性质变化将以列表的形式展现出来 (在以下的输出例子中展示), 继而命令结束.

假如输入一个文件名,程序不但会在屏幕上显示列表,而且将列表保存为\*.EXP 或者\*.TAB 文件,继而程序将会提示以下问题:

Graphical output /Y/: <Y or N>

如果回答 N(不),程序将在屏幕上生成列表,并在当前工作域中将列表保存为默认扩展名是.TAB 的简单文本文件.在这种情况下,不会有图形输出.

如果回答 Y(是),程序不但生成具有各种热力学函数的列表,而且会绘制图形并输出,该图形 X 轴代表温度,Y 轴代表列表中被选中的某一列的热力学性质(性质的相关数据在屏幕上用图形显示,并保存为.EXP 文件).随后,程序将进一步询问列表中哪一列的热力学性质的相关数据被绘制成图形输出.

Plot column ? /2/: <1 or 2 or 3 or 4 or 5 or 6>

确定输出图形中 Y 轴所代表的热力学性质,同时,列表中的所有热力学性质和输出图形中 Y 轴的设置将以数据图形的格式写入.EXP 文件.默认列表中第 2 列的热力学性质为热容,第 3 列为焓,第 4 列为熵,第 5 列为吉布斯自由能,附加的第 6 列为用户输入的函数.列表将在屏幕上照常出现,随后图形将在屏幕上显示,其后跟随一个 POST:提示,POST 模块自动打开,用来优化输出图形的所有类型的 POST 模块命令可能会被使用.这包括设定 X,Y 轴的比例,改变 X,Y 轴代表的性质等等.POST:提示中的 BACK 或 EXIT 命令总会指引你返回到 TAB 模块.

**输出事例:** 对于反应  $\text{Ga} + \text{S} = \text{GaS}$  (使用 SSUB 数据库), 以下表格是在提示“Output file /SCREEN/”下通过输入<RETURN>获取的, 图形是提示“Plot column /2/”下通过输入数字 2 生成的:

---

```

O U T P U T F R O M T H E R M O - C A L C
2000. 7. 3 16.54. 0
Reaction: S+GA=GA1S1
S stable as S_S
GA stable as GA_S
GA1S1 stable as GA1S1_S

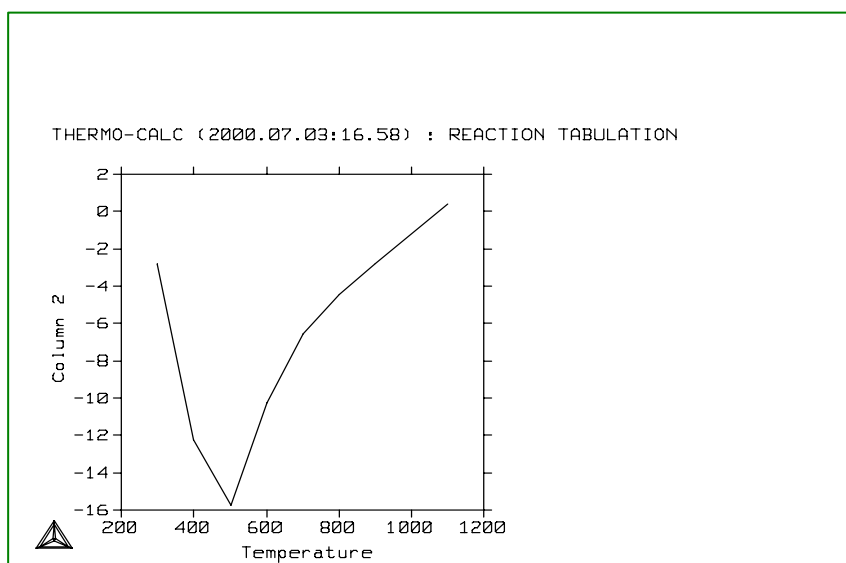
**
T Delta-Cp Delta-H Delta-S Delta-G
(K) (Joule/K) (Joule) (Joule/K) (Joule)

298.15 -2.79489E+00 -2.09200E+05 -1.50580E+01 -2.04710E+05
300.00 -2.87516E+00 -2.09205E+05 -1.50755E+01 -2.04683E+05
302. ---- GA becomes GA_L ,delta-H = 5589.80
367. ---- S becomes S_S2 ,delta-H = 401.00
389. ---- S becomes S_L ,delta-H = 1721.00

```

|         |              |              |              |              |
|---------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 400.00  | -1.22278E+01 | -2.17521E+05 | -4.07488E+01 | -2.01222E+05 |
| 500.00  | -1.57686E+01 | -2.19323E+05 | -4.47280E+01 | -1.96959E+05 |
| 600.00  | -1.02518E+01 | -2.20583E+05 | -4.70410E+01 | -1.92359E+05 |
| 700.00  | -6.58954E+00 | -2.21430E+05 | -4.83534E+01 | -1.87583E+05 |
| 800.00  | -4.46246E+00 | -2.21963E+05 | -4.90686E+01 | -1.82709E+05 |
| 900.00  | -2.82671E+00 | -2.22328E+05 | -4.94995E+01 | -1.77778E+05 |
| 1000.00 | -1.21787E+00 | -2.22530E+05 | -4.97138E+01 | -1.72816E+05 |
| 1100.00 | 3.71702E-01  | -2.22572E+05 | -4.97552E+01 | -1.67841E+05 |

Temperature range exceeded for GA1S1



图形来自于 TAB 模块，展示了反应  $\text{Ga}+\text{S}=\text{GaS}$  的热容 ( $\Delta C_p$ , 列表中第二列热力学性质) 变化和温度之间的关系(从 SSUB 数据库中检索数据)。图形可在 POST 模块中优化。

### 7.3.3 ENTER\_REACTION

**命令描述:** 此命令在以下几个方面与 TABULATE\_REACTION 命令的作用相同: 确定化学反应, 以列表形式展示反应的热力学性质变化, 将列表数据绘制成图形或者保存为实验性文件(扩展名为 .EXP)。程序自动从 SSUB 数据库(默认)或者通过 SWITCH\_DATABASE 命令(因此在使用此命令之前没必要使用 TDB 模块)设定的当前数据库中检索热力学数据。通过使用 TDB 模块中的 SWITCH\_DATABASE 命令用户可以选择使用其他任意数据库。

**使用此命令确定反应的规则与 TABULATE\_REACTION 命令相同(参见 7.3.2 节)。**

**Synopsis:** ENTER\_REACTION

**Ensuing Prompt:** Same reaction? /Y/: <Y or N>

假如程序中含有至少一个通过 ENTER\_REACTION 或者 TABULATE\_REACTION 命令确定的反应, 提示将出现, 如果回答 Y(是), 确定反应的下一步提示将不会出现。

Reaction: <chemical reaction equation>

& <RA+RB=PC+PD> (一个长的反应可以多行输入,反应以“;”或者一条空格线结束.)

(展示所用数据库, 确定元素, 获取数据序列, 及参考资料等的列表)

Pressure /100000/: <pressure of interest, in pa>

Low temperature limit /298.15/: <T-low, in K>

High temperature limit /2000/: <T-high, in K>

Step in temperature /100/: <T-step>

Output file /SCREEN/: <RETURN for SCREEN, or type a file name>

如果输入<RETURN>,被选定反应或确定反应一系列基本热力学性质变化将以列表的形式展现出来(在以下的输出例子中展示), 继而命令结束.

假如输入一个文件名, 程序不但会在屏幕上显示列表, 而且将列表保存为\*.EXP 或者\*.TAB 文件,继而程序将会提示以下问题:

Graphical output /Y/: <Y or N>

如果回答 N(不),程序将在屏幕上生成列表,并在当前工作域中将列表保存为默认扩展名是.TAB 的简单文本文件.在这种情况下,不会有图形输出.

如果回答 Y(是),程序不但生成具有各种热力学函数的列表,而且会绘制图形并输出,该图形 X 轴代表温度,Y 轴代表列表中被选中的某一列的热力学性质(性质的相关数据在屏幕上用图形显示,并保存为.EXP 文件).随后,程序将进一步询问列表中哪一系列的热力学性质的相关数据被绘制成图形输出.

Plot column ? /2/: <1 or 2 or 3 or 4 or 5 or 6>

确定输出图形中 Y 轴所代表的热力学性质,同时,列表中的所有热力学性质和输出图形中 Y 轴的设置将以数据图形的格式写入.EXP 文件.默认列表中第 2 列的热力学性质为热容,第 3 列为焓,第 4 列为熵,第 5 列为吉布斯自由能,附加的第 6 列为用户输入的函数.列表将在屏幕上照常出现,随后图形将在屏幕上显示,其后跟随一个 POST:提示,POST 模块自动打开,用来优化输出图形的所有类型的 POST 模块命令可能会被使用.这包括设定 X,Y 轴的比例,改变 X,Y 轴代表的性质等等.POST:提示中的 BACK 或 EXIT 命令总会指引你返回到 TAB 模块.

### 7.3.4 SWITCH\_DATABASE

**命令描述:** TAB 模块总是从 SSUB 数据库中检索物质、特定反应的反应物/生成物纯物质相或者是溶液相的热力学数据.然而用户可以从另外一个数据库中选择热力学数

据(例如 SSOL 溶液数据库, TCFE Steels/Fe-合金数据库). 自从 TCC 版本 N 以来,通过使用 SWITCH\_DATABASE 命令,使之成为可能.

此命令将当前数据库切换至一个新的数据库,并重新初始化 TAB 模块,以确定物质或者反应,并为存储检索数据开辟 GES5 工作空间.所有被原始数据库初始化文件事先确定的数据库可以通过按<RETURN>键列出,不需要输入其他指令.通过首先给定命令语句 USER,然后输入数据库名(假如该数据库不在当前工作区,还要输入它的正确路径),用户可以提供自己的数据库.

此命令(当要求使用另一个数据库来获取列表时)必须在执行 TAB 的 TABULATE\_SUBSTANCE 命令来获取物种和 TABULATE\_REACTION 命令来获取反应之前使用.

当一个事先确定的数据库或者某一合适的 USER 数据库被打开后,TDB 命令 GET\_DATA 将自动执行,因此 TAB 模块将立即在屏幕上显示如下的一条信息(以免 PSUB 数据库已经确定):

```
TAB: SW PSUB
THERMODYNAMIC DATABASE Module running on PC/Windows NT
Current database: TC Public Substances Database

VA DEFINED
REINITIATING GES5
VA DEFINED
ELEMENTS
SPECIES
PHASES
PARAMETERS ...
FUNCTIONS
-OK-
TAB:
```

提要 1: SWITCH\_DATABASE <new database name>

提要 2: SWITCH\_DATABASE  
相继提示: Database /XYZ/: <new database name>

确定一个合适的数据库名.XYZ代表默认 SSUB 数据库或者上一次打开的当前数据库,假如不给出一个合适数据库名,USER 选项将不会被执行,继而出现以下提示:

```
Use one of these databases

...
PURE4 = SGTE Pure Elements Database v4
...
```



```
SSUB3 = SGTE Substances Database v3
...
USER = user defined database

DATABASE NAME /XYN/: <new database name>
```

选择: new database name --合适的数据库名

说明: DATABASE NAME: 新的数据库可以通过输入事先确定的可用数据库之一的缩写形式确定.为了您的方便,当切换/附加您自己的数据库或者从 TCSAB 或它的代理商那里购买数据库时,您只需要把它添加到数据库初始化文件 TC\_INITD 或已安装 TCC/TCW/DICTRA 包裹文件 initd.tdb 中的特定数据库序列就可以了.请参考 2.2.2.2.2 和 6.2 小节.

如果选定 USER 选项,必须提供一个含有 USER 数据库的确定,它的准确路径的文件.在各种 UNIX/Linux 平台中,某一 USER 数据库或其中已定义了数据库名称的文件名,可在以下提示下使用:

FILENAME: 用于 USER 数据库建立文件的有效文件名或者拥有正确路径的已确定的数据库名.默认文件扩展名为.TDB.

在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下.如果 USER 数据库名或它的正确路径没有在 SWITCH\_DATABASE 命令的同一行输入,或者输入不完整,不正确,一个打开文件的窗口将会出现.因此,路径(在 **Look in** 箱体中)和数据库建立文件名(在 **File name** 箱体中)才可以被合适的确定下来,用户可以打开已选定的 USER 数据库,或者取消窗口操作.随后,程序将列出所有已确定的数据库,用户可以选择其中之一打开或者重新处理 USER 选项.

不同于 TDB 模块中的工作环境,如果某一 USER 数据库已被使用,吉布斯自由能系统也将被初始化,只有 USER 数据库中的数据被检索并作为列表输出.

### 7.3.5 ENTER\_FUNCTION

命令描述: 此命令用来定义一个新的热力学函数以作为输出列表的第六列输出.对于所有被列出的物质和反应来说,最后输入的函数将被作为所有输出列表中的第六列输出,并且可以被绘制成各种图形(如果选择第六列数据作为图形输出).

有限的状态变量,  $G$ ,  $H$ ,  $S$ ,  $T$ ,  $P$ ,  $V$  和  $H_{298}$  可以在函数定义中使用.例如,  $-(G-H)/T$  可以被定义为与物质的熵或反应熵变相类似的一个函数,  $G+T*S-P*V$  可被定义为物质的内能  $U$  或反应的内能变化  $\Delta U$ .

提要: ENTER\_FUNCTION

相继提示: Name: <name>

Function: <definition>

选择: name -- 函数名称(最大值 8 特征)  
 definition --函数定义.一个较长的函数可以多行输入.函数应当以 “;”或空格线结束..

输出事例: 对于纯物质 Fe (使用 SSUB 数据库), 通过输入函数  $G+T*S-P*V$ , 以下表格是在提示“Output file /SCREEN/”下通过按<RETURN>键得到的,图形是在提示“Plot column /2/”下通过输入数字 6 获得:

---

TAB: ENTER-FUNCTION

Name: InEnergy

Function:  $G+T*S-P*V$

&

TAB:TABULATE\_SUBSTANCE

Substance (phase): Fe

Pressure /100000/:

Low temperature limit /298.15/:

High temperature limit /2000/:

Step in temperature /100/:

Output file /try1/:

Graphical output? /Y/:

Plot column? /2/: 6

O U T P U T F R O M T H E R M O - C A L C  
 2000. 7. 6 12.31. 3

Column 6: InEnergy  $G+T*S-P*V$

Phase : FE\_S Pressure : 100000.00

Specie: FE

\*\*\*\*\*

\*\*

| T   | Cp        | H       | S         | G       | InEnergy |
|-----|-----------|---------|-----------|---------|----------|
| (K) | (Joule/K) | (Joule) | (Joule/K) | (Joule) |          |

\*\*\*\*\*

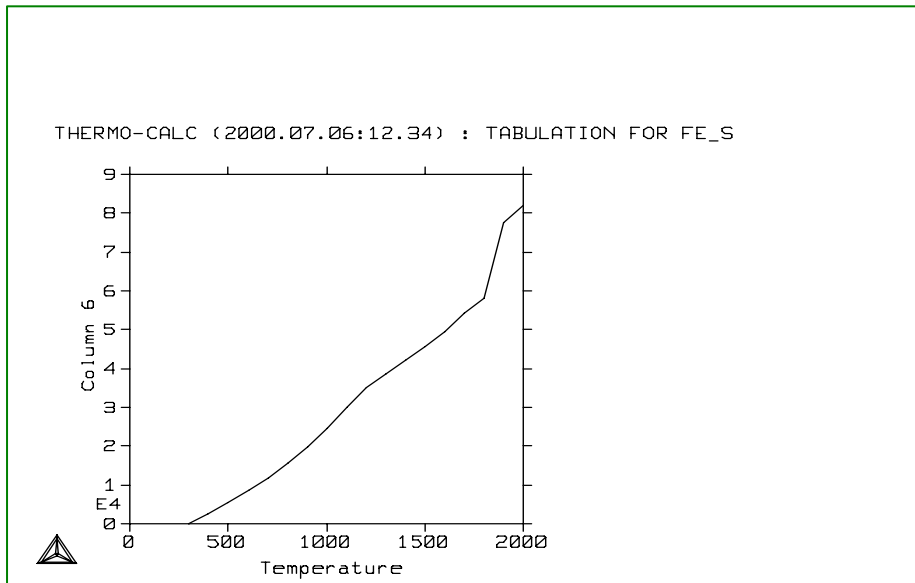
\*\*

|        |             |             |             |              |             |
|--------|-------------|-------------|-------------|--------------|-------------|
| 298.15 | 2.48446E+01 | 2.17972E-06 | 2.72800E+01 | -8.13353E+03 | 2.17972E-06 |
| 300.00 | 2.48905E+01 | 4.60049E+01 | 2.74338E+01 | -8.18414E+03 | 4.60049E+01 |
| 400.00 | 2.71299E+01 | 2.64957E+03 | 3.49085E+01 | -1.13138E+04 | 2.64957E+03 |
| 500.00 | 2.93561E+01 | 5.47211E+03 | 4.11976E+01 | -1.51267E+04 | 5.47211E+03 |
| 600.00 | 3.19293E+01 | 8.53245E+03 | 4.67701E+01 | -1.95296E+04 | 8.53245E+03 |
| 700.00 | 3.50985E+01 | 1.18777E+04 | 5.19207E+01 | -2.44667E+04 | 1.18777E+04 |

```

800.00 3.92042E+01 1.55830E+04 5.68623E+01 -2.99068E+04 1.55830E+04
900.00 4.49645E+01 1.97726E+04 6.17903E+01 -3.58387E+04 1.97726E+04
1000.00 5.42147E+01 2.46891E+04 6.69619E+01 -4.22728E+04 2.46891E+04
1100.00 4.55851E+01 2.99025E+04 7.19412E+01 -4.92328E+04 2.99025E+04
$ Stable phase is FE_S2
1200.00 3.40840E+01 3.51037E+04 7.64466E+01 -5.66322E+04 3.51037E+04
1300.00 3.49398E+01 3.85549E+04 7.92086E+01 -6.44162E+04 3.85549E+04
1400.00 3.57994E+01 4.20918E+04 8.18293E+01 -7.24692E+04 4.20918E+04
1500.00 3.66636E+01 4.57149E+04 8.43287E+01 -8.07780E+04 4.57149E+04
1600.00 3.75330E+01 4.94247E+04 8.67226E+01 -8.93314E+04 4.94247E+04
$ Stable phase is FE_S3
1700.00 4.05217E+01 5.41173E+04 8.95609E+01 -9.81363E+04 5.41173E+04
1800.00 4.12595E+01 5.82055E+04 9.18975E+01 -1.07210E+05 5.82055E+04
$ Stable phase is FE_L
1900.00 4.60000E+01 7.74165E+04 1.02377E+02 -1.17099E+05 7.74165E+04
2000.00 4.60000E+01 8.20165E+04 1.04736E+02 -1.27456E+05 8.20165E+04

```



图形来自  
TAB 模块，  
展示了纯物  
质 Fe 的输入  
函数

G+T\*S-P\*V (U, 输出列表中的第六列) 与温度 (T) 之间的关系 (从 SSUB 数据库中检索数据)。图形可在 POST 模块中优化。

### 7.3.6 TABULATE\_DERIVATIVES

**命令描述:** 此命令主要用于系统纠错,对于经验丰富的用户比较适用.它自动计算一纯物质相或给定组成溶液相的部分衍生物.注意,它与化学势不同.

在使用此命令前,用户必须事先确定系统,并且从 TDB 某一合适的溶液数据库中获取热力学数据.相的名称可用大写,小写或者大小写混合形式表示,并且可以缩写,直至

它是特定的,如 fcc, BCC, Liq, cem, Al<sub>5</sub>Fe<sub>2</sub> 等等, 正如使用 SSOL 数据库获取列表。或者 GAS, Fe-S, wustite, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-hem 等等, 正如 SSOL 数据库的使用。当程序提示输入各种有可能占据亚点阵的物质的点-小数时, 模块将有选择性的仔细检查一个特定的亚点阵或者所有的可能的亚点阵以获取特定的相, 并且仔细检查当前系统(已确定)的整个框架(包括所有已确定的元素和物种, 如果当前数据库需要, 还应包括默认的确切缺口和电子)。Therefore, one can tabulate thermodynamic properties for a pure phase, or for a solution phase as a pure end-member (with a composition definition for the corresponding non-interacting species on all necessary sublattices in the end-member), or for a solution phase as a real solution (with a composition definition for related interacting species on all necessary sublattices in the solution).

提要: TABULATE\_DERIVATIVES

相继提示: Phase Name /XXXX/: <相名称>

确定一纯物质相或溶液相的相名称, 比如 FCC, CEMENTITE, LIQUID, SLAG, AQUEOUS, GAS, Fe-S, Wustite, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Hematite, 等等 XXXX is the last phase the TAB module accounted for. 程序会自动提示其他选项和确定相组成的必要输入。

对于纯组分相(如 Fe-S, Wustit 和 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Hematite), 不需要对组分进行进一步的限定。对于单一亚点阵的溶液系相(如 AQUEOUS 溶液, GAS 混合物和 SLAG 溶液), 它需要输入 n-1 组相组分的点-小数数据(在当前限定的系统中, 如果确定相含有 n 种物质, 应包括所有的已确定的元素和物种。如当前数据库需要, 还应包括默认的确切缺口和电子), 剩余的组分比例数值将自动分配给第 n 种物质。注意所输入点小数之和不能超过 1。例如, 你可在 Fe-Cr-Ni-C-N-O 结构的某一 LIQUID 溶液相(来自 SSOL 数据库)中看到以下提示和输入(注意, 剩余的组分比例数值将默认的分配给未提示物种 Ni)。

```
FRACTION OF CONSTITUENT (RETURN FOR PROMPT): <RETURN>
C /1/: .05
CR /1/: .1
FE /1/: <RETURN>
SUM OF FRACTIONS EXCEED UNITY, PLEASE REENTER
FE /1/: <.8>
N /1/: .005
```

对于含有两个或者两个以上的亚点阵的溶液系相(如 FCC 合金溶液和 ION\_LIQ 离子液体溶液), 系统首先询问哪一个亚点阵的组分点小数数据将被确定: 对于所有可能的亚点阵的默认值为 0, 对于确定的亚点阵为某一给定的正数(当然此数字对于当前确定相来说必须合理, 比如它必须小于相总的亚点阵数目), 然后对于给定亚点阵或者所有亚点阵, 如果确定相中的亚点阵含有 n 种物质, 它会在每一个亚点阵中针对可能

组分的点小数输入做 n-1 次提示,亚点阵的第 n 种物质将被自动分配剩余的组分比例.例如 Fe-Cr-Ni-C-N-O 结构中的某一 FCC 溶液相中,你会看到以下提示和输入(注意,亚点阵 1 的未提示物质 O 和亚点阵 2 的未提示物质 VA 将被默认的分配剩余组分数量比例).

```
SPECIFY SUBLATTICE (0 FOR ALL) /0/: <RETURN>
 FRACTIONS IN SUBLATTICE 1
CR /1/: .1
FE /1/: .8
NI /1/: .0995
 FRACTIONS IN SUBLATTICE 2
C /1/: .05
N /1/: .05
```

Temperature /2000/: <temperature of interest, in K>  
确定温度条件,单位为 K.

Pressure /100000/: <pressure of interest, in pa>  
确定恒压条件,单位为 Pa.

**输出事例:** 对于 Fe-Cr-Ni-C-N-O 中的 FCC 相 (使用 SSOL 数据库),以下表格是在特定的组成比例下得到的:

---

```
TAB: TAB_DER
Phase name /BCC/: FCC
SPECIFY SUBLATTICE (0 FOR ALL) /0/:
 FRACTIONS IN SUBLATTICE 1
CR /1/: .1
FE /1/: .8
NI /1/: .3
 SUM OF FRACTIONS EXCEED UNITY, PLEASE REENTER
NI /0/: .0995
 FRACTIONS IN SUBLATTICE 2
C /1/: .05
N /1/: .05
Temperature /1800/:
Pressure /100000/:

Gibbs energy: -1.27432533E+05
Helmholz energy: -1.27433205E+05
Enthalpy: 5.95773994E+04
Internal energy: 5.95767279E+04
Entropy: 1.03894407E+02
```

## Thermo-Calc 用户指导书

Molar volume: ..... 6.71473258E-06  
Thermal expansivity: ..... 7.63886416E-05  
Isothermal compressibility: ..... 6.02925387E-12  
Heat capacity at constant pressure: 4.33555074E+01

First partial derivative with respect to CR in sublattice 1

of Gibbs energy: ..... -1.26034739E+05  
of enthalpy: ..... 4.63000206E+04  
of entropy: ..... 9.57415334E+01  
of volume: ..... 6.87203263E-06

Second partial derivative of Gibbs energy with respect to also

|    |       |                 |
|----|-------|-----------------|
| CR | in 1: | 1.54392858E+05  |
| FE | in 1: | -1.53353158E+04 |
| NI | in 1: | -1.71750366E+04 |
| O  | in 1: | 0.00000000E+00  |
| C  | in 2: | -1.82016870E+05 |
| N  | in 2: | -3.73062665E+05 |
| VA | in 2: | -9.36260878E+04 |

First partial derivative with respect to FE in sublattice 1

of Gibbs energy: ..... -1.02869265E+05  
of enthalpy: ..... 6.11738912E+04  
of entropy: ..... 9.11350866E+01  
of volume: ..... 7.53441165E-06

Second partial derivative of Gibbs energy with respect to also

|    |       |                 |
|----|-------|-----------------|
| FE | in 1: | 1.82508696E+04  |
| NI | in 1: | -3.07043434E+03 |
| O  | in 1: | 0.00000000E+00  |
| C  | in 2: | -1.36027071E+05 |
| N  | in 2: | -2.13007485E+05 |
| VA | in 2: | -1.11741180E+05 |

First partial derivative with respect to NI in sublattice 1

of Gibbs energy: ..... -1.32427029E+05  
of enthalpy: ..... 5.21563580E+04  
of entropy: ..... 1.02546326E+02  
of volume: ..... 0.00000000E+00

Second partial derivative of Gibbs energy with respect to also

|    |       |                 |
|----|-------|-----------------|
| NI | in 1: | 1.48390257E+05  |
| O  | in 1: | 0.00000000E+00  |
| C  | in 2: | -7.70620431E+04 |
| N  | in 2: | -1.61551726E+05 |
| VA | in 2: | -1.12772206E+05 |

## Thermo-Calc 用户指导书

First partial derivative with respect to O in sublattice 1

|                  |       |                 |
|------------------|-------|-----------------|
| of Gibbs energy: | ..... | -2.62929308E+05 |
| of enthalpy:     | ..... | 5.02555370E+04  |
| of entropy:      | ..... | 1.73991581E+02  |
| of volume:       | ..... | 0.00000000E+00  |

Second partial derivative of Gibbs energy with respect to also

|    |       |                 |
|----|-------|-----------------|
| O  | in 1: | 2.99322360E+07  |
| C  | in 2: | 0.00000000E+00  |
| N  | in 2: | 0.00000000E+00  |
| VA | in 2: | -1.82377137E+05 |

First partial derivative with respect to C in sublattice 2

|                  |       |                 |
|------------------|-------|-----------------|
| of Gibbs energy: | ..... | -1.59508417E+05 |
| of enthalpy:     | ..... | 1.21269096E+05  |
| of entropy:      | ..... | 1.55987507E+02  |
| of volume:       | ..... | 1.06885187E-05  |

Second partial derivative of Gibbs energy with respect to also

|    |       |                 |
|----|-------|-----------------|
| C  | in 2: | 2.99322360E+05  |
| N  | in 2: | -1.90144000E+04 |
| VA | in 2: | -2.78465070E+04 |

First partial derivative with respect to N in sublattice 2

|                  |       |                 |
|------------------|-------|-----------------|
| of Gibbs energy: | ..... | -2.39671400E+05 |
| of enthalpy:     | ..... | 4.04456947E+04  |
| of entropy:      | ..... | 1.55620608E+02  |
| of volume:       | ..... | 0.00000000E+00  |

Second partial derivative of Gibbs energy with respect to also

|    |       |                 |
|----|-------|-----------------|
| N  | in 2: | 2.99322360E+05  |
| VA | in 2: | -3.30383665E+04 |

First partial derivative with respect to VA in sublattice 2

|                  |       |                 |
|------------------|-------|-----------------|
| of Gibbs energy: | ..... | -9.52042686E+04 |
| of enthalpy:     | ..... | 5.37142294E+04  |
| of entropy:      | ..... | 8.27324989E+01  |
| of volume:       | ..... | 6.86700739E-06  |

Second partial derivative of Gibbs energy with respect to also

|    |       |                |
|----|-------|----------------|
| VA | in 2: | 1.66290200E+04 |
|----|-------|----------------|

TAB:

---



### 7.3.7 LIST\_SUBSTANCES

**命令描述:** 此命令可以在当前数据库中列出由一组特定元素组成的所有物种,这在 TABULATE\_SUBSTANCE 命令中确定物质为纯物种很有帮助.

**提要:** LIST\_SUBSTANCES

**相继提示:** With elements /\*/ <\* or a set of elements>  
确定组成各种物质的元素. \*意味着当前数据库中所有元素.

如果一些元素已经确定,程序会提示如何用这些元素列出物种.

Exclusively with those elements /Y/: <Y or N>

当前数据库中所有物种将被检索,如果问题答案是 Y(默认),其他任何元素都不会被检索,那些明确说明的除外.如果回答 N,至少含有一种确定元素的所有物种将被列出.

**输出事例:** 对于 SSOL 数据库来说,不同的选项将会得到不同的列表,如下所示:

---

```
TAB:l-sub
With elements /*/:
VA AG AL
AM AS AU
B BA BE
BI BR C
CA CD CE
CL CO CR
CS CU DY
ER EU F
FE GA GD
GE H HF
HG HO I
IN IR K
LA LI LU
MG MN MO
N NA NB
ND NI NP
O OS P
PA PB PD
PR PT PU
RB RE RH
RU S SB
SC SE SI
```

```

SM SN SR

TA TB TC

TE TH TI

TL TM U

V W Y

YB ZN ZR

C1 C2 C3

C4 C5 C6

C7 N2 O2

P1 P2 P4

NA/+1 K/+1 CL/-1

H2O H1/+ LI1/+

CS1/+ RB1/+ O1H1/-

F1/- BR1/- I1/-

H1/+1 H1O1/-1 SI1O2

CA1O1

TAB:l-sub

With elements /*/: fe cr ni c n o

Exclusivly with those elements? /Y/:

C CR FE

N NI O

C1 C2 C3

C4 C5 C6

C7 N2 O2

TAB:l-sub fe cr ni c n o

Exclusivly with those elements? /Y/: n

C CR FE

N NI O

C1 C2 C3

C4 C5 C6

C7 N2 O2

H2O O1H1/- H1O1/-1

SI1O2 CA1O1

TAB:

```

## 7.4 其他命令

### 7.4.1 SET\_ENERGY\_UNIT

**命令描述:** 此命令可以将当前计算操作的所有输出（表格，图形和文件）的能量单位设定为卡或者焦耳。

**提要 1:** SET\_ENERGY\_UNIT <单位>

提要2: SET\_ENERGY\_UNIT  
 相继提示: 能量单位 (C 为卡, J 为焦耳) /J/: <单位>  
 选择: 单位 -- C (卡) or J (焦耳)

## 7.4.2 SET\_PLOT\_FORMAT

命令描述: 当结果以图形的方式绘制在屏幕上或者文件保存为 exp 和 TAB 文件格式时, 此命令设定图形的输出 (绘制) 格式, 重要说明: 此命令不同于 POST 模块中的 SET\_PLOT\_FORMAT 命令, 但与 SYS 监视器中的 SET\_PLOT\_FORMAT 命令相似。

有了此命令, 用户可以对不同的图形处理器设置图形输出格式, 默认单元 (对于 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 系统来说为 1, 对于 Linux 和所有类型的 UNIX 平台来说为 9) 可能会因为 SYS 监视器中的 SET\_PLOT\_FORMAT 命令而改变, 或者被你的 TC.INI 文件更改。

提要: SET\_PLOT\_FORMAT <单元>

选择: 单元----图形在屏幕上显示时, 默认设定单元为 1 或 9, 其他文件皆作为 EXP 和 TAB 文件输出。

## 7.4.3 MACRO\_FILE\_OPEN

命令描述: 在一个简单的文本文件 (一般在 TCC 中默认扩展名为 “TCM”, 在 DICTRA 中为 “DCM”) 中, 使用 MACRO 预定义一系列的命令并随后使用它执行这些命令的操作是十分方便和容易的. 此命令可在多种模块中运行 (TCC 软件中的 SYS, POLY, PARROT 和 TAB 模块; DICTRA 软件中的 SYS, POLY 和 DICTRA\_Monitor 模块)。

在做仅有稍微变化(在系统定义,条件,图形绘制设置方面)的相同/类似计算时,这十分有用.使用这一特点从一个评估中计算相图是一个很好的例子.有了 MACRO 文件,各种合法的 TCC(和 DICTRE)命令都可存储在该文件中,你只需要在文件名后输入 MACRO 命令就可以完成此操作.

MACRO 文件可含有任意的合法 TCC(和 DICTRE)命令.MACRO 以命令 EXIT 终止,使用 SET\_INTERACTIVE 命令介入到 SYS,GES,POLY,PARROT 或者 POST 模块中.

MACRO 的一种有趣功能:能和用户直接交流.因此你可以通过以下方式输入:

```
GO POLY-3
SET AXIS VAR 2 T
@?Low-temperature-limit
@?High-temperature-limit
```

MACRO 将会在“@?”处停止,在屏幕上“?”后输入正文,然后等待用户输入.它会把用户输入作为 Thermo-Calc 程序输入;在这种情况下, in this case values of lower and higher axis limits.

你可以获得 MACRO 变量,记作#1, #2, 等等,最多 9 个变量。他们可以通过以下命令赋值:

```
@#3First element?
```

这将内容写在“@#3”后面作为对用户的提示,并等待用户输入,输入的内容将会赋给 MACRO 变量 3, 你可在 MACRO 的不同地方使用这些变量,例如:

```
DEFINE-SYSTEM ##3
```

MACRO 变量 3 内容的文本拷贝将被插入到“##3”,你也可以在更复杂的命令中使用它.

```
SET AXIS VAR 1 x(##3) 0 1,,,
```

命令将 MACRO 变量 3 的摩尔分数设定为轴 1.

再次注意,当在 POLY, POST, SYS, GES 或 PARROT 模块中时,MACRO 命令的终止必须使用 SET\_INTERACTIVE 命令.

一个 MACRO 文件可以在“@&”处有一次暂停,但通过在 MACRO 文件名后输入非 y 字母可以阻止任何暂停中的停止.

一个 MACRO 文件中可能含有很多以“@@”符号开头的解释行.这些解释行在处理 MACRO 文件时提供了很大帮助,但它们不被当作是命令行,也因此不会对被称为 TCC 的 Thermo-Calc 命令的运行产生影响.

一个 MACRO 文件可由 TCC 软件自动生成,如果在 SYS 模块中使用 SET\_LOG\_FILE 命令,并且 \*.LOG 文件名在命令 SYS/TDB/TAB/GES/POLY/POST/PARROT/ED-EXP 或特殊的模块命令之前已经给定,这样的 \*.LOG 文件是一个简单的文本文件,使用任一简单文本编辑器(如 Notepad, Wordpad, PFE, Emacs, vi 等等),都可以对它进行进一步的编辑:如删除一些命令行,修改一些命令,设定和限定(定义),增加一些暂停点,增加

一些以“@@”符号开头的解释行,等等.然后可将它保存为标准扩展名为“TCM”的 MACRO 文件。

有经验的用户也可以使用 TCC (和 DICTRA) 以外的任何文本编辑器直接书写或编辑一个合适的 MACRO 文件进行计算和模拟。

一个 MACRO 文件可以拥有五种不同的等级水平, 如: 一个 MACRO 文件可以呼叫另一个 MACRO 文件, 如果一个 MACRO 文件被 SET\_INTERACTIVE 命令终止, 它可以在先前 MACRO 文件的下一个命令处重新开启. 如果该文件被 end-of-file 命令终止, TCC 程序将被中止, 这一极好的特征可被用于许多不同的方面, 尤其是在一段时间内用户在一个相似的材料系统或处理器上执行可能需要很多步计算和模拟的合金上设计操作时, 用户只需要在特定时间运行主 MACRO 文件, 然后就可以有条理有效率的校核/比较/分析结果。

值得一提的是: 通过在 MACRO 文件每一开始处添加 SYS\_Module 命令 SET\_ECHO, 程序将很方便有用的在屏幕上显示 TCC 软件序列操作中的各种指令的细节, 并根据 MACRO 文件执行这些指令。

*提要 1:* MACRO\_FILE\_OPEN <MACRO 文件名>

*提要 2:* MACRO\_FILE\_OPEN

*相继提示:* Macro filename: <MACRO 文件名>  
用 MACRO 命令确定文件名, 默认扩展名为“TCM”。

*说明:* 在 Windows NT/2000/95/98/ME 工作环境下, 假如 MACRO 命令没有给定一个合适的 MACRO 文件名, 屏幕上将会出现一个打开文件窗口, 以至文件的路径 (在 **Look in** 箱体中) 和文件名 (在文件名箱体中) 都可以被确定下来, 如图 8-6 所示。

文件类型 (如文件类型箱体中的 TCM) 不能改变. 通过点击打开按钮, 程序会处理各种正在运行的 Thermo-Calc 命令. 用户也可以取消这样的一个打开文件的窗口任务, 这样当前 MACRO 文件不会被打开。

如果 MACRO 文件中含有可以用来设定 \*.LOG 文件格式, 保存/读取 GES5/POLY3/PARROT 工作空间, 切换 USER 数据库, 编译实验, 生成新的 \*.PAR 文件, 附加实验数据 \*.EXP 文件, 绘制/丢弃图表, 等等, 一个相应的窗口 (例如, 另存为, 打开文件, 打印, 等等.) 如果正如用户所料想的那样 (或者用户准确知道在 MACRO 文件的某一位置, 程序正在执行什么工作). 通过输入文件名 (最好是文件类型的扩展名, 如果文件不在 MACRO 所在的当前工作域, 那么要指明文件合适的正确路径.), 有时还要在相应命令或参数后附带必需的选项, 用户可以略过这些跳出来的窗口。

*附加说明:* 当使用 MACRO 文件在屏幕上绘制图形时, 由于命令 SET\_PLOT\_FORMAT 的使用, 使得绘图环境的默认单元值改变, 因此必须首先再次使用

SET\_PLOT\_FORMAT 命令将绘图环境默认单元值还原,1 (Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME) 或 9 (Linux and 所有类型的 UNIX 平台). 这一点很重要.

若想阅读一个全面的例子,请参考 TCC 安装区域\TCEX\和 TCCR 实例手册中的 TCEX12.TCM. 想更进一步了解 MACRO 的构造,请参考 8.10.26 和 14.2.8 小节.

## 7.4.4 SET\_INTERACTIVE

**命令描述:** 此命令重新设定初始值的输入和输出单元,如键盘和显示器.记住将此命令作为最后一条命令添加到你的 MACRO 文件中.

**提要:** SET\_INTERACTIVE

## 7.5 列表绘制

正如 7.3.1,7.3.2,7.3.3 和 7.3.5 小节所示,将物质、纯物质相或溶液相、以及反应的热力学性质随温度变化制成列表的操作是很方便的.

为了获取某一物质,一纯物质相或溶液相,或者反应的热容或焓随温度变化的列表,必须首先输入 TABULATE\_SUBSTANCE, TABULATE\_REACTION 或 ENTER\_REACTION 命令,然后输入物质,相和它的固定组成,或者是配平了的反应.必须回答有关温度上下限,温度阶差,压强条件的问题,而且问题“Output file”的确认必须使用文件名.

两个问题的回答如下:

Graphical output? /Y/: <Y or N>

如果回答 N(不),程序将在屏幕上生成列表,并在当前工作域中将列表保存为默认扩展名是.TAB 的简单文本文件.在这种情况下,不会有图形输出.

如果回答 Y(是),程序不但生成具有各种热力学函数的列表,而且会绘制图形并输出,该图形 X 轴代表温度,Y 轴代表列表中被选中的某一列的热力学性质(性质的相关数据在屏幕上用图形显示,并保存为.EXP 文件).随后,程序将进一步询问列表中哪一列的热力学性质的相关数据被绘制成图形输出

Plot column? /2/: <1 or 2 or 3 or 4 or 5 or 6>

确定输出图形中 Y 轴所代表的热力学性质,同时,列表中的所有热力学性质和输出图形中 Y 轴的设置将以数据图形的格式写入.EXP 文件.默认列表中第 2 列的热力学性质为热容,第 3 列为焓,第 4 列为熵,第 5 列为吉布斯自由能,附加的第 6 列为用户输入的函数.列表将在屏幕上照常出现,随后图形将在屏幕上显示,其后跟随一个 POST:提示,POST 模块自动打开,用来优化输出图形的所有类型的 POST 模块命令可能会被使用.这包括设定 X,Y 轴的比例,改变 X,Y 轴代表的性质等等.POST:提示中的 BACK 或 EXIT 命令总会指引你返回到 TAB 模块.

如果你想要图形绘制输出,一个含有绘图坐标 X/Y 的\*.EXP 文件,和一个输出列表的\*.TAB 文件,你只需要连续执行相同的命令 TABULATE\_SUBSTANCE (或 TABULATE\_REACTION) 两次 (在两次“Output file”操作下输入不同的文件名) 就可以实现。



## 8 平衡计算模块(POLY)

### 8.1 引言

关于热力学平衡的知识对于理解材料的性质和变化过程十分重要。通过含有热力学模型参数的数据库，可以预测这些性质，同时，也可以得到扩散控制相变和其它动力学过程的驱动力。

利用功能全面的**平衡计算模块 POLY<sup>U</sup>**，用户可以计算各种平衡和相图，特别是多组元相图。因此，它是新材料和变化过程设计的重要工具。由于目前的 POLY 模块是第三版，因此在 Thermo-Calc 软件中它被称为 POLY\_3。

通过 POLY 模块，用户可以使用各种数据库，因此，它可以用于合金或者陶瓷体系，气相平衡和包含多相交互作用的水溶液体系等。自 TCCN 版本以来，一个单独的体系中可以定义多达 40 种元素和 1000 种物种(以前的版本中可以定义 20 种元素和 400 种物种)用于平衡计算。

为了向用户提供最灵活的工具，软件开发人员做了相当多的工作。平衡计算时，所有的标准热力学状态变量都可以被设定为状态；绘制图时，它们都可以被设定为轴。另外，POLY 模块的一个独特的功能是可以将一个单独的相的成分或者任何一性质设定为状态。任何一个状态变量都可以随着轴变化，从而生成一个图。在图的计算过程中，程序存储了所有已经计算的平衡的完整描述，并且，在图中，任何一个状态变量都可以被设定为轴。

在新版本的 Thermo-Calc 软件(TCCR 和 TCW4)中，一个主要的改进是新采用了**全域最小化技术**，它可以保证在所设定的条件下，平衡计算中得到的当前最小值就的最稳定的最小值。

结合 PARROT 模块，POLY 模块也被用于进行实验数据的严格评估，从而建立热力学数据库。POLY 模块采用 GES 模块来建模和操作关于每个相的热力学性质的数据。

以下是 POLY 模块中可采用的命令：

---

POLY\_3:?

```

ADD_INITIAL_EQUILIBRIUM HELP
SELECT_EQUILIBRIUM
AMEND_STORED_EQUILIBRIA INFORMATION
SET_ALL_START_VALUES
BACK LIST_AXIS_VARIABLE SET_AXIS_VARIABLE
CHANGE_STATUS LIST_CONDITIONS SET_CONDITION
COMPUTE_EQUILIBRIUM LIST_EQUILIBRIUM
SET_INPUT_AMOUNTS
COMPUTE_TRANSITION LIST_INITIAL_EQUILIBRIA SET_INTERACTIVE
CREATE_NEW_EQUILIBRIUM LIST_STATUS
SET_MINIMIZATION_OPTIONS
DEFINE_COMPONENTS LIST_SYMBOLS
SET_NUMERICAL_LIMITS

```

---

|                        |                          |                   |
|------------------------|--------------------------|-------------------|
| DEFINE_DIAGRAM         | LOAD_INITIAL_EQUILIBRIUM |                   |
| SET_REFERENCE_STATE    |                          |                   |
| DEFINE_MATERIAL        | MACRO_FILE_OPEN          |                   |
| SET_START_CONSTITUTION |                          |                   |
| DELETE_INITIAL_EQUILIB | MAP                      |                   |
| SET_START_VALUE        |                          |                   |
| DELETE_SYMBOL          | POST                     | SHOW_VALUE        |
| ENTER_SYMBOL           | READ_WORKSPACES          | SPECIAL_OPTIONS   |
| EVALUATE_FUNCTIONS     | RECOVER_START_VALUES     | STEP_WITH_OPTIONS |
| EXIT                   | REINITIATE_MODULE        | TABULATE          |
| GOTO_MODULE            | SAVE_WORKSPACES          |                   |

POLY\_3:

注意: SET\_MINIMIZATION\_OPTIONS 在 TCCR 版本中是新的命令。

#### ***POLY 模块说明书的修订历史:***

|             |                                            |
|-------------|--------------------------------------------|
| 1991 年 3 月  | 第一版 (Bo Jansson 和 Bo Sundman 编辑)           |
| 1993 年 8 月  | 第二次修订版 (J 版本) (Bo Jansson 和 Bo Sundman 编辑) |
| 1996 年 8 月  | 第三次修订版 (L 版本) (Bo Sundman 编辑)              |
| 1998 年 11 月 | 第四次修订版 (M 版本) (Bo Sundman 编辑)              |
| 2000 年 6 月  | 第五次修订扩充版 (Pingfang Shi 编辑)                 |
| 2002 年 11 月 | 第六次修订扩充版 (Pingfang Shi 编辑)                 |
| 2004 年 6 月  | 第七次修订版 (Pingfang Shi 编辑)                   |
| 2006 年 5 月  | 第八次修订扩充版 (Pingfang Shi 编辑)                 |

## 8.2 正文

下面介绍计算平衡或者图的基本步骤。在说明书的特定的章节中, 有详细介绍。

### ***提取数据:***

首先, 必须从 TDB 模块中的相关数据库中提取体系的热力学数据。在某些特定和高级的模块, 例如 BINARY, TERNARY, POURBAIX 和 SCHEIL 模块中, 程序能自动获取必需的热力学数据。在 POLY 模块中, 用户也可以使用命令 DEFINE\_MATERIAL。如果用户进行了计算, 并且存储了计算, 那么用户也可以使用命令 READ 从存储文件中读取数据。

### ***设定状态:***

当用户提取了体系的所有可获得的热力学数据后, 接着必须在 POLY 模块中使用命令 SET\_CONDITION 来设定体系的状态, 从而使多组元体系的自由度为零。如果某个特定的相处于 FIXED 状态, 即处于稳定态, 在这种情况下, 用户也可以使用命令 CHANGE\_STATUS 来设定状态。同时, 用户还可以使用命令 DEFINE\_COMPONENT 和命令 SET\_REFERENCE\_STATE

分别去改变体系组元的定义和它们的参考状态。除了标准态和衍生变量外，用户还可以使用命令 ENTER\_SYMBOL 来定义辅助变量，函数和表。

#### 计算平衡:

在 POLY 模块中，命令 COMPUTE\_EQUILIBRIUM 用于计算多相交互作用体系在一个给定的平衡状态下存在的所有稳定相，而通过命令 LIST\_EQUILIBRIUM 可以显示计算结果。如果计算没有收敛，那么用户可以尝试尽可能简单地设定状态，从而促使计算收敛。最简单的设定状态的方法为确定温度，压强和总成分。即使这不是用户试图计算的，首先设定这些简单的状态来计算一个初始平衡对于以后的计算也很有帮助。然后，用户可以将相状态，焓状态，单个相的成分等设定为状态。然而，用户很容易设定无意义的状态，对于这种情况，除了平衡计算失败外，程序不会提示用户这些状态是不恰当的。

#### 生成图的性质:

在 POLY 模块中，当一个平衡计算收敛后，下一步为设定 STEPPING/MAPPING 轴变量，进行 STEPPING/MAPPING 计算。所有先前定义的标准状态和衍生性质，以及用户自定义的可用于绘制相图和性质图的符号（变量 / 函数 / 表）都在使用命令 STEP 或者 MAP 后生成。

#### 画图:

在后处理程序 POST 模块中绘制相图和性质图。当命令 STEP 或者 MAP 结束后，程序采用一些缺省变量(通常这些变量为 STEPPING 或者 MAPPING 计算前设定的变量)来自动设定 X/Y 轴变量。但是，用户也可以通过命令 SET\_DIAGRAM\_AXIS 自定义 X/Y 轴。另外，通过采用 POST 模块中的各种命令，用户可以进一步改进图形外貌以及以各种图示形式输出生成的图。

## 8.3 基本热力学知识

在单独的“Thermo-Calc 软件系统”文件中，详细介绍了各种在 Thermo-Calc 软件 / 数据库 / 程序界面中采用的热力学术语。

### 8.3.1 体系和相

在热力学中，用户始终都在处理体系。该体系可以是封闭的，也可以是开放的，从而能与环境进行物质，热量和功的交换。在一个多组元体系中，物质总是以一个或者多个稳定相的形式存在。相就是体系中均匀的部分。均匀就是指各处成分，温度，压力，结构相同。在一定的体积中，相同的相可以分开存在，例如空气中的灰尘颗粒。如果一个体系中存在若干个均匀的相，那么该体系为多相体系，而热力学控制了该体系中的多相交互作用。

在一个单独的体系中，可以定义 40 种元素(即 40 种组元)和 1000 种物种(在 TCCN 版本以前的版本中，可以定义 20 种元素和 400 种物种)用于平衡计算。一个单独的溶体相可以包含多达 10 个亚点阵。一个理想的混合相(例如气相)最多可以包含 1000 种物种，而一个非理想的溶体相(例如水溶液，液相，熔渣)最多可以包含 200 种物种(TCCP 版中最多可包含 200 种物种，由 TCCN 版本中的 80 种增长而来)。

### 8.3.2 物种和成分

像文档“Thermo-Calc 软件系统”中的章节 2.2 中提到的那样，一个相的热力学性质的成分相关性可以用一个表达式来描述，该表达式表示该相吉布斯自由能与**成分**分数的关系。相的成分可以是元素[例如 Fe, Si, C, O]，或者像分子一样的集合体，该集合体可以是中性[例如  $\text{Fe}_3\text{C}$ ,  $\text{FeSi}$ ,  $\text{Fe}_{0.87}\text{O}$ ,  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_3\text{COOH}$ ]，也可以带电[例如  $\text{Fe}^{+2}$ ,  $\text{Fe}^{+3}$ ,  $\text{HO}_2^{-1}$ ,  $\text{OH}^{-1}$ ,  $\text{Fe}_2(\text{OH})_2^{+4}$ ]。

所有的这些成分都被称为物种。物种可以被定义为一个或者若干个相的成分，它在特定的相中可以实际存在，也可以是虚构的(从该相的相关热力学模型中假定)。

在建立模型的过程中，使用了一个特殊的物种，即空位，符号为 VA。空位可以作为亚点阵中的成分使用，表示通常为无或者有缺陷的结点。VA 被缺省定义为体系的组元，它的化学势总是被设定为 0。

为了恰当地表示相中的带电物种的化学计量式，使用了另外一个特殊的物种，即电子，符号为 /- (在气相，液相，或者固相中采用) 或者 ZE (在水溶液相中采用)。

在某些数据库的定义中，空位(VA)和电子(在气相，液相，或者固相中采用 /-，在水溶液中采用 ZE)都可以被作为“特殊的元素”输入。只要 ZE (不是 /-) 和 VA 在体系中被定义，它们也都被缺省地当作体系中**特殊的组元**，而只有 ZE 有唯一的化学势和其它热力学性质，通过 GES 模块，使用与水溶液和 REF\_ELECTRODE 相(即假想电极)相关联的合适的模型可以计算这些性质(见章节 8.12)。

因此，一个体系的组元通常为该体系中的元素(特别是对于合金)，但是它也可以是该体系中存在的物种：例如，对于水溶液—自由 Cr-Fe-O-H 体系，体系的组元(除了缺省定义的 VA 外)可以被定义为[Fe, Cr, O 和 H]，或者[Fe, Cr, O<sub>2</sub> 和 H]，或者[FeO, Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, O<sub>2</sub> 和 H<sub>2</sub>]，或者其它的形式；对于水溶液—压力 Cr-Fe-O-H 体系，体系的组元(除了缺省定义的 VA 外)通常被定义为[H<sub>2</sub>O, H<sup>+1</sup>, Cr, Fe 和 ZE]。用户甚至可以定义体系的组元为已定义的元素恰当的组合物(例如 Cr-Fe-C 体系中的 CrC 和 FeC)，以及将电子(/-或者 ZE)作为由元素组合成的组元的化学式的一部分(例如气体混合相中的 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> /-1 和 Fe<sup>+1</sup> /+2，水溶液相中的 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> ZE + 1 和 Fe<sup>+1</sup> ZE - 2)，但是这种组元的参考状态必须总是 SER(稳定元素参考状态)。

注意：对于一个多相交作用体系来说，如果不考虑将 ZE 作为一个特殊的组元，那么体系中组元的数量等于体系中元素的数量；但是对于水溶液多相交作用体系，ZE 被当作体系中一个附加的组元，因此体系中组元的数量等于体系中元素的数量加上一。

### 8.3.3 状态变量

经典的热力学仅处理处于平衡状态的体系，即处于稳定状态的体系，该稳定状态能抑制其内部在一定数目变量限制下的波动，例如温度和成分的变化等。这些在平衡状态有确定值或者性质的变量称作**状态变量**。其它的一些状态变量有压强(P)和化学势( $\mu$ )等。热力学赋予了这些状态变量之间的大量联系，因此，在平衡状态时，可以通过一些状态变量计算其它状态变量。

状态变量有两种类型，一种是**容度变量**，另一种是**强度变量**。容度变量的值，例如体积，与体系的大小有关，而强度变量的值，例如温度，与体系的大小无关。每种类型的状态变量都有

另一种类型的互补变量。例如，体积的互补变量为压强，而一个组元的成分的互补变量为它的化学势。

值得一提的是：使用一个简单的数学关系，一个组元的活度总是可以从它的化学势得到。另外，用户也可以为活度或者化学势选择任何方便的参考状态。将热力学数据库计算机化的一大好处是，在大多数情况下，参考状态的改变可以在程序内部进行，而不用麻烦用户。

如果体系与环境交换的功只有体积功，在这种情况下，通过对  $N+2$  ( $N$  为体系的组元数) 个状态变量赋值，就可以确定体系的平衡状态。

注意：Thermo-Calc 程序区分体系的组元和体系中相的成分(即物种)。许多状态变量作用于体系的组元或者相的成分。通常，元素被缺省定义为体系的组元，但是这种定义可以通过 POLY 模块中的命令 `DEFINE_COMPONENT` 改变。例如，如果元素为 Ca, Si 和 O，该体系的组元也可以被定义为 CaO, SiO 和 O<sub>2</sub>；在纯水体系中，通常将组元定义为 H<sub>2</sub>O 和 H<sup>+</sup>。不管怎样，用户不能通过这个命令改变组元的数量。

状态变量就是热力学量，它表示整个体系，或者体系中的组元，或者特定的替代相中的物种，或者特定的相中的成分(即特定的亚点阵结点上的物种)的性质。

POLY 模块作用于处于稳定或者亚稳或者部分/局部平衡状态的热力学体系。这些状态用状态变量来描述，例如温度，摩尔分数，化学势，组元的活度(体系或者特定的相中的组元的活度)，焓(体系或者特定的相的焓)等。在 POLY 模块中，采用了一个全面的符号表示法来设定状态变量。

在体系中，常用的状态变量为：

| <b><i>MNEMONIC</i></b><br><b>助记词</b> | <b><i>MEANING</i></b><br><b>意义</b>                                                                              |
|--------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| T                                    | Temperature (in K)<br>温度(K)                                                                                     |
| N(H)                                 | Total number of moles of the hydrogen component<br>组元 H 的总摩尔量                                                   |
| X(Fe)                                | Overall mole fraction of the Fe component<br>组元 Fe 的总摩尔分数                                                       |
| W(AL <sub>2</sub> O <sub>3</sub> )   | Mass fraction of the AL <sub>2</sub> O <sub>3</sub> component<br>组元 AL <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 的质量分数        |
| X(LIQUID,Fe)                         | Mole fraction of the Fe component in LIQUID phase<br>液相中组元 Fe 的摩尔分数                                             |
| NP(BCC)                              | Mole number of the BCC phase<br>BCC 相的摩尔数                                                                       |
| BP(BCC)                              | Mass (grams) of the BCC phase<br>BCC 相的质量(克)                                                                    |
| MUR(C)                               | Chemical potential of the C component (wrt its defined reference state)<br>组元 C 的化学势 (相对于定义的参考状态)               |
| ACR(C)                               | Activity of the C component (wrt its defined reference state)<br>组元 C 的活度 (相对于定义的参考状态)                          |
| LNACR(C)                             | Natural logarithm of activity of the C component<br>[ $\ln \text{ACR}(C) = \text{MUR}(C)/RT$ ]<br>组元 C 的活度的自然对数 |

|         |                                                                                 |
|---------|---------------------------------------------------------------------------------|
| HM      | Total enthalpy per mole of components in the system (in J/mol)<br>体系的摩尔焓(J/mol) |
| HM(FCC) | Enthalpy per mole of components of the FCC phase (in J/mol)<br>FCC 相的摩尔焓(J/mol) |

注意：以上包含了组元的状态变量可以用于已定义的组元，但是不能用于任何一种物种。通过命令 DEFINE\_COMPONENT，用户可以在已定义的体系中定义新的组元。

下面的表中，包含了基本的强度变量，密度变量和衍生变量(偏导数)，尽管不全，但是通过合理地组合预定义变量，可以得到其余的状态变量和偏导数(参考文档“Thermo-Calc 软件系统”中的章节 2.5 和 2.6，可以得到更多的相关信息)。

### 8.3.3.1 体系，组元，物种的强度性质

| <i><b>MNEMONIC</b></i><br>助记词 | <i><b>MEANING</b></i><br>意义                 | <i><b>Notes</b></i><br>备注                       |
|-------------------------------|---------------------------------------------|-------------------------------------------------|
| T                             | Temperature<br>温度                           |                                                 |
| P                             | Pressure<br>压强                              |                                                 |
| MU(comp)                      | Chemical potential of a component<br>组元的化学势 | (using the default reference state)<br>采用缺省的参考态 |
| MUR(comp)                     | Chemical potential of a component<br>组元的化学势 | (using a re-set reference state)<br>采用重新定义的参考态  |
| AC(comp)                      | Activity of a component<br>组元的活度            | (using the default reference state)<br>采用缺省的参考态 |
| ACR(comp)                     | Activity of a component<br>组元的活度            | (using a re-set reference state)<br>采用重新定义的参考态  |
| LNAC(comp)                    | ln(activity) of a component<br>组元的活度的自然对数   | (using the default reference state)<br>采用缺省的参考态 |
| LNACR(comp)                   | ln(activity) of a component<br>组元的活度的自然对数   | (using a re-set reference state)<br>采用重新定义的参考态  |

注意:  $\ln ac = MU/RT$ , 和  $\ln acr = MUR/RT$

用户所选择的数据库缺省定义了体系组元的活度和化学势的参考状态(通常为缺省的 SER 即“稳定元素参考“状态)，但是用户可以采用命令 SET\_REFERENCE\_STATE 或者在一些特殊的模块(例如 SCHEIL 或者 POURBAIX 模块)中，通过预定义来改变参考状态。

注意：当改变参考状态后， $MU(comp) \neq MUR(comp)$ ,  $AC(comp) \neq ACR(comp)$  和  $LNAC(comp) \neq LNACR(comp)$ 。

对于包含溶体/混合相(这些相被定义为单亚点阵溶体相，例如某些已存在的数据库中的气相混合物，水溶液，金属溶液，MeO 固溶体等)的体系，在某些情况下，直接将某个特定的相的成分(例如气体物种)的活度或者化学势设定为状态是很方便的。因此，可以使用下面的状态变量：

| <i><b>MNEMONIC</b></i> | <i><b>MEANING</b></i> | <i><b>Notes</b></i> |
|------------------------|-----------------------|---------------------|
|------------------------|-----------------------|---------------------|



| 助记词          | 意义                                                                       | 备注                           |
|--------------|--------------------------------------------------------------------------|------------------------------|
| MU(sp,ph)    | Chemical potential of the species in the specified phase<br>特定的相中的物种的化学势 | MU(sp,ph)=<br>MUR(sp,ph)     |
| MUR(sp,ph)   | Chemical potential of the species in the specified phase<br>特定的相中的物种的化学势 |                              |
| AC(sp,ph)    | Activity of the species in the specified phase<br>特定的相中的物种的活度            | AC(sp,ph)=<br>ACR(sp,ph)     |
| ACR(sp,ph)   | Activity of the species in the specified phase<br>特定的相中的物种的活度            |                              |
| LNAC(sp,ph)  | ln(activity) of the species in the specified phase<br>特定的相中的物种的活度的自然对数   | LNAC(sp,ph)=<br>LNACR(sp,ph) |
| LNACR(sp,ph) | ln(activity) of the species in the specified phase<br>特定的相中的物种的活度的自然对数   |                              |

注意:  $\ln ac = MU/RT$ , 和  $\ln acr = MUR/RT$

某个相成分(物种)的参考态为在当前的温度和 1bar(100000Pascal)下, 仅包含该物种的溶体/混合相本身。用户可以使用任何一个采用单亚点阵来描述的溶体/混合相, 但是该物种必须是该相的成分。像所有其它的状态变量一样, 这些与物种有关的状态变量在 POST 模块中也可以使用。

在 POLY 模块中, 以上变量的单位为:

- K                      T
- Pascal                P (1 bar =100000 Pa; 1 atm = 101325 Pa)
- J/mol                  各种化学势 [MU 或者 MUR, 用于体系的组元或者相中的物种]
- Dimensionless      各种活度 [AC 或者 ACR, 或者 LNAC, 或者 LNACR, 用于体系的组元或者相中的物种]

但是, 当列出平衡结果时(通过命令 LIST\_EQUILIBRIUM), 温度条件附加地以 °C 单位形式显示。在 POST 模块中, 用户可以简单地使用“T\_C”作为轴变量; 同时, 在 POLY 和 POST 模块中, 用户也可以通过命令 ENTER\_SYMBOL 定义一些合适的函数将这些变量转换为其它单位形式的变量。

### 8.3.3.2 容度变量的标准化

像文档“Thermo-Calc 软件系统”中的章节 2.5 和 2.6 中描述的那样, Thermo-Calc 软件可以处理各种容度变量(例如能量容度变量, 成分容度变量等)。对于所有的容度性质来说, 通过在它们的助记名后添加后缀就可以表示标准化的容度性质。一个助记名就是字母的组合, 这些字母能够使所表示的变量便于记忆。

标准化容度性质和相应的单位改变的一般性规则为:

|                                                                           |                              |
|---------------------------------------------------------------------------|------------------------------|
| <b>Extensive property Z for the whole system:</b><br><b>Z 表示整个体系的容度性质</b> | <b>Examples</b><br><b>范例</b> |
|---------------------------------------------------------------------------|------------------------------|



|                                                                                           |           |                                                                                                                        |                        |
|-------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------|
|                                                                                           | Z         | Extensive property Z in the whole system<br>整个体系的容度性质                                                                  | G                      |
|                                                                                           | ZM        | Extensive property Z <i>per moles of components in the system</i><br>每摩尔体系的容度性质                                        | GM                     |
|                                                                                           | ZW        | Extensive property Z <i>per mass (gram) in the system</i><br>单位质量(g)体系的容度性质                                            | GW                     |
|                                                                                           | ZV        | Extensive property Z <i>per volume (m<sup>3</sup>) in the system</i><br>单位体积(m <sup>3</sup> )体系的容度性质                   | GV                     |
|                                                                                           |           |                                                                                                                        |                        |
| <b>Extensive property Z for a specific phase:<br/>Z 表示特定相的容度性质</b>                        |           |                                                                                                                        | <b>Examples<br/>范例</b> |
|                                                                                           | Z(phase)  | Extensive property Z for the current amount of a phase<br>相的容度性质                                                       | G(AB)                  |
|                                                                                           | ZM(phase) | Extensive property Z <i>per mole of a phase</i><br>每摩尔相的容度性质                                                           | GM(AB)                 |
|                                                                                           | ZW(phase) | Extensive property Z <i>per mass (gram) of a phase</i><br>单位质量(g)相的容度性质                                                | GW(AB)                 |
|                                                                                           | ZV(phase) | Extensive property Z <i>per volume (m<sup>3</sup>) of a phase</i><br>单位体积(m <sup>3</sup> )相的容度性质                       | GV(AB)                 |
|                                                                                           | ZF(phase) | Extensive property Z <i>per mole formula unit of a phase</i><br>每摩尔分子式单位相的容度性质                                         | GF(AB)                 |
|                                                                                           |           |                                                                                                                        |                        |
| <b>Extensive property Z for a specific component in the system:<br/>Z 表示体系中特定组元的容度性质:</b> |           |                                                                                                                        | <b>Examples<br/>范例</b> |
|                                                                                           | Z(comp)   | Extensive property Z of a component in the whole system<br>整个体系中组元的容度性质                                                | N(Fe)                  |
|                                                                                           | ZM(comp)  | Extensive property Z of a component <i>per moles of all components in the system</i><br>每摩尔体系中组元的容度性质                  | NM(Fe)                 |
|                                                                                           | ZW(comp)  | Extensive property Z of a component <i>per mass (gram) of the system</i><br>单位质量(g)体系中组元的容度性质                          | NW(Fe)                 |
|                                                                                           | ZV(comp)  | Extensive property Z of a component <i>per volume (m<sup>3</sup>) of the system</i><br>单位体积(m <sup>3</sup> )体系中组元的容度性质 | NV(Fe)                 |
|                                                                                           |           |                                                                                                                        |                        |
| <b>Extensive property Z for a specific component in a phase:<br/>Z 表示特定的相中的组元的容度性质</b>    |           |                                                                                                                        | <b>Examples<br/>范例</b> |

|             |                                                                                                                                      |           |
|-------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| Z(ph,comp)  | Extensive property Z of a component in a phase in the system<br>体系中某一相中的组元的容度性质                                                      | N(AB,Fe)  |
| ZM(ph,comp) | Extensive property Z of a component in a phase <i>per mole of all components in the system</i><br>每摩尔体系中某一相中的组元容度性质                  | NM(AB,Fe) |
| ZW(ph,comp) | Extensive property Z of a component in a phase <i>per mass (gram) of a system</i><br>单位质量(g)体系中某一相中的组元的容度性质                          | NW(AB,Fe) |
| ZV(ph,comp) | Extensive property Z of a component in a phase <i>per volume (m<sup>3</sup>) of a system</i><br>单位体积(m <sup>3</sup> )体系中某一相中的组元的容度性质 | NV(AB,Fe) |
|             |                                                                                                                                      |           |

### 8.3.3.3 体系，相的能量容度变量

下面的助记名表示体系或者相的能量容度变量(AB 表示某个相):

| <i>MNEMONIC</i><br>助记名 | <i>MEANING</i><br>意义 | 范例 (合理的标准) |        |        |        |        |
|------------------------|----------------------|------------|--------|--------|--------|--------|
| H                      | 体系的焓                 | H          | HM     | HW     | HV     |        |
| H(phase)               | 相的焓                  | H(AB)      | HM(AB) | HW(AB) | HV(AB) | HF(AB) |
| S                      | 体系的熵                 | S          | SM     | SW     | SV     |        |
| S(phase)               | 相的熵                  | S(AB)      | SM(AB) | SW(AB) | SV(AB) | SF(AB) |
| V                      | 体系的体积                | V          | VM     | VW     |        |        |
| V(phase)               | 相的体积                 | V(AB)      | VM(AB) | VW(AB) |        | VF(AB) |
| G                      | 体系的吉布斯自由能            | G          | GM     | GW     | GV     |        |
| G(phase)               | 相的吉布斯自由能             | G(AB)      | GM(AB) | GW(AB) | GV(AB) | GF(AB) |

|          |            |       |        |        |        |        |
|----------|------------|-------|--------|--------|--------|--------|
| A        | 体系的亥姆霍兹自由能 | A     | AM     | AW     | AV     |        |
| A(phase) | 相的亥姆霍兹自由能  | A(AB) | AM(AB) | AW(AB) | AV(AB) | AF(AB) |
| U        | 体系的内能      | U     | UM     | UW     | UV     |        |
| U(phase) | 相的内能       | U(AB) | UM(AB) | UW(AB) | UV(AB) | UF(AB) |

注意：上面的量可以添加后缀 M, W, V 和 F(见范例列)。

在 POLY 模块中，当没有添加后缀时，上面的变量的单位是：

- J H, H(phase); G, G(phase); A, A(phase); U, U(phase)
- J/K S, S(phase)
- m<sup>3</sup> V, V(phase)

当在这些性质后添加后缀时，应该根据后缀的不同含义[M(每 mole),W(每 g),V(每 m<sup>3</sup>),或者 F(每摩尔分子式单位)]，相应地改变它们的单位。例如：对于以 M 作为后缀的变量，它们的单位应该如下：

- J/mol HM, HM(phase); GM, GM(phase); AM, AM(phase); UM, UM(phase)
- J/mol/K SM, SM(phase)
- m<sup>3</sup>/mol VM, VM(phase)

在 POLY 和 POST 模块中，用户也可以通过命令 ENTER\_SYMBOL 定义一些合适的函数将这些变量转换为其它单位形式的变量。

一些能量量(例如热容，热膨胀系数，等温压缩系数)，以及一些能量量和/或分量相对于控制状态的变化可以通过求偏导数来得到(参考下面的章节 8.3.3.9 和文档“Thermo-Calc 软件系统”中的章节 2.6，可以获得更详细的信息)。

作为一个独特的功能，Thermo-Calc 软件可以计算相转变(体系中特定相的析出)的化学驱动力(即热力学因子)。这个能量量只能用于某一相，而不能用于设定状态。此外，它必须添加后缀(M/W/V/F)后才能使用：

| <b>MNEMONIC</b><br>助记词 | <b>MEANING</b><br>意义                                           | <b>Notes</b><br>备注                                                                              |
|------------------------|----------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------|
| DGM(phase)             | Driving force of a phase per mole of components<br>每摩尔相的驱动力    | All of them are always divided by RT, and are thus dimensionless.<br>所有这些量都是除以 RT 后的值，之后它们没有量纲。 |
| DGW(phase)             | Driving force of a phase per mass of components<br>单位质量相的驱动力   |                                                                                                 |
| DGV(phase)             | Driving force of a phase per volume of components<br>单位体积相的驱动力 |                                                                                                 |

|            |                                                                          |  |
|------------|--------------------------------------------------------------------------|--|
| DGF(phase) | Driving force of a phase per formula unit of components<br>每摩尔分子式单位相的驱动力 |  |
|------------|--------------------------------------------------------------------------|--|

### 8.3.3.4 体系的总大小

下面的助记名用于表示体系中组元的总量（即总大小）

| <b>MNEMONIC</b><br>助记词 | <b>MEANING</b><br>意义                                    | <b>Examples (Possible Normalizations)</b><br>范例（合理的标准） |    |    |    |
|------------------------|---------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------|----|----|----|
| N                      | Mole number of components in the system<br>体系中组元的总量     | N                                                      |    | NW | NV |
| B                      | Mass (gram) of components in the system<br>体系中组元的总质量(g) | B                                                      | BM |    | BV |

注意：上面的量可以添加后缀 M,W 和 V。

注释:由于 NM 和 BW 总为一，所以没有意义，不合法！BV 为体系的密度！

在 POLY 模块中，以上变量和添加了后缀后的量的单位为：

- N moles;      NW mol/g;      NV mol/m<sup>3</sup>
- B grams;      BM g/mol;      BV g/m<sup>3</sup>

在 POLY 和 POST 模块中，用户也可以通过命令 ENTER\_SYMBOL 定义一些合适的函数将这些变量转换为其它单位形式的变量。

### 8.3.3.5 体系，相的组元数量

下面的助记名用于表示体系中或者相（以 AB 表示）中组元(例如 Fe)的数量：

| <b>MNEMONIC</b><br>助记名 | <b>MEANING</b><br>意义                                    | <b>Examples (Possible Normalizations)</b><br>范例（合理的标准） |           |           |           |
|------------------------|---------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------|-----------|-----------|-----------|
| N(comp)                | Mole number of a component in the system<br>体系中组元的量     | N(Fe)                                                  | NM(Fe)    | NW(Fe)    | NV(Fe)    |
| N(ph,comp)             | Mole number of a component in a phase<br>相中组元的量         | N(AB,Fe)                                               | NM(AB,Fe) | NW(AB,Fe) | NV(AB,Fe) |
| B(comp)                | Mass (gram) of a component in the system<br>体系中组元的质量(g) | B(Fe)                                                  | BM(Fe)    | BW(Fe)    | BV(Fe)    |
| B(ph,comp)             | Mass (gram) of a component in a phase<br>相中组元的质量(g)     | B(AB,Fe)                                               | BM(AB,Fe) | BW(AB,Fe) | BV(AB,Fe) |

|            |                                                             |                         |
|------------|-------------------------------------------------------------|-------------------------|
| X(comp)    | Mole fraction of a component<br>in the system<br>体系中组元的摩尔分数 | 注意: X(Fe)= NM(Fe)       |
| X(ph,comp) | Mole fraction of a component<br>in a phase<br>相中组元的摩尔分数     | 注意: X(AB,Fe)= NM(AB,Fe) |
| W(comp)    | Mass fraction of a component<br>in the system<br>体系中组元的质量   | 注意: W(Fe)= BW(Fe)       |
| W(ph,comp) | Mass fraction of a component<br>in a phase<br>相中该组元的质量分数    | 注意: W(AB,Fe)= BW(AB,Fe) |

注意：上面的量可以添加后缀 M, W 和 V（见范例一栏）。

注释：X 和 W 分别表示摩尔分数和质量分数，因此可以分别代替助记名 NM 和 BW：

$$\begin{aligned} \text{NM(comp)} &= \text{X(comp)} & \text{BW(comp)} &= \text{W(comp)} \\ \text{NM(ph,comp)} &= \text{X(ph,comp)} & \text{BW(ph,comp)} &= \text{W(ph,comp)} \end{aligned}$$

在 POLY 模块中，上面的变量以及添加了后缀后的量的单位为：

- N(comp)和 N(ph,comp) moles; NM(comp)和 NM(ph,comp) 摩尔分数;  
NW(comp)和 NW(ph,comp)mol/g;  
NV(comp)和 NV(ph,comp)mol/m<sup>3</sup>
- B(comp)和 B(ph,comp) grams; BM(comp)和 BM(ph,comp) g/mol;  
BW(comp)和 BW(ph,comp) 质量分数;  
BV(comp)和 BV(ph,comp) g/m<sup>3</sup>
- X(comp)和 X(ph,comp) 摩尔分数; W(comp)和 W(ph,comp)质量分数

在 POLY 和 POST 模块中，用户也可以通过命令 ENTER\_SYMBOL 定义一些合适的函数将这些变量转换为其它单位形式的变量。

特别注意 1：在 POST 模块中画图时，用户可以将体系组元的另外两个衍生量，即 X%(comp) [=X(comp)\*100] 和 W%(comp) [=W(comp)\*100] 设定为轴变量，但是它们必须分别以 Mole\_Percent<comp> 和 Weight\_Percent<comp>表示。请记住：这两个变量以及相关的句法在 POLY 模块中不能用于设定状态。

特别注意 2：当在 POST 模块中以某一组元的摩尔分数或者质量分数作为轴变量时，推荐使用 Mole-Fraction <comp> 或者 Weight-Fraction <comp>，而不是 X(comp) 或者 B(comp)。

### 8.3.3.6 体系中相的数量

下面的助记名用于表示体系中相（以 AB 表示）的数量：

| <b>MNEMONIC</b><br>助记名 | <b>MEANING</b><br>意义          | <b>Examples (Possible Normalizations)</b><br>范例（合理的标准） |         |         |         |
|------------------------|-------------------------------|--------------------------------------------------------|---------|---------|---------|
| NP(phase)              | Mole number of a phase<br>相的量 | NP(AB)                                                 | NPM(AB) | NPW(AB) | NPV(AB) |

|           |                                                              |        |         |         |         |
|-----------|--------------------------------------------------------------|--------|---------|---------|---------|
| BP(phase) | Mass (gram) of a phase<br>相的质量(g)                            | BP(AB) | BPM(AB) | BPW(AB) | BPV(AB) |
| VP(phase) | Volume (m <sup>3</sup> ) of a phase<br>相的体积(m <sup>3</sup> ) | VP(AB) | VPM(AB) | VPW(AB) | VPV(AB) |

注意：上面的变量可以添加后缀 M,W 和 V(见范例列)，标准化地表示体系的性质。

在 POLY 模块中，上面的变量和添加后缀后的量的单位为：

- NP(phase) moles;                      NPM(phase) 摩尔分数;  
                                                     NPW(phase) mol/g;  
                                                     NPV(phase) mol/m<sup>3</sup>
- BP(phase) grams;                      BPM(phase) g/mol;  
                                                     BPW(phase) 质量分数;  
                                                     BPV(phase) g/m<sup>3</sup>
- VP(phase) m<sup>3</sup>;                        VPM(phase) m<sup>3</sup>/mol;  
                                                     VPW(phase) m<sup>3</sup>/g;  
                                                     VPV(phase) 体积分数;

在 POLY 和 POST 模块中，用户也可以通过命令 ENTER\_SYMBOL 定义一些合适的函数将这些变量转换为其它单位形式的变量。

### 8.3.3.7 相的特殊量

相的成分以结点分数来表示(无量纲)：

| <i><b>MNEMONIC</b></i><br><i><b>助记词</b></i> | <i><b>MEANING</b></i><br><i><b>意义</b></i>      | <i><b>Notes</b></i><br><i><b>备注</b></i>                                                                                                                                                                                                                  |
|---------------------------------------------|------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| QF(phase)                                   | Phase stability function of a phase<br>相的相稳定函数 | <ul style="list-style-type: none"> <li>• Being negative when the phase composition is inside a spinodal or positive elsewhere, in an equilibrium state;</li> <li>• Dimensionless</li> <li>• 当相成分处于 spinodal 内时，为负值；在平衡状态中，为正值。</li> <li>• 无量纲</li> </ul> |
| TC(phase)                                   | Curie temperature of a phase<br>相的居里温度         | Being functions of phase composition;<br>Unit: K <ul style="list-style-type: none"> <li>• 相成分的函数；</li> <li>• 单位: K</li> </ul>                                                                                                                            |
| BMAGN(phase)                                | Bohr magneton number of a phase<br>相的玻尔磁子      | Dimensionless <ul style="list-style-type: none"> <li>• 相成分的函数</li> <li>• 无量纲</li> </ul>                                                                                                                                                                  |

注意：特定的相的这些特殊的量取决于所选择的热力学模型。它们不能添加任何标准化后缀 (M/W/V/F)；尽管这些特殊变量可以添加参考状态后缀 R，但是在体系特定的状态下，添加后

缀后的变量仍然等同于先前的变量[即  $QFR(ph) = QF(ph)$ ]，即只要体系状态的定义没有改变，即使重新定义体系组元的参考状态，各相的相稳定函数，居里温度，玻尔磁子也不会改变。另外，它们不能被用于设定状态。

### 8.3.3.8 相的成分

相的成分以结点分数来表示(无量纲):

| <i><b>MNEMONIC</b></i><br><i><b>助记词</b></i> | <i><b>MEANING</b></i><br><i><b>意义</b></i>                                                  | <i><b>Examples</b></i><br><i><b>范例</b></i>     |
|---------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------|
| Y(ph,species#subl)                          | Site fraction of a species on a specific sublattice site in a phase<br>物种在相中特定的亚点阵结点上的占据分数 | Y(SIGMA,Fe#1),<br>Y(SIGMA,Fe#3),<br>Y(FCC,C#2) |

注意：这个量取决于所选择的热力学模型。

### 8.3.3.9 偏导数(衍生变量)

状态变量的导数可以在两个状态变量之间加符号“.”表示。体系，或者体系的组元，或者相，或者相的组元的衍生变量都可以很容易地通过合理地对状态变量求偏导数得到，例如热容，热膨胀系数，恒温压缩系数等。

用户可以使用更多的复杂导数，例如 T.W(LIQUID,C)表示液相线相于 C 质量分数的斜率；当计算出某一成分下液相和固相温度后，T.W(C)表示体系中，液相温度或者固相温度随着 C 成分 W(C)变化的方向/幅度。

特别注意：符号“.”后面的变量必须是已经在体系平衡计算中被定义的状态。

一些典型的例子如下：

| <i><b>MNEMONIC</b></i><br><i><b>助记词</b></i> | <i><b>MEANING</b></i><br><i><b>意义</b></i>                                 | <i><b>Notes and Examples</b></i><br><i><b>范例和备注</b></i>                                                                                                                                                                                |
|---------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| HM.T                                        | Heat capacity of the system<br>体系的热容                                      | $\partial HM/\partial T = C_p$ (if P is a condition)<br>$\partial HM/\partial T = C_v$ (if V is a condition)<br>$\partial HM/\partial T = C_p$ (如果 p 为状态)<br>$\partial HM/\partial T = C_v$ (如果 V 为状态)                                 |
| HM(ph).T                                    | Heat capacity of a phase<br>相的热容                                          | $\partial HM(ph)/\partial T = C_p(ph)$ (if P is a condition)<br>$\partial HM(ph)/\partial T = C_v(ph)$ (if V is a condition)<br>$\partial HM(ph)/\partial T = C_p(ph)$ (如果 p 为状态)<br>$\partial HM(ph)/\partial T = C_v(ph)$ (如果 v 为状态) |
| H.T                                         | Heat capacity of the system multiplied by total mole number of components | $\partial H/\partial T = C_p * N$ (if P is a condition in a close system)<br>(在封闭体系中，p 为状态)                                                                                                                                            |



|          |                                                                                                                                                                                 |                                                                                                                                                                            |
|----------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|          | 体系的热容乘以组元的总摩尔数                                                                                                                                                                  | $\partial H/\partial T = C_v * N$ (if V is a condition in a close system)<br>(在封闭体系中, v 为状态)                                                                               |
| H(ph).T  | Heat capacity of a phase multiplied by the mole number of the phase, and plus a $HM(ph)*\partial NP(ph)/\partial T$ term<br>相的热容乘以相的量, 并且加上 $HM(ph)*\partial NP(ph)/\partial T$ | $C_p(ph)*NP(ph)+HM(ph)*\partial NP(ph)/\partial T$ (if P is a condition)<br>(p 为状态)<br>$C_v(ph)*NP(ph)+HM(ph)*\partial NP(ph)/\partial T$ (if V is a condition)<br>(v 为状态) |
| VM.T     | Thermal expansivity of the system(already multiplied by the total molar volume)<br>体系的热膨胀系数(已经乘以了总摩尔体积)                                                                         | $\partial VM/\partial T = \alpha * VM$                                                                                                                                     |
| VM(ph).T | Thermal expansivity of a phase (already multiplied by its molar volume)<br>相的热膨胀系数 (已经乘以了该相的摩尔体积)                                                                               | $\partial VM(ph)/\partial T = \alpha(ph)*VM (ph)$                                                                                                                          |
| V.T      | Thermal expansivity of the system(already multiplied by the total volume)<br>体系的热膨胀系数(已经乘以了总体积)                                                                                 | $\partial V/\partial T = \alpha * V$                                                                                                                                       |
| V(ph).T  | Thermal expansivity of a phase (already multiplied by the phase volume)<br>相的热膨胀系数 (已经乘以了相的体积)                                                                                  | $\partial V(ph)/\partial T = \alpha(ph)*V(ph)$<br>=<br>$\alpha(ph)*VM(ph)*NP(ph)+VM(ph)*\partial NP(ph)/\partial T$                                                        |
| VM.P     | Isothermal compressibility of the system (already multiplied by the total molar volume)<br>体系的等温压缩系数(已经乘以了总摩尔体积)                                                                | $\partial VM/\partial P = -\kappa * VM$                                                                                                                                    |
| VM(ph).P | Isothermal compressibility of a phase(already multiplied by its molar volume)                                                                                                   | $\partial VM(ph)/\partial P = -\kappa(ph)*VM (ph)$                                                                                                                         |

|              |                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                                                                             |
|--------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|              | 相的等温压缩系数(已经乘以了相的摩尔体积)                                                                                                                                                                                                                                              |                                                                                                                                             |
| V.P          | Isothermal compressibility of the system (already multiplied by the total volume)<br>体系的等温压缩系数(已经乘以了总体积)                                                                                                                                                           | $\partial V/\partial P = -\kappa \cdot V$                                                                                                   |
| V(ph).P      | Isothermal compressibility of a phase(already multiplied by the phase volume)<br>相的等温压缩系数(已经乘以了相的体积)                                                                                                                                                               | $\partial V(ph)/\partial P = -\kappa \cdot V(ph)$<br>=<br>$-\kappa(ph) \cdot VM(ph) \cdot NP(ph) + VM(ph) \cdot \partial NP(ph)/\partial P$ |
| P.T          | The slope $\partial P/\partial T$ of a phase boundary on a P-T phase diagram. Note that the equilibrium with phase assemblage must have been calculated first.<br>P-T 相图上相界的斜率。注意：Note that the equilibrium with phase assemblage must have been calculated first。 |                                                                                                                                             |
| T.X(comp)    | The slope $\partial T/\partial X(comp)$ of a phase boundary on a T-X(comp) phase diagram with respect to mole fraction of the component in the system<br>T-X(comp) 相图上相界的斜率                                                                                        |                                                                                                                                             |
| T.W(comp)    | The slope $\partial T/\partial W(comp)$ of a phase boundary on a T-W(comp) phase diagram with respect to mass of the component in the system<br>T-W(comp) 相图上相界的斜率                                                                                                 |                                                                                                                                             |
| T.X(ph,comp) | The slope $\partial T/\partial X(ph,comp)$ of a phase boundary on a T-X(ph,comp) phase diagram with respect to mole fraction of the component in the phase<br>T-X(ph,comp) 相图上相界的斜率                                                                                |                                                                                                                                             |
| T.W(ph,comp) | The slope $\partial T/\partial W(ph,comp)$ of a phase boundary on a T-w(ph,comp) phase diagram with respect to mole fraction of the component in the phase<br>T-W(ph,comp) 相图上相界的斜率                                                                                |                                                                                                                                             |
| 更多.....      |                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                                                                             |

严格地说，上面说明的和在文档“Thermo-Calc 软件系统”中的表 1 中列出的整个体系，或者整个体系中的任何一个或者所有成分，或者某个给定的相，或者某个给定相的任何或者所有成分的任何一个带标准化后缀[M（每 mole），W（每 g），V（每 m<sup>3</sup>）或者 F（每摩尔分子式子单位）]的能量容度变量或者成分容度变量都是衍生变量，它们已经在程序内部通过对某些状态变量求一次或者二次导数明确定义。如果体系中某一相不稳定，那么程序仍然会精确计算和保存该相的所有标准变量和衍生量。然而，当在平衡计算后显示某个偏导数时，符号“.”后的状态变量必须在平衡计算前就被设定为某一状态。例如：

- 当 B(体系中所有组元的总质量)在体系中被设定为状态时，衍生变量 G.B 等同于带 W 后缀的状态变量 GW。

- 当 N(体系中所有组元的总摩尔量)在体系中被设定为状态时, 衍生变量 N(comp).N 等同于带 M 后缀的状态变量 NM(comp)或者 X(comp)。

参考文档“Thermo-Calc 软件系统”中的章节 2.5 和 2.6, 可以得到更多的关于状态变量和衍生变量(偏导数)的详细信息。

### 8.3.4 组元

在 POLY 模块中, 元素被缺省地当作组元进行处理。在某些情况下, 例如在氧化物和水溶液体系中, 这种方式相当不方便或者不恰当。然而, 通过使用命令 DEFINE\_COMPONENT, 可以改变组元的设置。新定义的组元必须也是在目前已定义的体系中存在的物种。

注意: 状态变量 AC, MU, N, X, W 等仅能作用于组元(见章节 8.3.3)! 因此, 在 H2 没有被定义为组元的情况下, SET\_CONDITION N(H2)=100 非法。

通过使用命令 SET\_INPUT\_AMOUNT (H2)=100, 用户可以避开这个麻烦。该命令只要求 H2 是已定义的体系中存在的物种, 接着程序将其转换成 SET\_CONDITION N(H)=200。

### 8.3.5 状态

根据吉布斯相规则, 只有体系的自由度为零, 才能进行平衡计算。体系的自由度等于组元数加二(温度和压强)。

通过命令 SET\_CONDITION 设定状态以及命令 CHANGE\_STATUS PHASE 将相状态设定为 FIXED 状态这两种方式, 可以降低自由度。

最简单的状态设定方式为设定温度, 压强和组元的数量。但是用户可以选择性地将体系或者特定相的某一组元的活度, 化学势, 焓, 任何一个强度或者容度变量设定为状态。使用命令组 INFO STATE\_VARIABLE, 或者参考文档“Thermo-Calc 软件系统中”的章节 2.5 可以了解如何表示状态变量。

简单的例子如下:

对于 Fe-Cr-C 体系:

```
SET_CONDITION T=1200, P=1E5, X(CR)=0.18, W(C)=0.0013, N=1
```

表示温度为 1200K, 压强为 1bar, Cr 的摩尔分数为 0.18(即摩尔百分比为 18), C 的质量分数为 0.0013(即质量百分比为 0.13), 物质的总量为 1 摩尔(表示其余的物质为 Fe)。

对于 C-H-O 体系 (假定 H2 和 O2 已经被设定为组元):

```
SET_CONDITION T=2173, P=101325, N(H2)=14, N(O2)=18, N(C)=5
```

表示温度为 2173K, 压强为 1atm, H2 的摩尔量为 14, O2 的摩尔量为 18, C 的摩尔量为 5。

为了给用户带来方便, 在设定状态时, 用户也可以使用未被定义成组元的物种, 但是必须通过命令 SET\_INPUT\_AMOUNT 来输入, 该命令将它们转换成程序可接受的状态 (见命令 SET\_INPUT\_AMOUNT 的有关信息)。

用户在设定状态时一定要小心, 避免设定无意义的状态。通常, 程序只能通过计算平衡时收敛失败来检测出状态的设定无意义。

POLY 模型的一个重要的功能是能够将一个相的成分设定为状态。大多数的平衡计算程序仅能将整个成分设定为状态，但是通过 POLY 模块，用户可以将一个单独的相的成分，或者焓，或者熵设定成状态。当然，那个相必须是稳定的。

一个例子如下：

```
SET_CONDITION W(LIQ,C)=0.012
```

表示液相中 C 的质量分数为 0.012(即质量百分比为 1.2)。

同时，也可以将状态变量的线性表达式设定为状态。例如：

```
SET_CONDITION X(LIQ,S)-X(PYRR,S)=0
```

该表达式可用来计算 Fe-S 体系中，磁黄铁矿的熔点。

设定相状态为 FEXED 对于直接计算零变量点，或者单变量点，或者极值非常有帮助。

注意：设定状态为 FIXED 的相的值时使用“NPF(phase)”，而不是 NP(phase)。例如，为了计算熔点，用户可以通过将体系中液相的状态确定在 0 摩尔来代替温度状态：

```
SET_CONDITION T=NONE
```

```
CHANGE_STATUS PHASE LIQUID=FIX 0
```

FIXED 相状态也可以用于计算平衡时一个或者若干个特定相稳定的体系的相图。

## 8.4 不同类型的计算

### 8.4.1 单点平衡计算

通常，用户通过计算单点平衡来熟悉该软件。在计算单点平衡时，用户必须设定所有必需的状态，从而使体系的自由度为零（请参考关于命令 `SET_CONDITION` 的相关信息）。

当合理地设定好所有必需的状态后，用户就可以通过命令 `COMPUTE_EQUILIBRIUM` 来计算平衡(参考章节 8.4.9 和 8.7.4，可以得到关于这个命令的详细信息)。通常，这个命令使用 **吉布斯能最小化技术(GEM)**来计算平衡；然而，软件开发人员在不断地修改和提高计算程序中所包含的这项技术，从而使程序不仅能容易地找到平衡状态，而且能更确定所找到的平衡为体系中最稳定的平衡状态。

✚ 在随后的一些版本(特别是 TCCN/TCCP/TCCQ)中使用了一些高级的算法。对于某些相当复杂的多相交作用体系，如果平衡状态难于计算，那么用户可以使用命令组合 `COMPUTE_EQUILIBRIUM *`来计算平衡。

✚ 从目前的 TCCR 版本(以及 TCW4, DICTRA24, 各种 Thermo-Calc 程序界面的新版本)开始，采用**全域最小化技术**来计算平衡，从而保证在特定状态下，从平衡计算中得到的当前最小值为最稳定的最小值。这项新技术(在章节 9.4.9 中已介绍过)能防止计算到体系中的亚稳态或者不稳定(局部)平衡状态，并且在需要处理一个或者多个溶解度间隙时，能自动进行溶体相的成分设定(即不需要用户预先设定)。相应地，在这个命令上的用法上，有一些变化（见下面和章节 8.7.4）：

- `COMPUTE_EQUILIBRIUM`                    使用新的全域最小化技术
- `COMPUTE_EQUILIBRIUM -`                使用传统的 GEM 技术
- `COMPUTE_EQUILIBRIUM *`                由于全域最小化技术功能更强大，因此当全

## 域最小化模块

模块关闭

开启时，该命令就不那么有用了！当全域最小化

时，该命令才能发挥作用。

注意：通常，在进行单点计算和部分的 STEPPING/MAPPING 计算中，程序缺省地采用全域最小化技术，但是用户可以根据需要，关闭它(见章节 8.7.4 和 8.10.22)。如果它被关闭，那么程序将采用传统的 GEM 技术。

POLY 程序能自动地为相成分提供初始值，尽管一般情况下，这很有效，但是在某些情况下，在计算首个平衡时，仍然会存在一些问题（如何处理这些问题请见章节 8.12）。

如果计算没有收敛，那么用户可以尝试尽可能简单地设定状态，从而促使计算收敛。最简单的设定状态的方法为确定温度，压强和总成分。即使这不是用户试图计算的，首先设定这些简单的状态来计算一个初始平衡对于以后的计算也很有帮助。然后，用户可以将相状态，焓状态，单个相的成分等设定为状态。

注意：用户很容易设定无意义的平衡状态，对于这种情况，除了平衡计算失败外，程序不会提示用户这些状态是不恰当的。因此，用户必须知道每个状态与计算平衡的联系。

当计算首个单点平衡后，如果用户对结果满意，那么可以在计算相图和性质图前，继续通过改变状态计算其它的单点平衡。将状态的其中之一设为轴变量并且使用命令 STEP(见命令 SETP 的相关信息)可以画性质图；将两个或者更多的状态设为轴变量并且使用 MAP(见命令 MAP 的相关信息)命令可以画相图（见章节 8.4.2 和 8.4.5，可以得到更多的相关信息）。

## 8.4.2 性质图的 STEPPING 计算

在 POLY 模块中，将一个状态设定为 STEPPING 轴变量，可以计算一系列的平衡。首先计算一个单点平衡，然后选择一个状态作为独立轴变量，同时给出轴的最大值，最小值，以及步长就可以计算性质图。

下面是命令 STEP\_WITH\_OPTIONS 的选项：

- NORMAL 在每步计算时，仅 STEPPING 轴变量的值改变。
- INITIAL\_EQUILIBRIA 在每个计算点上都加入一个初始平衡。这个选项十分有用，  
例如，用于等温计算中。
- EVALUATE 当在每步计算中，附加的状态(不是 STEPPING 轴变量)要改变时，使用这个选项。通过这个选项，用户可以模拟 Scheil-Gulliver 凝固过程，程序在每步计算后将体系总成分设定为新的液相成分（见章节 8.4.3，凝固过程模拟）。
- T-ZERO 该选项用于计算  $T_0$  线， $T_0$  线表示两相吉布斯自由能相等  
(见章节 8.4.4，相平衡和  $T_0$  温度模拟)。
- PARAEQUILIBRIUM 该选项用于计算仲平衡线。仲平衡线表示一

个或者多个间隙组元  
中化学势

相等（见章节 8.4.4, 仲平衡和  $T_0$  温度模拟）。

#### ➤ MIXED\_SCHEIL

该选项在 TCCQ 中新加入。当凝固过程中，固相中一个或者多个间隙元素(例如 C, N, O, S 等)有反扩散行为的时候，可以通过该选项进行局部平衡 Scheil-Gulliver 模拟的 STEPPING 计算。但是，用户最好直接使用已扩充的 SCHEIL\_SIMULATION 模块自动进行模拟。自 TCCQ 版本以来，可以使用该模块。

注意：T-ZERO 和 PARAEQUILIBRIUM 选项仅在 TCCP 版本中可以使用，最后一个选项仅可以在 TCCQ 版本的和以后的版本中使用。

### 8.4.3 凝固过程模拟

Thermo-Cal 仅为平衡计算而开发，所以不能模拟与时间和空间有关的转变过程。但是，在 TCC/TCW 软件中，可以模拟一些非平衡转变或者局部平衡转变，例如，可以模拟 Scheil-Gulliver 凝固，该凝固过程中，元素在液相中扩散十分迅速，而在固相中十分缓慢以至可以忽略。

在 Scheil 近似的情况下，液固界面的状态可以用一个局部平衡来描述。通过以很小的步长降低温度(或者焓，或者液相的数量)，可以得到新的状态下，液相的新成分，然后在下一步计算前，将体系的总成分设定为液相的成分，这样就移除了已经形成的固相。上述步骤可以通过 POLY 命令 STEP 中的特殊选项 EVALUATE 来实现，即命令组 STEP EVALUATE。

为了使用户能更方便地进行凝固模拟，Thermo-Calc 程序包中包含了一个特殊的模块，即 SCHEIL 模块(在章节 10.8 中有关于 SCHEIL 模块更详细的介绍，TCCR Examples Book 中包含了有关此模型的两个例子(即 Examples15 和 30))。

对于 Al 和 Ni 基合金的正常凝固行为，Scheil-Gulliver 模拟经常能给出合理的结果，但是它决不适合用于包含快速扩散间隙元素 C 或者 N 的钢的凝固过程。在这种情况下，可以修改 Scheil-Gulliver 模型，使它允许每步温度下的固相中的间隙元素的平衡反扩散行为，即通过达到化学势相等来重新分配液相和固相中的间隙元素(在 Chen and Sundén, Mater.Trans., 43(2002)P551 中有关于局部平衡近似的详细介绍)。

自 TCCQ 版本以来，SCHEIL 模块就被扩充，从而能够处理局部平衡凝固近似(在 TCCR Examples Book (即例 48)中有关于使用扩充的 SCHEIL 模块进行局部平衡模拟和比较 Scheil-Gulliver 计算和杠杆定理计算的例子)。

### 8.4.4 仲平衡和 $T_0$ 温度模拟

除了凝固过程的 SCHEIL 模块模拟，Thermo-Calc 软件还能进行两种局部平衡模拟，即仲平衡和  $T_0$  温度模拟。

仲平衡是一个局部平衡，即多组元合金中，一个间隙组元(例如 C 和 N)比其它的组元(替换元素，包括基体元素和合金元素)扩散快，从而间隙组元的化学势在两个局部平衡的相中相等，而其它的组元不相等。在仲平衡的状态下，可能会产生一个部分转变，即可能生成一个新相，该新相的成分不同于快速扩散的组元含量，但是等于缓慢扩散组元的含量。仲平衡的计算很有用，



例如研究所包含的元素的扩散系数相差很大的体系中的相转变。在仲平衡的状态下，相转变比保持完全局部平衡的相界面上的相转变快得多。

例如，在三元合金体系中(例如 Fe-M-C)，通常一个元素(间隙溶质 C)比另外两个元素(替代式基体元素 Fe 和替代式合金化元素 M)扩散快得多。在这种情况下，可能生成一个新相，该新相 C 的含量不同于快速扩散的组元 C 的含量，但是 Fe 和 M 的相对含量等于缓慢扩散组元 Fe 和 M 的相对含量。因此，两个相仍然处于局部平衡状态，相转变将通过局部平衡的两相界面部分进行。在界面上，不存在驱动力。界面两边快速扩散的元素的化学势相等，而缓慢扩散的元素的化学势不相等。取而代之，化学势的乘积与所谓的缓慢扩散的元素的 u-分数[ $u_{Fe}$  和  $u_M$ ，定义为  $N_i/(N_{Fe}+N_M)$  或者  $X_i/(X_{Fe}+X_M)$ ]有相同的值。所谓的 u-分数(一个成分变量)， $u_i$ (i 表示整个体系或者多组元体系中某个特定的相中的第 i 个组元，该组元可以是替代元素 Fe 或者替代式合金化组元或者间隙

组元)通常被定义为  $\frac{x_i}{\sum_{j \in S} x_j}$ ， $X_j$  的和表示整个体系或者特定的相中替代式基体元素和所有的替代

式合金化元素的分数和， $X_i$  表示第 i 个组元本身的摩尔分数。在仲平衡的状态下， $dT = dP = d\mu_C = du_{Fe} = du_M = 0$ ，所以驱动力为零，并且 T, P,  $\mu_C$  和  $u_{Fe}\mu_{Fe} + u_M\mu_M$  (Fe 和 M 化学势的组合体)在相界面两边必须相等。在摩尔吉布斯自由能图中(如图 8-1)，处于仲平衡下的两相的连接线指向 C 顶点，该顶点落到两个吉布斯自由能的曲面的公切线上，而不是落到公切平面上。

$T_0$ -温度(T-zero)表示在多组元体系中，在某一成分下，两相吉布斯自由能相等的温度。该温度处于两相区中，为无扩散转变的理论界限。 $T_0$ 温度的计算很有意义，例如用于研究无扩散转变。

在成分确定的多组元体系中， $T_0$  温度为一个点，该点位于某一公切线上，该公切线表示处于无扩散转变的局部平衡状态的两相的吉布斯自由能相等，而不是组元化学势相等。如果一个或者两个组元的成分变化，表示处于无扩散转变局部平衡状态下的两相的吉布斯自由能相等的公切线变为一个平面或者曲面，相应地， $T_0$  点变为一条线或者一个平面。

计算  $T_0$  温度的原理见图 8.2

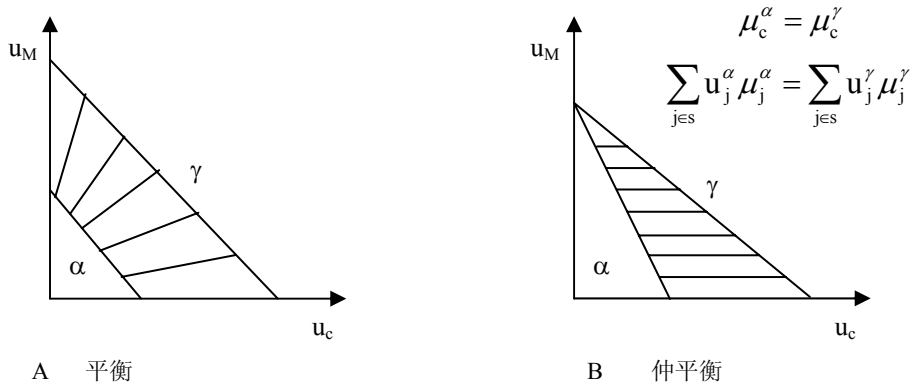


图 8-1 平衡和仲平衡状态：三元 Fe-M-C 图，M 为替代式合金化元素，C 为快速扩散元素碳。图 A 表示平衡状态下的等温截面和两相区  $\alpha+\gamma$ ，图 B 表示仲平衡状态下的等温截面和两相区。



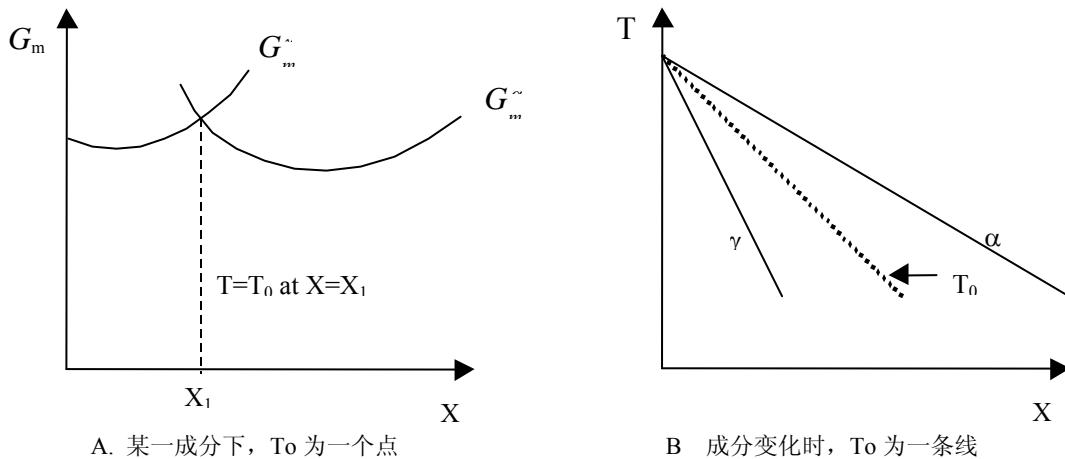


图 8-2 多组元体系中计算  $T_0$  温度的原理: 图 A 表示在某一成分  $x_i$  下, 温度为  $T_0$  时,  $\alpha$  和  $\gamma$  的吉布斯自由能相等, 图 B 表示  $T_0$  随着体系成分变化(注意:  $T_0$  不一定为直线)。

参考 Hillert(1998), pages 358-366, 可以得到关于这两个概念更多的信息。

以前, 仅 PARROT 模块能进行这两个类型的局部平衡模拟(见 TCCR Examples Book 中的例 23)。自 TCCP 版本以来, POLY 模块中采用了两个特殊的选项来进行多组元体系中仲平衡和  $T_0$  温度的模拟:

- 🌈 SPECIAL\_OPTIONS[ 即分别采用命令组 SPECIAL T-ZERO 和 SPECIAL PARAEQUILIBRIUM ] 用于单点平衡计算中。
- 🌈 STEP\_WITH\_OPTIONS[ 即分别采用命令组 STEP T-ZERO 和 STEP PARAEQUILIBRIUM ] 用于随着轴变量的一组计算。

图 8-3 为 Fe-1Cr-0.5Mn-0.5Si-0.2C (wt%) 钢的仲平衡状态计算和  $T_0$  温度计算的结果的例子。它们添加在平衡相图上。

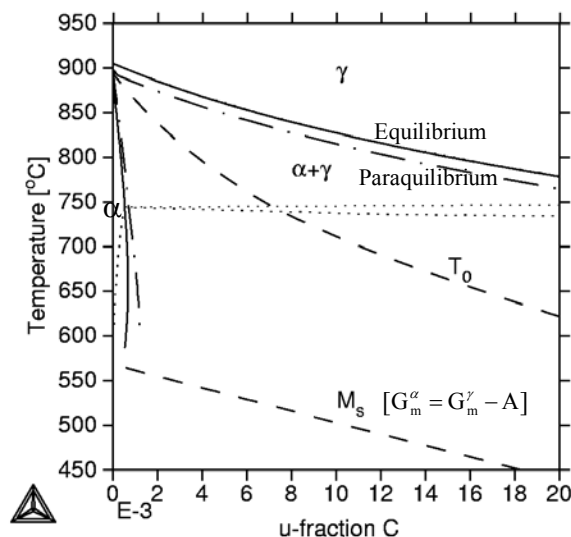


图 8-3 Fe-1Cr-0.5Mn-0.5Si-0.2C (wt%) 钢相图。图中添加了计算的仲平衡状态线和  $T_0$  温度线。

参考章节 8.10.16(命令 SPECIAL\_OPTION)和 8.9.4(命令 STEP\_WITH\_OPTIONS)和 TCCQ Examples Book 中的例 42 和 43, 能获得更多信息。

## 8.4.5 相图的 MAPPING 计算

绘制相图时, 用户必须设定两个或者更多的独立轴变量。用户可以使用任何一个已经定义的状态(见章节 8.3.5)作为 mapping 计算中的 mapping 变量, 并且过后作为相图的轴变量。除了轴变量外, 如果体系的组元数超过二, 那么用户就要设定更多的状态。从一次 mapping 计算中, 用户可以将一个 mapping 变量作为一个轴变量, 将其它的 mapping 变量或者任何一个变化的属性(状态或者衍生变量)或者输入的符号(变量, 函数或者表)作为其它的轴变量这样来绘制各种类型的相图。

二元, 三元和多组元体系相图的计算方法差不多, 无非是体系中需要设定的状态数目不同而已(见章节 8.5.1, 8.5.2 和 8.5.4)。在 mapping 计算过程中, 某相的状态可以为 FIXED (见章节 8.5.3)。同时, 软件中包含了两个能自动绘制二元和三元相图的模块, 分别为 BIN 和 TERN 模块(参考章节 10.4 和 10.5, 可以得到更多信息)。

注意: 所有的相图中包含表示某相的数量为 0 的线(即零相分数线)。但是有两种不同类型的相图, 即连接线在平面中的相图和连接线不在平面中的相图。前一种为传统的二元和三元等温截面, 后一种通常为等浓度图, 该图中, 至少有一个容量变量被固定, 通常为成分固定。

Potential 图和 Pourbaix 图是两类特殊的相图, 该图中, 连接线不在平面中。Thermo-Calc 软件中, 运用了两个特殊的模块, 即 POTENTIAL 和 POURBAIX 模块, 自动计算这两种相图和其它相关的相图(参考章节 8.4.6 和章节 10.6, 章节 8.4.7 和章节 10.7, 分别得到关于 Potential 图计算和 Pourbaix 图计算的更多信息)。

## 8.4.6 Potential 图计算

当金属-氧化物/硫化物-气体交互作用体系处于某一特定的温度和压强时, 用户可以通过将气体混合相中的两个主要物种的化学势或者活度设定为 mapping 变量来计算化学势图。然后, 用户可以绘制化学势图, 通常将这两个物种的活度(即逸度, 通常以常用对数的形式表示)设定为 X/Y 轴。该类图中, 被这两个物种的化学势控制的不同区域表示了气相混合物, 各种金属存在形式, 金属氧化物, 金属硫化物或者其它的金属物之间的相关关系。当交互作用体系处于某个特定的温度和压强下, 许多其它的性质也可以被作为轴变量来绘制不同的性质图。

总之, POTENTIAL 模块能自动计算 Potential 图和其它相关的图(参考章节 10.6, 可以得到更多的信息)。

## 8.4.7 Pourbaix 图计算

包含多相交互作用体系的水溶液在特定的温度和压强下的 Pourbaix 图(即 PH-Eh 图)为一类特殊的相图, 该类图中, 连接线不处于平面中。Pourbaix 图采用两个体系组元, 即 H<sup>+</sup>和 EA 的化

学势或者活度作为 mapping 变量，并且它们也通常被定义为 X/Y 轴。该类图中，被酸度和电势控制的不同区域表示了水溶液与不同的金属存在形式，即氧化物，氢氧化物，硫酸盐，硝酸盐，硅酸盐，碳酸盐或者其它的固体，气相混合物之间的相关关系。当交互作用体系处于特定的温度和压强下，许多其它的性质也可以被作为轴变量来绘制不同的性质图。

总之，POURBAIX 模块能自动计算 POURBAIX 图和其它相关的图（[参考章节 10.7，可以得到更多的信息](#)）。

## 8.4.8 图的绘制

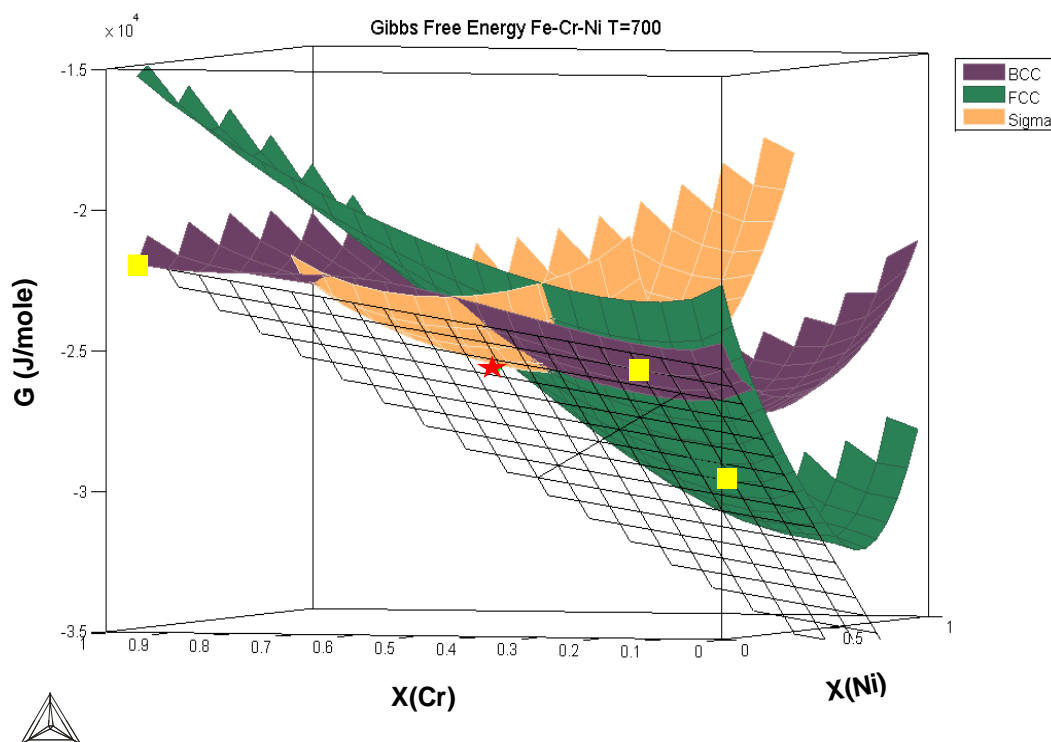
当执行了命令 STEP 或者 MAP 后，在独立的后处理程序 POST 模块中，生成高质量的表示计算结果的图形，同时，图形中可以加入实验数据来与计算结果进行比较。命令 POST 将程序控制权转移到后处理程序，即 POST 模块上（[参考第 9 部分，可以得到关于 POST 模块中的命令的更多信息](#)）。

## 8.4.9 从吉布斯自由能最小化到全域最小化

Thermo-Calc 软件中采用的吉布斯自由能最小化技术（GEM）已经被证明为热力学计算的最好技术之一，因为它能高效和方便地交互访问 GES 模块中的吉布斯自由能的表达式，POLY 模块中的计算的相稳定性，相集合，新相形成，TAB 模块中的衍生热力学函数(包括反应常数)，PARROT 模块中被评估的热力学参数。由于直接采用了热力学函数，即吉布斯自由能，它在数学和热力学上都保证了特定的材料体系中热力学数据的内在一致性和多组元体系/过程热力学计算的高效性。

新版本的 Thermo-Calc 软件，TCCR 和 TCW(以及新版本的 DICTRA 软件和各种 Thermo-Calc 程序界面)的一个主要改进是新采用了全域最小化技术，它能保证当前平衡计算中的最小值为此状态下最稳定的最小值。换句话说，就是它能避免用户最后得到亚稳定或者不稳定(局部)的平衡。另外，在处理单个或者多个溶解度间隙时，它能自动设定成分，而不需要用户先前设定。

该项技术可以用图 8-4 来说明。该例子采用 Fe-Cr-Ni 体系，在温度为 700K 和压强为



1bar(100000Pascal)时, 对于总成分为  $X_{Fe}=0.5$ ,  $X_{Cr}=0.4$  和  $X_{Ni}=0.1$  合金 (以红星表示), 我们寻找一个稳定的最小值。当在新版本中的 POLY 模块(见章节 8.7.4)中执行命令 COMPUTE-EQUILIBRIUM 时, 程序首先计算一组网络, 该网络由体系中所有单个相的离散化的吉布斯自由能函数组成。通过使用这些网络和已定义的平衡状态, 我们可以在表示最低吉布斯自由能的公切面上找到近似结果。在这个例子中, 该平面由三个不同的黄色方框(表示 BCC#1+BCC#2 溶解度间隙和 FCC 相)表示的点表示。这些点以及计算得到的每个相的数量被作为随后的 POLY 优化中的初始点, 从而真正地达到全域最小化(即最稳定的平衡状态)。

图 8-4. 全域最小化 vs 局部最小化

该图为温度为 700K 和压强为 1bar 的状态下, Fe-Cr-Ni 体系中 (总成分  $X(Fe)=0.5$ ,  $X(Cr)=0.4$  和  $X(Ni)=0.1$ , 以红星表示) BCC ( $\alpha$ ), FCC ( $\beta$ ) 和 SIGMA ( $\sigma$ )相的吉布斯自由能曲面。

全域最小化技术找到了最小吉布斯自由能平面, 该平面由三个不同的黄色方框(表示 BCC#1+BCC#2 溶解度间隙和 FCC 相)表示的点表示。这些点以及计算得到的每个相的数量被作为随后的 POLY 优化中的初始点, 从而真正地达到全域最小化(即最稳定的平衡状态)。如果没有全域最小化技术, 那么计算可能以局部最小值结束, 该最小值表示 SIGMA ( $\sigma$ )可能与 BCC 和 FCC 相处于亚稳平衡状态。

在目前的 TCCR 和 TCW4 版本中, 全域最小化技术完全支持的状态如下:

|                |                 |
|----------------|-----------------|
| T              | 体系的温度 (K)       |
| P              | 体系的压强 (Pascal)  |
| N              | 体系的大小 (mole)    |
| N(<component>) | 体系中组元的摩尔量(mole) |
| X(<component>) | 体系中组元的摩尔分数      |
| B              | 体系的大小 (grams)   |
| B(<component>) | 体系中组元的质量        |
| W(<component>) | 体系中组元的质量分数      |

如果在目前的 TCCR 和 TCW4 版本中采用其它类型的平衡状态, 那么程序将会在初始的 PLOY 优化(采用传统的 GEM 技术)后进行全域最小化的检测和校正直到找到最小值。其它类型的状态如下:

- 化学势和活度, 以及它们的对数:
 

|                 |    |                  |           |
|-----------------|----|------------------|-----------|
| MU(<component>) | 或者 | MUR(<component>) | 体系中组元的化学势 |
| AC(<component>) | 或者 | ACR(<component>) | 体系中组元的活度  |
- 特定相中某组元的成分:
 

|                        |            |
|------------------------|------------|
| N(<phase>,<component>) | 相中组元的摩尔数   |
| X(<phase>,<component>) | 相中组元的摩尔分数  |
| B(<phase>,<component>) | 相中组元的质量(g) |
| W(<phase>,<component>) | 相中组元的质量分数  |
- 特定相中某物种的化学势或者活度, 以及它们的对数:
 

|                        |            |
|------------------------|------------|
| MUR(<species>,<phase>) | 溶剂相中物种的化学势 |
| ACR(<species>,<phase>) | 溶剂相中物种的活度  |

- 体系或者某一特定相的能量，例如：

|             |                 |
|-------------|-----------------|
| H           | 体系的焓值 (J)       |
| HM(<phase>) | 相的焓值 (J/mol)    |
| G           | 体系的吉布斯自由能(J)    |
| GM(<phase>) | 相的吉布斯自由能(J/mol) |

- 以包含两个或者两个以上状态变量的线性表达式的值定义的状态
- 当某个相的状态被设定为 FIXED (直接通过命令 `CHANGE_STATUS PHASE` 改变或者间接通过命令 `COMPUTE_TRANSITION` 改变)时。
- 当状态变量的偏导数(衍生变量)被设定为状态时。

注意：确定全域最小化将导致计算时间延长。

通常，在单点平衡计算中，当执行命令 `COMPUTE_EQUILIBRIUM` 时，程序缺省地使用全域最小化技术，但是用户可以通过新的 `POLY` 命令 `SET_MINIMIZATION_OPTIONS` 关闭它，同时用户也可以通过再次采用该命令来开启它（[参考章节 8.4.1, 8.7.4 和 8.10.22, 可以得到更多信息](#)）。

对于 `STEPPING/MAPPING` 计算，程序目前仅在初始化阶段(寻找起始点) 执行全域最小化技术，在实际的 `STEPPING/MAPPING` 计算中，不执行此项技术。选择这种方案是为了节省计算时间。软件开发人员正在全面地改写命令 `STEP` 和 `MAP`，在以后的主要版本中会发布。

注意：在 `PARROT` 模块中不能使用全域最小化技术进行数据的评估。这是因为在 `PARROT` 优化过程中使用的实验数据点通常为特定的实验中，特定的相(化学计量相或者溶体相)，已合理定义的相界，给定的低序子体系(一般为一元，二元，三元，四元或者多组元体系中的子体系)中的某些特定的相集合的数据，因此，这些优化中使用的数据可能实际上是体系在处于局部 / 部分平衡状态下得到的数据(这些数据在全面吉布斯自由能最小化中并不总是需要)。

## 8.5 图

### 8.5.1 二元相图

二元相图是目前文献中最常见和通过计算机计算的最多的相图。但是，大多数实际的体系包含两个以上的组元，因此，二元相图的计算更多的是作为计算实际相图的训练。

注意：软件中包含一个特殊的模块 `BIN` 用于计算二元相图([见章节 10.4](#))。但是，用户必须使用特定的数据库(例如 `BIN` 和 `PBIN`)与之匹配（[见 TCCR Examples Book 中的例 1](#)）。

通过 `POLY` 模块，除了传统的以成分和温度为轴的相图外，用户还可以计算许多不同类型的二元相图。用户可以首先通过如下方式设定状态来计算一个单点平衡：

```
SET_CONDITION T=1200, P=1E5, W(C)=.02, N=1
```

以上表示温度为 1200K，压强 1 bar，C 的质量分数为 0.02 (即百分之二)，体系包含 1 摩尔的原子。注意：用户不必设定第二个组元的数量，因为其余的量为第二个组元的数量。

这些状态设定完后，用户可以采用以下命令来计算平衡：

## CALCULATE\_EQUILIBRIUM

当计算收敛后,继续设定轴变量用于图形计算。在大多数情况下,用户一般对整个成分范围感兴趣,但是温度范围可能变化。如下: .

```
SET_AXIS_VARIABLE 1 W(C) 0 .1 0.002
```

```
SET_AXIS_VARIABLE 2 T 900 1900 25
```

以上表示轴 1 为 C 的质量分数,范围为 0 至 0.1,最大步长为 0.002;轴 2 表示温度范围为 900 至 1900K,步长为 25。

在 mapping 计算前,用户最好使用命令 SAVE 保存工作空间。这样一来,如果命令 MAP 执行失败,那么用户可以直接从 mapping 计算前重新开始,寻找一个更好的初始点。

```
SAVE
```

```
MAP
```

在后处理程序中画图。后处理程序可以自动地将用于 mapping 计算的轴设定为相图的轴。

```
POST
```

```
PLOT
```

TCCR Examples Book 中的例 4 演示了传统的计算二元相图的方法。

参考关于 POST 模块的信息(第 9 章),可以得到更多的画图方法。

## 8.5.2 三元相图

三元相图有许多种类,但是可能最常见的是等温截面。在这种截面上,温度一定,表示连接线在所计算的平面上。用户可以通过传统的方式计算等温截面和液相面上的单变量线(见 TCCR Examples Book 中的例 37)。同时,用户也可以在高级的 TERN 模块(见章节 10.5)中计算它们,但是这种模块需要与之对应的数据库(例如 PTERN) (参考 TCCR Examples Book 中的例 3,可以得到更多信息)。

在相应的数据库中提取数据后,通过如下命令,可以计算 Al-Mg-Si 体系中的一个等温截面:

```
SET_CONDITION T=823,P=1E5,N=1,X(MG)=.01,X(SI)=.01
```

```
C_E
```

注意: 由于其余的数量为 Al 的量,因此没有将 Al 的数量设定为状态。N=1 表明体系是封闭的。这次计算计算体系中的一个点。接下来定义轴变量:

```
S-A-V 1 X(MG) 0 1 0.01
```

```
S-A-V 2 X(SI) 0 1 0.01
```

当然,用户可能对整个成分范围不感兴趣,在这种情况下,用户可以根据需要设定轴的上限和下限。接着,在命令 MAP 前,使用命令 SAVE:

```
SAVE almg-si-823
```

```
MAP
```

在 POST 模块中绘图。

三元相图的垂直截面也很容易计算。用户可以在单点平衡计算中依然使用上面的状态设定,如果用户对 Mg 含量为百分之一摩尔的 Al-Si 区域感兴趣,只需定义一组不同的轴变量:

```
S-A-V 1 X(SI) 0 1 .01
```

```
S-A-V 2 T 500 2000 25
```

```
SAVE almg-si-1mg
```

```
MAP
```



在这种图中，连接线不会出现在图的平面中，因此，不能使用杠杆规则等规则。但是，用户可以计算更复杂的截面。例如从纯 Al 到  $\text{Mg}_2\text{Si}$  的截面，该截面几乎是一个准二元截面。为了进行这种截面的计算，用户可以将状态作一点改变，如下：

```
SET-CONDITION T=823, P=1e5, N=1, X(MG)-2*X(SI)=0, W(MG)=.01
```

```
C-E
```

注意：由于关系式  $X(\text{MG})-2*X(\text{SI})=0$  已经给出了 Si 的量，因此没有将 Si 的量设定为状态。另外，不要混淆 X 和 W。然后设定轴变量，保存工作空间，进行 mapping 计算

```
S-A-V 1 W(MG) 0 .1 .01
```

```
S-A-V 2 T 500 1500 10
```

```
SAVE al-mg2si
```

```
MAP
```

液相面为一类特殊的三元相图。由于每个温度线都需要一个初始值，所以计算此类相图并不容易。

但是，用户可以通过如下命令很容易地计算表示液相和两个固相平衡的单变量线：

```
SET-CONDITION T=800, P=1e5, N=1, X(MG)=0.01, X(SI)=.01
```

```
C-E
```

```
C-S P LIQ=FIX 0.3
```

```
S-C T=NONE
```

```
C-E
```

这里，用户得到液相恰好稳定的平衡。然后，将成分设定为轴变量：

```
S-A-V 1 X(MG) 0 1 .01
```

```
S-A-V 2 X(SI) 0 1 .01
```

```
SAVE almg2si-luni
```

```
MAP
```

表 8-1 概括了三元体系中用于设定平衡状态的一般规则和 mapping 变量。同时，表中也提示了如何定义不同的垂直截面。

表 8-1 在 TCC 中绘制三元体系的各种相图和性质图的方法

| <i>Phase Diagram Type</i><br>相图类型 | <i>Diagram Description</i><br>相图的描述                                                                                 | <i>Triangular Diagram</i><br>三角形相图 | <i>Perpendicular Diagram</i><br>垂直截面相图 | <i>Mapping Calculation<sup>▲</sup> and Graphical Plotting</i><br>Mapping 计算<br>图形绘制         |
|-----------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------|----------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------|
| Isothermal section<br>等温截面        | Phase boundaries over the entire or a partial composition space, at a specific T (and P)<br>特定温度和压强下，整个或者部分成分空间上的相界 | X(A)-X(B)<br>-X(C)                 | X(A)-X(B)                              | mapped in X(A) and X(B), under specific T and P<br>在特定温度和压强下，以 X(A)和 X(B)作为轴变量进行 mapping 计算 |
|                                   |                                                                                                                     |                                    |                                        | plotted for phase boundaries at a specific T (and P)<br>在特定温度和压强下，绘制相界                      |



|                         |                                        |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                            |                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|-------------------------|----------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|-------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 液相面<br>Liquidus surface | Monovariant lines<br>单变量线              | Projection of all the monovariant (or called univariant) lines where the liquid phase is stable with two condensed phases at varied T and a specific P, over the entire or a partial composition space<br>整个或者部分成分空间上, 所有单变量线(表示在变化的温度和特定的压强下, 液相和两个固相平衡)的投影图                                                                                                         | X(A)-X(B)<br>-X(C)<br>[-T] | X(A)-X(B)<br>[-T] | mapped in X(A) and X(B), under various T and a specific P, where the liquid phase has a fixed phase status (with a fixed amount 0-1.0 mole)<br>在特定的压强和变化的温度下, 以 X(A)和 X(B)作为轴变量进行 mapping 计算, 液相的状态为 fixed(量被确定在 0-1.0 mole)                                                                                                          |
|                         |                                        |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                            |                   | plotted for the monovariant lines on the liquidus surface, with or without the varied T (in K or °C) plotted as tic-marks on the lines<br>绘制液相面上的单变量线 with or without the varied T (in K or °C) plotted as tic-marks on the lines                                                                                                     |
|                         | Isothermal surface projection<br>等温面投影 | Projections of all the monovariant lines (where the liquid phase is stable with two condensed phases at varied T and a specific P), and of some T contours (isothermal invariant lines, in K or °C) of the liquidus surface, over the entire or a partial composition space<br>整个或者部分成分空间上所有单变量线(表示在变化的温度和特定的压强下, 液相和两个固相平衡)和各种温度下液相面的轮廓线(等温零变量线, 以 K 或者 °C 作为单位)的投影图 | X(A)-X(B)<br>-X(C)<br>[-T] | X(A)-X(B)<br>[-T] | mapped in X(A) and X(B), under various T and a specific P, where the liquid phase has a fixed phase status (with a fixed amount 0-1.0 mole). And there must be an individual start point for each separate T contour<br>在特定的压强和变化的温度下, 以 X(A) 和 X(B)作为轴变量进行 mapping 计算。该图中, 液相的状态为 fixed(量被确定在 0-1.0 mole)。每一个单独的 T 轮廓线, 必须有一个单独的初始点。 |
|                         |                                        |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                            |                   | plotted for the monovariant lines on the liquidus surface, together with some projected liquidus T contours (isothermal invariant lines, in K or °C)<br>绘制液相面上的单变量线和各种温度下液相面轮廓线的投影 (等温零变量线, 以 K 或者 °C 作为单位)                                                                                                                           |

|                          |                                                                                                                                                                                                                                         |  |                                    |                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|--------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Isopleth<br>等浓度截面        | Stable phases in relation with T and one of composition variables (with another one is kept constant), at a specific P. It is a special case of vertical section (see below)<br>在特定的压强和某个成分一定的情况下，表示稳定相与温度和另外一个成分变量的关系，它是一种特殊的垂直截面(见下面) |  | X(A)-T<br><br>X(B)-T               | mapped in X(A) or X(B) and T, under a constant X(C) and at a specific P<br>在特定的压强下和固定成分 X(C)下，以 X(A)或者 X(B) 和 T 进行 mapping 计算<br><br>plotted stable phase relations under various X(A) or X(B) and T, at a specific X(C) and P<br>在特定的压强和固定成分 X(C)下，以 X(A)或者 X(B) 和 T 绘制稳定相关系                    |
| Vertical section<br>垂直截面 | Stable phases in relation with T and a specific composition section [expressed by a correlation among two of the composition variables <sup>①</sup> ] at a specific P<br>在特定的压强下，表示稳定相与温度和特定的成分区间(由两个成分变量的相互关系表示)的关系                    |  | X(A)-T<br><br>X(B)-T<br><br>X(C)-T | mapped in X(A) or X(B) or X(C) and T, under a defined composition relation and at a specific P<br>在特定的压强和已定义的成分关系下，以 X(A)或者 X(B) 或者 X(C) 和 T 进行 mapping 计算<br><br>plotted stable phase relations along the defined composition section and T, under a specific P<br>在特定的压强下，依照已定义的成分区间和 T 绘制的相关系 |

▲ 在 POLY 模块中，定义与成分有关的平衡计算状态和 mapping 变量时，用户不仅可以采用组元 X 的摩尔分数  $X(\text{component})$ ，还可以采用组元的摩尔量  $N(\text{component})$ ，质量  $B(\text{component})$ ，质量分数  $W(\text{component})$ ，化学势  $MUR(\text{component})$ ，活度  $ACR(\text{component})$ 。相应地，可以生成这些类型的相图。不过，在这个表中，它只指 X。

① 三元体系中垂直截面的成分关系：

一般情况下，三元体系(A-B-C)中，表示成分变量( $X_A$ ,  $X_B$ ,  $X_C$ )沿着垂直截面从一个已知的成分点( $X_A'$ ,  $X_B'$ ,  $X_C'$ )到另外一个成分点( $X_A''$ ,  $X_B''$ ,  $X_C''$ )的相互关系如下：

$$[X_{B'} - X_{B''}] X_A - [X_{A'} - X_{A''}] X_B = [X_{B'} - X_{B''}] X_{A''} - [X_{A'} - X_{A''}] X_{B''}$$

$$[X_{C'} - X_{C''}] X_A - [X_{A'} - X_{A''}] X_C = [X_{C'} - X_{C''}] X_{A''} - [X_{A'} - X_{A''}] X_{C''}$$

$$[X_{C'} - X_{C''}] X_B - [X_{B'} - X_{B''}] X_C = [X_{C'} - X_{C''}] X_{B''} - [X_{B'} - X_{B''}] X_{C''}$$

### 8.5.3 准二元相图和准三元相图

准二元相图以及准三元相图等图，经常被错误理解和滥用。一个真正的准二元相图用于一个组元的化学势或者活度一定的三元体系中。一个真正的准三元相图用于一个组元的活度或者化学势一定的四元体系中。

准三元体系的一个典型例子是在 C 的活度一定的情况下，计算的四元体系 Fe-Cr-Ni-C。状态设定如下：

```
SET-REF-STATE C GRAPH ,,,,
```

```
SET-CONDITION T=1273, P=1e5, N=1, X(CR)=.1, X(NI)=.1, ACR(C)=.002
```

在某些情况下，如果用户固定一个相(相的成分可能变化)，那么在准二元截面中活度将会变化。准二元截面的好处是连接线会处于平面中，因此，依然遵守杠杆规则等规则。

Ca-Fe-O 体系中，当液体氧化物与液体 Fe 处于平衡时，可以通过如下命令来设定准二元截面：

```
DEFINE-COMPONENTS CAO FE FEO
```

```
SET-CONDITION T=1850, P=1e5, N=1, X(CAO)=.1
```

```
CHANGE-STATUS FE-LIQ=FIX 0
```

然后设轴进行 mapping 计算：

```
S-A-V 1 X(CAO) 0 1 .01
```

```
S-A-V 2 T 1500 2000 25
```

然而，对于纯铁，温度低于 1811K 时，Fe-LIQ 处于不稳定的状态。用户可以通过对 Fe 的稳定修改来计算分开的截面。

TCCR Examples Book 中的例 17 演示了如何计算准二元相图。

## 8.5.4 高度有序相图

Thermo-Calc 软件的一个独特的功能是能灵活地计算多组元体系的相图。尽管某些软件可以计算多组元体系中特定的截面，Thermo-Calc 是唯一能在成分空间内计算任意二维区域的软件。但是，这些相图的计算没有什么特别之处，它们的计算方法同二元相图一样简单，只是因为组元数增加，而要设定更多的状态。用户也可以将活度，固定的相状态，分数状态设定为状态(只要他们描述了一个合法的平衡)。例如，质量含量为 15% Cr, 5% Co, 2% Mo, 5% Ni, 1% V, 2% N, 其余为 Fe 的钢在 C 含量为 0-1.5%，温度为 700-1500°C 时的垂直截面可以通过下面的命令进行计算：

```
SET-CONDITION T=1000, P=1e5, N=1, W(CR)=.15, W(CO)=.05, W(MO)=.02
```

```
SET-CONDITION W(NI)=.05, W(V)=.01, W(N)=.002, W(C)=.01
```

```
C-E
```

```
S-A-V 1 W(C) 0 .015,,
```

```
S-A-V 2 T 800 1800 25
```

```
SAVE isop1
```

```
MAP
```

## 8.5.5 性质图

这类图的计算使用一个独立轴。在 Thermo-Calc 软件中，通常采用命令 STEP 来计算（见章节 8.4.2 “性质图的 stepping 计算”和章节 8.4.3 “凝固过程模拟”）。

一种常见的性质图是当所有的成分都被固定，而只有温度变化的性质图。在 POST 模块中，用户可以根据需要绘制各种为温度的函数的变量，例如稳定相的数量，特定相的成分，某个组元的活度(在整个体系中或者在特定的相中)等。

注意：predominance 图是一类特殊的性质图。该图通常将温度，pH，Eh 或者某个主要组元的成分作为一个轴变量，在此类图中，曲线将表示主要物种(一般由活度决定)的区域分开。

当进行一次 MAP 计算或者一次特殊模块(例如 BIN, TERN, POTENTIAL 和 POURBAIX)的计算后，整个体系，稳定相，体系中的组元，某个特定的相，某个特定的相中的物种的许多属性都可以被设定为轴变量，从而用于画图。有时，这些图也被称作“性质图”。然而，它们必须被称为相图的特殊类型，因为尽管仅使用了一个 mapping 变量作为轴变量，但是，它们表示了所绘制的性质沿着相边界的变化。

## 8.6 普通命令

### 8.6.1 HELP

*Description:* 该命令用于列出可用的命令或者给出特定命令的解释。

*Synopsis 1:* HELP <command name>

*Synopsis 2:* HELP

*Ensuing Prompt:* COMMAND: <command name>

*Options:* command name -- 需要提供帮助的命令的名称(该命令为POLY模块中的命令)。

*Notes:* 如果在HELP后不输入某个命令的名称，而只输入回车，那么将列出所有可用的POLY命令。

如果在HELP后输入某个唯一的命令名称，那么将给出这个命令的解释(通常与 User's

Guide中的解释一样)。

如果在HELP后输入不唯一的缩写命令名称，那么将会列出所有匹配的命令。只有输入唯

一的缩写命令名称或者完整的命令名称，那么才会给出用户所想要的命令信息。

### 8.6.2 INFORMATION

*Description:* 该命令用于给出POLY模块中的主题词（概念和模型）的基本信息。本章中的各部分别介

绍了这些概念和模型。

*Synopsis:* INFORMATION

*Ensuing Prompt:* WHICH SUBJECT /PURPOSE/: <a subject and unique subject>

用户必须给出主题词的名称(或者它的缩写形式，但是该缩写形式必须唯一，例如, SIN,

SIT, SOL, SPE, STATE, STEP, SYM, SYS, SUB等等)。

可供输入的主题词如下(通过输入”?”可以得到这个目录):

|                              |                       |                        |
|------------------------------|-----------------------|------------------------|
| PURPOSE                      | GETTING STARTED       | USER INTERFACE         |
| HELP                         | MACRO FACILITY        | PRIVATE FILES          |
| BASIC THERMODYNAMICS         | SYSTEM AND PHASES     | CONSTITUENTS AND       |
| SPECIES                      |                       |                        |
| SUBLATTICES                  | COMPONENTS            | SITE AND MOLE          |
| FRACTIONS                    |                       |                        |
| COMPOSITION AND CONSTITUTION |                       | CONCENTRATION          |
| STATE VARIABLES              | INTENSIVE VARIABLES   | EXTENSIVE VARIABLES    |
| DERIVED VARIABLES            | UNITS                 | BASIC UNITS            |
| SYSTEM UNITS                 | COMPONENT UNITS       | PHASE UNITS            |
| PHASE-COMPONENT UNITS        | SPECIES UNITS         | USER UNITS             |
| SYMBOLS                      | REFERENCE STATES      | METASTABLE             |
| EQUILIBRIUM                  |                       |                        |
| CONDITIONS                   | AXIS-VARIABLES        | SPECIAL OPTIONS        |
| CALCULATIONS TYPES           | SINGLE EQUILIBRIUM    | INITIAL EQUILIBRIUM    |
| STEPPING                     | SOLIDIFICATION PATH   | PARAEQUILIBRIUM AND T0 |
| MAPPING                      | PLOTTING OF DIAGRAMS  | TABULATION OF          |
| PROPERTIES                   |                       |                        |
| DIAGRAM TYPES                | BINARY DIAGRAMS       | TERNARY DIAGRAMS       |
| QUASI-BINARY DIAGRAMS        | HIGHER ORDER DIAGRAMS | PROPERTY DIAGRAMS      |
| POTENTIAL DIAGRAMS           | POURBAIX DIAGRAMS     | AQUEOUS SOLUTIONS      |
| ORDER-DISORDER               | TROUBLE SHOOTING      | FAQ                    |

### 8.6.3 GOTO\_MODULE

*Description:* 该命令用于在模块之间进行切换。用户必须输入所希望打开的模块名称。通过输入回车,

可以得到可供输入的模块名称目录 ([也可见章节 5.4.11](#))。

*Synopsis 1:* GOTO\_MODULE <module name>

*Synopsis 2:* GOTO\_MODULE

*Ensuing Prompt:* MODULE NAME:

NO SUCH MODULE, USE ANY OF THESE:

SYSTEM\_UTILITIES

GIBBS\_ENERGY\_SYSTEM

TABULATION\_REACTION

POLY\_3

BINARY\_DIAGRAM\_EASY  
DATABASE\_RETRIEVAL  
REACTOR\_SIMULATOR\_3  
PARROT  
POTENTIAL\_DIAGRAM  
SCHEIL\_SIMULATION  
POURBAIX\_DIAGRAM  
TERNARY\_DIAGRAM  
MODULE NAME: <module name>

*Options:* module name -- 用户希望打开的模块名称

## 8.6.4 BACK

*Description:* 该命令用于使程序退回到最近使用的模块(见命令GOTO MODULE)。如果用户从POST模块中退出，那么只能回到TAB或者POLY模块(因为需要从这些模块中进入到POST模块中)。

*Synopsis:* BACK

## 8.6.5 SET\_INTERACTIVE

*Description:* 该命令用于将输入和输出设备重新设定为它们的初始值，即键盘和屏幕。注意：在MACRO文件结尾处添加此命令。

*Synopsis:* SET\_INTERACTIVE

## 8.6.6 EXIT

*Description:* 该命令用于终止程序，并且回到操作系统界面。如果之前没有执行命令SAVE (在GES, POLY或者PARROT模块中)，那么所有的数据和结果都将丢失。

*Synopsis:* EXIT

## 8.7 基本命令

## 8.7.1 SET\_CONDITION

**Description** 该命令用于设定用于计算的平衡状态。用户可以使用所有类型的状态变量，以及大多添加M / W / V / F 后缀(用于标准化)和R后缀(表示与所选的参考状态有关)的状态变量作为状态。

在Thermo-Calc软件系统中，对于多组元体系，除了温度和压强，用户还可以设定多种类型的状态，这就为复杂的计算提供了极大的灵活性和有效性。

在对多组元体系设定状态的过程中，用户必须重复使用该命令直到体系的自由度为零。当一个特定的相被设定为FIX状态时(通过命令CHANGE STATUS设定，见章节8.10.3)，等同于设定了一个状态(表示在体系中，该特定相处于稳定状态)。

**Synopsis 1:** SET\_CONDITION <condition(s)>

用户必须明确设定每个状态。用户可以在同一行上(每个状态由”,”或者空格隔开)设定所有的状态，也可以每行设定一个状态，但是每行要以命令开头(参考章节8.3.5(状态)和下面的范例，可以获得更多的信息)。

范例：

```
SET_COND T=1273, P=1E5, W(C)=.0015, X(LIQ,CR)=.22, ACR(N)=.2
```

或者

```
SET_COND T=1273, P=1E5
```

```
SET_COND W(C)=.0015, X(LIQ,CR)=.22 ACR(N)=.2
```

在这个例子中，用户将温度设定为1273K，压强为1bar(1E5Pascal)，C的质量分数为0.0015，Cr的摩尔分数为0.22，N的活度为0.2。

**Synopsis 2:** SET\_CONDITION

**Ensuing Prompt:** State variable expression: <state variable name or linear expression>

这个问题含义很模糊，但是要求用户输入状态变量或者线性表达式。

在设定状态的过程中，可以使用的状态变量如下：

|                        |                                                                |
|------------------------|----------------------------------------------------------------|
| T                      | temperature in the system (in K)[温度(K)]                        |
| P                      | pressure in the system (in Pascal)[压强(Pascal)]                 |
| N                      | system size (mole number in moles)[体系的大小 (mole) ]              |
| B                      | system size (mass in grams)[体系的大小 (g) ]                        |
| N(<component>)         | mole number of a component in the system<br>(体系中组元的摩尔数)        |
| X(<component>)         | mole fraction of a component in the system<br>(体系中组元的摩尔分数)     |
| W(<component>)         | mass fraction of a component in the system<br>(体系中组元的质量分数)     |
| ACR(<component>)       | activity of a component in the system<br>(体系中组元的活度)            |
| MUR(<component>)       | chemical potential of a component in the system<br>(体系中组元的化学势) |
| X(<phase>,<component>) | mole fraction of a component in a phase<br>(相中组元的摩尔分数)         |
| W(<phase>,<component>) | mass fraction of a component in a phase<br>(相中组元的质量分数)         |



## Thermo-Calc 用户指导书

|                        |                                                                     |
|------------------------|---------------------------------------------------------------------|
| ACR(<species>,<phase>) | activity of a species in a solution phase<br>(溶体相中物种的活度)            |
| MUR(<species>,<phase>) | chemical potential of a species in a solution phase<br>(溶体相中物种的化学势) |
| H                      | enthalpy in the system (in J)<br>[体系的焓 (J) ]                        |
| HM(<phase>)            | enthalpy of a phase (in J/mol)<br>[相的焓(J/mol)]                      |

另外，还有许多其它的状态变量也可以用于设定状态。执行命令组INFO

STATE\_VARIABLES，可以得到更多的信息。

通常，一个状态就是一个有值的状态变量。例如：

```
T=1273.15
P=1E5
X(C)=.002
W(CR)=0.5
ACR(CR)=0.85
X(FCC,C)=.001
H=-250000
HM(BCC)=-225000
```

一个状态也可以是一个有值的线性表达式。该表达式包含两个或者更多的状态变量。例如：

```
X(LIQ,S)-X(PYRR,S)=0
```

以上的表达式表示了一种状态，即S在LIQUID 和 PYRRHOTITE 相中的摩尔分数相等，实际上，这表示熔点。注意：表达式中的等号后面仅能输入数值。

**Factor:** <a factor for the state variable, or a continuation>

这个问题的含义更模糊，它表明用户没有回答先前的问题。程序要求用户输入单个状态变量，或者完整的状态变量表达式，或者只有一个状态变量的表达式中的数值因子。在状态表达式中，一个状态变量可以在前面乘以一个常数因子。例如：

```
2*MUR(FE)+3*MUR(O)=-35000
```

以上表达式表示一种状态，即FE的化学势的两倍加上O的化学势的三倍等于 -35000 J/mol。

**State variable:** <a specified state variable, or a continuation>

如果用户没有在提示 “State variable expression”或者 “Factor”中给出单个状态变量的名称或者给出的表达式不完整，例如，“T-” 或者“2\*MUR(FE)+”，对此程序将通过该提示要求用户继续输入未完成的表达式。用户必须输入一个状态变量或者一个完整的状态变量表达式，或者完成不完整的状态变量表达式。如果在这个提示前，用户已经输入了一个数值因子，那么这里只能输入一个状态变量；否则，程序将会采用第一个状态变量去完成表达式(即用数值因子乘以该状态变量)。

**Value /x/:** <a numeric value, a constant or a variable>

状态的值。它可以是一个数值，一个常数或者一个变量。程序会给出一个缺省的值。

NONE表示取消该状态。

## 8.7.2 RESET\_CONDITION

*Description:* 这个命令不存在！但是通过再次使用命令SET\_CONDITION输入新的值可以重新设定状态。

通过NONE可以取消某一状态。

*Synopsis 1:* SET\_CONDITION <condition>=<new value>

*Synopsis 2:* SET\_CONDITION <condition>=NONE

*Example:* SET\_CONDITION T=1673.15

说明：重新将温度设定为1673.15K

SET\_COND T=NONE

说明：取消温度状态

*More:* 通过下面的命令可以取消所有的状态：

SET\_CONDITION \*=none

## 8.7.3 LIST\_CONDITIONS

*Description:* 该命令用于将所有通过命令SET\_CONDITION和命令组CHANGE\_STATUS PHASE ...=FIXED <0 or 1 or alike> 设定的状态显示到屏幕上。通过命令 LIST\_EQUILIBRIUM也可以将当前的状态显示到屏幕上。

同时，屏幕上也将显示体系的自由度。通过这个信息，用户可以判断后序步骤。

如果自由度为零，用户可以输入命令COMPUTE\_EQUILIBRIUM。

如果自由度大于零，表明还需要设定一些状态，用户必须通过命令SET\_CONDITION 或者CHANGE\_STATUS 来进一步设定状态。

如果自由度小于零，表明设定了过多的状态，用户必须通过SET\_CONDITION 命令(将要取消的状态的值设定为NONE)或者CHANGE\_STATUS(即将一个相的状态由FIXED设定为ENTERED或者DORMANT或者SUSPENDED状态)来取消多余的状态。

*Synopsis:* LIST\_CONDITIONS

*Example Output:* P=100000, T=800, N(NI)=1E-1, N=1

FIXED PHASES

FCC\_A1=1 LIQUID=0

DEGREE OF FREEDOM 0

## 8.7.4 COMPUTE\_EQUILIBRIUM

*Description:* 该命令用于计算给定的平衡状态，同时给出计算所用的迭代次数和CPU时间。

**特别注意：** 自TCCR版本以来，执行命令C\_E时，程序缺省地采用全域最小化技术，但是，对于目前的单点平衡计算，如果采用命令组合“C\_E-”或者“C\_E\*”，该项技术可以被暂时关闭，另外，如果用户通过命令SET\_MINIMIZATION\_OPTION(见章节8.10.22中的详细信

息)改变最小化选项而关闭该项技术, 或者在某些特殊的模块中, 对于当前的TCC程序中的所有随后的连续单点计算或者stepping/mapping计算, 该项技术将被永久关闭。

参考章节8.4.9, 可以得到关于新的全域最小化技术和传统的GEM技术(即一直沿用到目前TCCR/TCW4版本中的普通POLY最小化程序)的详细信息, 参考章节8.4.1, 可以得到关于单点计算的方法。

Synopsis 1: COMPUTE\_EQUILIBRIUM

Synopsis 2: COMPUTE\_EQUILIBRIUM \*

Synopsis 3: COMPUTE\_EQUILIBRIUM -

**Notes:** 从TCCR版本开始, 在平衡计算中使用命令组合 “C\_E -”, 程序就将执行普通的POLY最小化程序(即传统的GEM技术)。这是因为现在普通的“C\_E”命令与全域最小化技术相结合 (如果它没有在当前计算前被关闭), 只有当全域最小化技术被永久关闭后, 命令组合体“C\_E”才等同于“C\_E-”。

然而, 在目前的TCCR 版本中, 只有某些类型的平衡状态变量[ $\mu$  T, P, N, N(<component>), X(<component>), B, B(<component>) 和 W(<component>)] 在全域最小化模块(称作“直接最小化”)中被完全支持; 当用户使用一些其它类型的平衡状态(见章节8.4.9)时, 在初始的POLY优化(采用传统的GEM技术)后, 程序将会执行全域最小化检测和校正直到找到最低的最小值(称作“间接全域最小化”)。

在TCCR以前的版本中, 如果遇到了收敛困难, 用户可以采用命令组合“C\_E \*”。符号\*表示程序将执行一种更高级的技术(比传统的GEM技术更强), 从而得到一个更复杂的平衡。然而, 值得注意的是在成功地进行“C\_E \*”计算后, 用户可以再次执行“C\_E”命令, 并且检查相 / 物种 / 组元的状态(通过命令LIST\_STATUS CPS), 平衡状态(通过命令LIST\_CONDITION), 以及列出计算结果(通过命令LIST\_EQUILIBRIUM), 因为这些结果可以提示用户如何进一步改进当前平衡计算中的各种设置。自TCCP版本以来, 命令组合“C\_E \*”的功能已经被进一步提高了, 然而, 在TCCR版本后, 这个命令组合不再那么有用, 因为结合了全域最小化技术的命令“C\_E”在复杂多相交互作用体系中寻找最稳定的平衡状态方面更强和更精确。因此, 只有全域最小化模块被暂时或者永久关闭后, 命令组合“C\_E \*”才能发挥作用。

执行该命令后, 程序可能没有计算出在当前平衡状态中处于不稳定状态的相的最理想的成分, 因此, 它们的驱动力可能不正确。用户可以只重复输入命令C\_E直到迭代次数(执行该命令后会显示在屏幕上)减小到2, 从而强迫程序正确计算出亚稳相的驱动力。通过POLY命令SET\_NUMERICAL\_LIMIT (章节 8.10.7), 用户可以在提示 “Approximate driving force for metastable phases” 选项中设定on (Y) 或者 off (N)用于所有随后的POLY计算。

从 TCCP版本开始, 执行该命令进行一次普通的平衡计算时, 如果任何阶段存在寻找稳定相的任何收敛困难时(除了用户开启了特殊的选项 NEVER\_ADJUST\_MINIMUM\_Y或者在某些特殊的模块中, 例如POURBAIX 和 SCHEIL 模块这两种情况外), 屏幕上将会显示出如下信息:

Convergence problems, increasing smallest site-fraction from 1.00E-30

to hardware precision 2.00E-14. You can restore using SET-NUMERICAL-LIMITS

表明当前POLY3工作空间中的最小的结点分数自动地由缺省值1.00E-30 增加到了依赖硬件的精度(PC Windows, 2.00E-14)。对于随后的其它POLY模块计算, 用户可以使用命令

SET\_NUMERICAL\_LIMITS将最小的结点分数恢复到先前的值或者重新设定为其它的值, 或者重新设定其它的数值范围(见章节8.10.7 命令SET\_NUMERICAL\_LIMITS)。

如果程序没有找到体系的平衡状态，那么将会给出错误信息。在这种情况下，用户可以在参考章节8.12（Trouble shooting）前尝试重新输入几次该命令，或者改变数值范围，或者改变初始变量和初始值，或者改变某些相的初始成分，或者某些组元的参考态的设置，或者检验某些状态来使计算收敛。

## 8.7.5 LIST\_EQUILIBRIUM

- Description:** 该命令用于在屏幕上或者以文本的方式列出最近计算的平衡结果。  
 注意：如果没有进行计算或者计算失败，用户也可以执行此命令。请用户自己解释相应的计算结果。
- Synopsis 1:** LIST\_EQUILIBRIUM <Return or file name> <option(s)>  
**Synopsis 2:** LIST\_EQUILIBRIUM
- Ensuing Prompt:** OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/: <file name>  
 计算的结果写入的文本文件的名称。缺省值为 SCREEN (仅在屏幕上显示)  
 Options /VWCS/: <option(s)>  
 用户可以通过下面字母的组合指定输出的设备和格式：
- |                                  |                                                                                                                       |
|----------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Fraction order:</b><br>(分数顺序) | V means VALUE ORDER<br>(V表示以值的大小顺序)<br>A means ALPHABETICAL ORDER<br>(A表示以字母顺序)                                       |
| <b>Fraction type:</b><br>(分数种类)  | W means MASS FRACTION<br>(W表示质量分数)<br>X means MOLE FRACTION<br>(X表示摩尔分数)                                              |
| <b>Composition:</b><br>(成分)      | C means only COMPOSITION<br>(C表示仅输出组成)<br>N means CONSTITUTION and COMPOSITION<br>(N表示输出成分和组成)                        |
| <b>Phase:</b><br>(相)             | S means including only STABLE PHASES<br>(S表示仅显示稳定相)<br>P means including ALL NON-SUSPENDED PHASES<br>(P表示显示所有没有被取消的相) |
- 缺省的选择为 VWCS。如果以摩尔分数输出 (而不是质量分数), 用户可以输入 VXCS 或者只输入X (表明这种情况下, Fraction orde选 V, Composition选C 以及Phase选S)。
- Useful Hints:** 如果接受所有的缺省选项, 或者接受所有先前通过这个命令已经改变的选项, 那么用户可以只输入“L\_E,,, ”或者LIST\_EQUILIBRIUM ,,, 。

## 8.7.6 DEFINE\_MATERIAL

**Description:** 该命令用于在POLY模块中，从数据库中读取体系的数据。当合金体系中有一个主要组元，并且其它的元素的质量分数已知时，将该命令用于该合金会给用户带来方便。执行该命令后，程序会自动从特定的数据库中读取体系的数据，设定成分和温度(压强为1bar)，然后在用户输入下一个命令前计算平衡状态。然后，用户可以通过命令LIST\_EQUILIBRIUM显示结果，或者设定新的成分，或者为命令STEP或者MAP设定轴变量。

以前，总是从TDB模块中提取数据，现在仍然推荐使用这种方式。但是随着“临时”的TCC用户的增加，除了一道开发的各种Windows界面外，很有必要向用户提供更简单的处理方式。注意：用户不能通过这种方式从不同的数据库中“增补”数据。另外，用户也可以将此命令用于自定义的数据库。

**Synopsis:** DEFINE\_MATERIAL

**Ensuing Prompt:** Same elements as before /Y/? <Y or N>

仅当用户已经从数据库中读取了一些数据，或者先前使用过命令DEFINE\_MATERIAL，或者命令DEFINE\_DIAGRAM时，程序才会给出此提示。然后程序通过一个命令提供一种能方便地改变成分和温度的方式。

注意：只有以摩尔百分比或者质量百分比为单位来定义材料体系的成分时，命令DEFINE\_MATERIAL才能够正常执行。

Mole percent of <element> /##/: <value>

或者

Mass percent of <element> /##/: <value>

如果用户决定使用相同的材料体系(在当前POLY工作空间中可被使用的体系)，那么可以通过接受缺省值“Y”来回答先前的提示“Same elements as before /Y/?”。对于体系中的每个组元，程序会给出上面的两个可供选择的提示，用户根据先前成分定义的方式(以质量百分比或者摩尔百分比)选择其中之一。

程序将重复提示，直到所有已定义的组元都被考虑到。然后，程序将要求用户设定温度状态。

.....

Database /ABCDE/: <database name>

用户必须给出该材料的数据库，或者仅输入回车来采用当前数据库。另外，用户可以使用自定义数据库。

Major element or alloy: <element name>

该材料必须有一个“主要”元素，通常为含量最多的元素。该元素的含量不会被明确设定，而只是作为“剩下的含量”而间接设定。

在一些数据库中，有预先定义的“合金”。一种合金有一个缺省的主要元素和含量在一定范围内的合金化元素。如果用户的定义在范围中，那么计算将给出合理的结果。

Composition in mass (weight) percent? /Y/: <Y or N>

缺省值为质量百分数，但是通过回答N(NO)，用户可以切换到摩尔百分数。

注意：成分必须以PERCENT而不是以FRACTION的形式给出，因为在命令SET\_CONDITION中采用的是W和X状态变量。

1st alloying element: <element name>

要求用户给出第一个合金化元素。

程序将会连续提示用户给出所有的合金化元素。但是，用户不需要考虑输入的顺序。用户必须知道该合金是否在数据库中作为已评估的体系而存在。当数据丢失时，程序不会给出错误或者警告信息。因此，请检查所选的数据库的文件。

如果用户选择了某个合金,那么程序将会列出合法的合金化元素的目录以及它们最大含量百分数。

Mass (weight) percent: <amount of the above specified element>

要求以质量百分比的形式给出合金化元素的含量。用户采用命令DEFINE\_MATERIAL时,所有的含量必须以质量百分比来表示,这样就失去了通常的Thermo-Calc程序中设定状态的灵活性。但是,用户可以过后通过命令SET\_CONDITION改变状态。

2nd alloying element: <element name>

要求给出第二个合金化元素。如果只有一个合金化元素,那么输入回车。如果给出了第二个合金化元素的名称,那么程序将要求用户输入它的质量分数。

Mass (weight) percent: <amount of the above specified element>

要求以质量百分比的形式给出上面设定的合金化元素的含量。

Next alloying element: <element name>

要求继续输入合金化元素和质量分数直到所有的合金化元素。

当用户给出了所有的合金化元素和它们的成分后,直接输入回车来回答此提示,从而结束对该材料的定义。

.....

Temperature (C) /1000/: <Temperature of interest in °C>

要求以摄氏度的形式(°C)输入温度。在提取完数据后,POLY程序将在此温度下进行首次计算。如果用户接受缺省的温度值,输入回车。

注意: 在这个命令下,压强被设定为1 bar。

Reject phase(s) /NONE/: <list of phase(s) to be rejected>

通过该命令,用户可以选择要取消的相。通常,所有的相都应该被保留,因此,用户只输入回车。

如果用户取消某个相,那么必须指定该相的名称。在一行上可以指定多个相的名称。通过输入“\*”,用户可以取消所有的相。如果所保留的相的数目远小于相的总数目,那么可以先取消所有的相,然后恢复希望保留的相,这种方法比较方便。

注意: 程序将重复给出提示,直到用户在取消所有不希望保留的相后输入回车或者输入“\*”后才会终止。

Restore phase(s) /NONE/: <list of phase(s) to be restored>

通过该命令,用户可以恢复不小心或者有意取消的相。另外,也可以恢复一些“hidden”相。

如果用户恢复某些相,那么必须指定这些相的名称。在一行上可以指定多个相的名称。另外,通过输“\*”可以恢复所有的相。

注意: 程序将重复给出提示,直到用户在恢复所有希望恢复的相后输入回车才会终止。

OK? /Y/: <Y or N>

程序将列出用户从数据库中选择的全部相,用户必须确定这种选择。如果用户先前犯了些错误或者希望修改先前的选择,那么可以回答N(No),那么将会回到关于取消相的问题上。

如果用户确定这种选择,回答Y(Yes),然后程序会从所选择的数据库中提取所有的热力学数据和可利用的参考信息。

Should any phase have a miscibility gap check? /N/: <Y or N>

通常,数据库为有溶解度间隙的相生成两个或者更多的“成分设置”。但是,对于某些相,这不是自动的,例如,在Fe-C体系bcc相中的溶解度间隙通常被忽略。但是,如果包含



富Cr的bcc相很重要，那么用户在这里指明。但是，它可能会导致计算时间延长和可能在mapping或者stepping计算时产生收敛困难。

如果用户不想为这些相设定溶解度间隙，输入回车即可。接着，命令DEFINE\_MATERIAL将开始启动平衡计算，然后终止。

如果用户为这些相指定溶解度间隙，输入Y(Yes)。然后，程序将会询问相名称和它们的成分，如下：

Phase with miscibility gap: <phase name>

用户必须指定在特定体系和状态下有溶解度间隙的相的名称。

Major constituent(s) for sublattice #: /AA/: <constituent(s)>

程序将会根据所选择的数据库中的有关相的定义，自动提供亚点阵# (1,2,3,...)的缺省成分。用户也可以为相中的亚点阵#指定一个或者更多的主要成分。

程序会重复提出此问题，直到用户指定完所有的亚点阵的成分。

Phase with miscibility gap: <phase name>

用户可以指定另外一个有溶解度间隙的相的名称，同时指定相关亚点阵中的主要成分。

通过输入回车，命令DEFINE\_MATERIAL 将启动平衡计算，然后自动终止。

.....

*Notes:*

自TCCM版本以来，用户可以使用这个命令从数据库(例如TCNI Ni基中的超合金数据库)中选择某个“合金”。在数据库中，通过关键字OPTION预定义合金，并且定义它们的缺省的主要元素和合金化元素的成分范围(参考章节6.3.16，见更多信息)。

如果在提示“Major element or alloy:”后输入“? ”，那么将列出所选择的数据库(通过“Database /ABCDE/”指定的数据库)中可使用的合金。当选择了某个特定的预定义的合金(而不是主要元素)，那么程序将会从合金定义中读取主要元素，并且显示在屏幕上(如“Alloy found with major element NI”)。

用户仅能指定合金化元素和它们的成分(以质量百分比或者摩尔百分比表示)。如果在任何一个关于合金化元素名称的提示，例如“1st alloying element:”，“2nd alloying element:”，后输入“? ”，程序将会列出合金中所有的合金化元素和它们的成分范围。

如果某个合金化元素的成分超过了它的范围，那么程序将会给出警告信息(例如“Amount above limit: 30.0000”)，并且给出提示“Override limit ? /N/.”。如果用户输入Y，强制超出成分范围，那么程序将会给出另外一条警告消息(例如“Amount of major element below limit: 70.0000”)和提示“Override limit ? /N/.”。接着用户进一步决定是否超出成分范围，如果输入Y (Yes)，表明接受主要元素成分低于限制；如果输入(No)，表明采用预定义的主要元素的成分限制。

“alloy OPTION”用于使没有经验的用户安全操作。目前，在Thermo-Calc内部，没有专门的程序去检查所选择的成分状态是否在数据库可采纳的成分范围内。但是，对于有经验的用户，可以不使用这个功能，使用旧命令。

### 8.7.7 DEFINE\_DIAGRAM

*Description:*

该命令是命令DEFINE\_MATERIAL的扩展,自TCCM版本以来,可以使用该命令。通过该命令，程序就可以自动进行计算和绘图。从开始到首次平衡计算，它与命令DEFINE\_MATERIAL完全一样。因此，在这个命令中，同样可以使用“alloy OPTION”



功能 (见章节 8.7.5)为所选择的数据库中(例如TCNI Ni-基超合金数据库)通过关键字 OPTION预定义的某个特殊合金设定合金化成分。

通过使用该命令,用户可以在设定所有的成分和初始温度(如果温度将被设定为轴变量)后计算所有类型的相图。然而,对于二元和三元相图,用户最好使用特殊的BIN和TERN模块。

该命令将会列出体系中所有的独立变量(即温度和成分),并且询问X轴。用户也必须设定X轴的最大值和最小值。第二个轴可以为独立变量目录中的一种成分(如果温度没有被设为X轴,那么也可以为温度)。由于设定了两个独立轴,程序将会计算和绘制相应的相图。

同样,用户也可以从第二个显示在屏幕上的目录上选择某个非独立变量作为Y轴,(即所有相的数量,某个特定相的成分,所有的相中某个组元的分数),程序将计算和绘制相应的性质图。

该命令将在POST模块中终止。在POST模块中,用户可以根据需要改进所计算的相图和性质图。

而且,在POST模块中绘制性质图时,通过使用命令SET\_AXIS\_VARIABLE,不仅可以成分设定为轴,也可以将其它的一些类型的变量设定为轴。

Synopsis: DEFINE\_DIAGRAM

Ensuing Prompt: Same elements as before /Y/? <Y or N>

Mole percent of <element> /##/: <value>

或者

Mass percent of <element> /##/: <value>

.....

Database /ABCDE/: <database name>

Major element or alloy: <element name>

Composition in mass (weight) percent? /Y/: <Y or N>

1st alloying element: <element name>

Mass (weight) percent: <amount of the above specified element>

2nd alloying element: <element name>

Next alloying element: <element name>

Mass (weight) percent: <amount of the above specified element>

.....

Temperature (C) /1000/: <Temperature of interest in °C>

Reject phase(s) /NONE/: <list of phase(s) to be rejected>

Restore phase(s) /NONE/: <list of phase(s) to be restored>

OK? /Y/: <Y or N>

Should any phase have a miscibility gap check? /N/: <Y or N>

Phase with miscibility gap: <phase name>

Major constituent(s) for sublattice #: /AA/: <constituent(s)>

Phase with miscibility gap: <phase name>

.....

该处将进行首次平衡计算, 等同于命令DEFINE\_MATERIAL。

然后, 程序将会给出所有可以用来设定为 X/Y轴变量的独立状态的目录。

Quit? /Y/: <Y or N>

仅当用户已经定义了某些轴变量或者先前使用过命令DEFINE\_DIAGRAM，程序才会

提出此问题。用户可以选择终止计算(Y)或者定义其它的轴继续计算(N)。

Give the number of the condition to vary /1/: <a condition index>

给出状态目录上某独立状态的索引，从而将该状态设定为X轴变量。

Minimum value /XXX/: <minimum value for X-axis>

指定所选择的X轴变量的最小值。程序会自动提供一个缺省值，用户可以通过输入回

车接受程序提供的缺省值，或者输入其它的值。

Maximum value /YYY/: <maximum value for X-axis>

指定所选择的X轴变量的最大值。程序会提供一个缺省值，用户可以通过输入回车接受程序提供的缺省值，或者输入其它的值。

*接着，程序将会给出非独立变量的目录，用户可以将它们设定为Y轴变量。*

Give the number of the quantity on the second axis /#/: <##>

用户可以只给出状态目录上某个状态相应的索引，从而将这个独立或者非独立的状态设定为Y轴变量。注意：它必须不同于已选择的X轴变量。

如果选择将某个非独立的量作为Y轴(只需给出第二个目录上相应的编号即可)，那么程序将自动计算(通过正常的stepping步骤)和生成性质图。如果选择“相的成分”，那么程序将会询问相的名称。如果选择第一个目录上任何一个其它的独立变量(状态作为Y轴，那么程序将会计算(通过正常的mapping步骤)和绘制相图。

Name of phase: /ABC/: <phase name>

仅当选择“相的成分”作为Y轴变量时，程序才会给出此提示，要求用户给出相的名称。

Save file /RESULT/: <file name>

要求用户指定用于存储计算结果的文件名称(以 \*.POLY3 文件的形式保存)；缺省的文件名为 RESULT.POLY3 ( Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME) 或者 RESULT.poly3 ( UNIX 和 Linux)。

## 8.8 Commands to SAVE and READ the POLY Data

### Structure

#### 8.8.1 SAVE\_WORKSPACES

##### Description:

Thermo-Calc软件有一个独特的功能,即能将当前的状态和程序的工作空间,包括热力学数据，状态，选项，和单点计算，stepping计算或者mapping计算的结果和选项等保存在某个\*.POLY3文件上。当用户想终止当前的程序或者保存结果以便以后使用时，可以执行此命令。

通过该命令,可以将POLY3和GES5的工作空间保存在某个文件上。在GES5工作空间中,存储了所有的热力学数据。在POLY3工作空间中,存储了所有的热力学数据,所有最新的状态设定和平衡状态,改变的状态,输入的符号,特殊的选项,定义的stepping/mapping变量,添加的初始平衡和stepping/mapping结果等,因此,它也包含了GES5工作空间。当使用命令SAVE保存工作空间后,用户可以只使用命令READ使程序准确回到使用命令SAVE前的状态。

当用户将POLY3和GES5工作空间保存到某个文件上后,可以退出程序,以后通过命令READ回到先前的状态继续操作。

注意: 命令STEP或者MAP会自动地将有关内容保存到最近指定的工作文件中。因此,用户不能在命令MAP或者STEP后使用命令SAVE!

否则,通过执行命令MAP或者STEP得到的结果将被命令SAVE破坏。用户可以添加一些由连续MAPPING或者STEPPING计算得到的结果而不破坏先前的结果,然而,执行命令SAVE后,它们都会被清除。

注意: 这个规定十分重要和有用,特别是当在单个TCC程序中计算各种等温截面(或者等浓度截面)并且将它们绘制在同一张图上的时候。

另外,用户可以通过命令AMEND\_STORED\_EQUILIBRIA,取消某些MAPPING或者STEPPING计算的结果。

*Synopsis 1:* SAVE\_WORKSPACES <file name> <Y or N>

*Options:* file name -- 要求指定文件名称。保存POLY工作空间的文件的缺省扩展名为  
 "\*.POLY3"(Windows NT/2000/XP 和Windows 95/98/ME) 或者 "\*.poly3" (UNIX 和Linux), 另外,用户也可以根据意愿使用其它的扩展名。

*Synopsis 2:* SAVE\_WORKSPACES

*Ensuing Prompt:* File name /RESULT/: <file name>

通过输入回车,用户可以将POLY3或者GES5保存在缺省的文件RESULT.POLY3 (Windows NT/2000/X和Windows 95/98/ME)或者RESULT.poly3上(UNIX和Linux)或者用户可以自己指定某个扩展名为: "\*.POLY3" 或者 "\*.poly3"的文件; 另外,用户也可以根据意愿使用其它的扩展名。

Overwrite current file content /N/: <Y or N>

(在 Windows NT/2000/XP/95/98/ME 环境中)

或者

Proceed with save /N/: <Y or N>

(在 PC Linux 和各种 UNIX 平台上)

如果已经存在一个相同名称的文件,那么程序将会提出这个问题,同时,屏幕上显示以下信息:

This file contains results from a previous STEP or  
MAP command.

The SAVE command will save the current status of the program but  
destroy the results from the previous STEP or MAP commands.

如果用户回答Y,那么先前的内容将被覆盖。

注意: SAVE命令会破坏执行命令STEP或者MAP后得到的结果。用户可以添加一些由MAPPING或者STEPPING计算得到的结果而不破坏先前的结果,然而,执行SAVE命令后,它们都会被清除。通过命令AMEND,可以取消MAPPING或者STEPPING计算的结果。

Notes:

如果用户回答N，那么将不会保存任何内容，先前的内容将不会被覆盖。用户可以在过后使用一个不同的文件名称去保存POLY3和GES5工作空间。

在Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下，如果用户没有在命令后给出文件名，那么屏幕上将会弹出一个 **Save As** 窗口，以便用户恰当地指定路径（在 **Save in**框中）和文件名（在 **File name** 框中），如图 8-4。用户不能在**Save as type**框中改变文件的类型（即POLY）。当点击SAVE按钮后，程序就会将POLY3和GES5工作空间保存在指定的\*.POLY3 文件中。同时，用户也可以取消 **Save As** 窗口，不保存当前的POLY3和GES5工作空间。

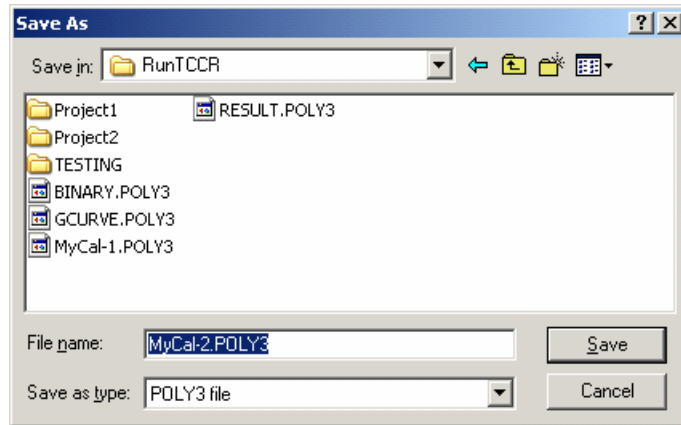


图 8-4. “Save As” 窗口：将POLY3/GES5 工作空间保存在\*.POLY3 文件上

然而，如果在目录中（由**Save in** 框指出）已经存在一个相同名称的文件，那么屏幕上将弹出一条警告消息，如图8-5。如果用户点击No按钮，那么程序将会回到**Save As**窗口，以便用户选择另外一个**Save in**路径或者某个不同的 **File name**。如果点击Yes按钮，那么程序将会给出提示“Overwrite current file content /N/”，此时，用户可以决定是否将当前的POLY3/GES5工作空间覆盖到已经存在的\*.POLY3 文件上。（见上面的内容）

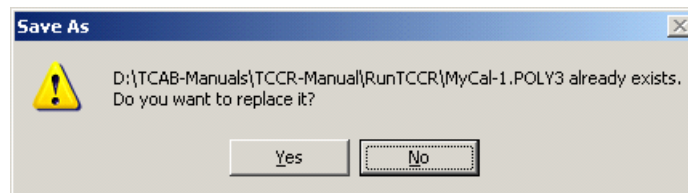


图 8-5. 警告信息：是否将当前的 POLY3/GES5工作空间保存在已经存在的 \*.POLY3 文件上

在UNIX和Linux 平台上，通过输入回车， 用户可以将POLY3和GES5工作空间保存在缺省的RESULT.poly3上(如果首次使用命令SAVE),或者先前指定的某个 "\*.poly3"文件上(如果已经使用过命令SAVE)。

Useful Hints:

当在目前的工作区域[该工作区域已经被缺省保存（在运行某些特殊模块，例如BIN, TERN, POT, SCHEIL 和 POURBAIX后）或者在当前TCC程序的早期阶段，或者在先前的程序中(该程序已经被读取到当前的POLY工作空间中)被保存]中已经存在的名称下，保存POLY工作空间时，用户只须输入“SAVE,,y” 或者如下：

SAVE\_WORKSPACE ,,y

但是，如果不破坏某些从先前的MAPPING或者STEPPING计算中得到的结果，应该避免使用该命令。

## 8.8.2 READ\_WORKSPACES

**Description:** 通过该命令，用户可以从先前通过命令SAVE\_WORKSPACES保存的文件上读取POLY3

和GES5工作空间和mapping或者stepping计算得到的结果。另外，\*.POLY3 文件不可打印。

**Synopsis 1:** READ\_WORKSPACES <file name>

**Options:** file name --要求指定POLY3文件名，程序将从该文件中读取POLY3和GES5工作空间。如果文件的扩展名为缺省的“\*.POLY3”( Windows NT/2000/XP 和Windows 95/98/ME)或者“\*.poly3 ( UNIX 和 Linux), 那么用户不必输入扩展名，否则，用户必须输入整个POLY文件名称。

**Synopsis 2:** READ\_WORKSPACES

**Ensuing Prompt:** File name /ABCDEF/: <file name>

如果在程序中还没有保存工作空间，那么程序将会显示出“ABCDEF”作为最近指定的POLY-文件名或者作为“RESULT”。通过输入回车，或者输入某个文件名称，用户可以从该文件中读取POLY3或者GES5工作空间。

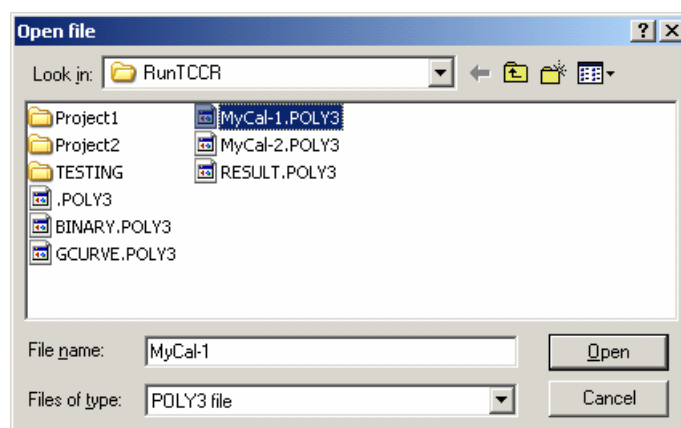


图8-6. “Open file” 窗口: 从 \*.POLY3 文件中读取POLY3/GES5工作空间

**Notes:** 在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下，如果用户在该命令后没有给出文件名称或者给出的路径错误，那么屏幕上将会弹出 **Open file** 窗口，以便用户恰当地给出路径 (在 **Look in** 框中)和文件名称 (在 **File name** 框中)，如图8-6。用户不能在 **Files of type** 框中改变文件类型(即POLY)。点击**Open**按钮后，程序将会从先前保存的POLY3文件中打开POLY3和GES5工作空间。同时，用户也可以取消**Open file**窗口，那么程

序将不会打开先前保存的POLY3和GES5工作空间。

**Useful Hints:** 当读取某个初始的POLY3工作空间时（该工作空间在当前的TCC程序中已经被保存在 \*.POLY文件中或者先前从当前的工作区域下一个存在的POLY3文件读取），只要在设置

中已经作了一些附加的改变(但是不需要在当前的TCC程序的后序步骤中保持)或者在POST模块中已经绘制了某一相图，那么用户可以仅输入“READ, ,”，或者如下：

READ\_WORKSPACE ,,

## 8.9 计算和绘制相图的命令

### 8.9.1 SET\_AXIS\_VARIABLE

**Description:** 为了计算一个图,在STEPPING计算中,用户必须至少设定一个轴变量,在MAPPING计算中至少设定两个轴变量。对于性质图,一个轴即可;对于相图,需要两个或者更多的轴。通过命令SET\_AXIS\_VARIABLE,用户可以将用于平衡计算的任何一种状态设定为轴变量(同时设定该变量的变化范围和步长),这样,在STEPPING或者MAPPING计算中,程序将会在变化范围内改变该轴变量的值。

作为TCC软件一个非常独特和强大的功能,用户最多可以设定5个独立轴变量用于多组元体系的MAPPING计算。但是,当用户设定3, 4或者5个轴时,必须将组元的化学势(或者温度,或者压强)设定为状态。

另外,用户也可以通过命令SET\_AXIS\_VARIABLE设定不同于先前平衡计算中的状态的轴变量;在这种情况下,程序将会自动生成相关的轴变量和该轴变量的变化范围,但是,用户必须意识到,如果用户设定的轴变量不是已经设定的状态,POLY模块将会生成两种状态 $P=1e5$  和  $N=1$ (如果它们还没有被定义为状态)。

用户也可以在计算中使用对数轴。这对于处理很小的分数值很有用,例如气相中的 $1e-7$  到  $1e-2$ 等。另外,压强也适合以对数形式表示。用户通过在步长值后面添加\*来指定该轴变量采用对数形式。在这种情况下,步长值相当于因子。例如:

S-A-V 1 P 1E5 1E25 5\*

以上表明,轴1的值以对数形式表示,两个计算的值之间最多相差5倍。同时,因子必须大于1。

**注意:** 在某些情况下,例如使用了命令DEFINE\_DIAGRAM,或者启动了某个特殊的高级模块(例如BIN, TERN, POT, SCHEIL 或者 POURBAIX模块),程序将会自动地设定某些轴变量,而不需要用户执行此命令。

**Synopsis 1:** SET\_AXIS\_VARIABLE <axis number> <condition> <min> <max> <length>

**Synopsis 2:** SET\_AXIS\_VARIABLE

**Ensuing Prompt:** Axis number /#/ : <an axis number>

要求指定轴的号码,该号码在1到5之间。如果轴的数量为3, 4或者5,那么用户必须将组元的化学势(或者温度,或者压强)设定为状态。

**Condition /NONE/:** <one condition>

要求指定轴变量。该轴变量为通过命令SET\_CONDITION设定的状态,例如W(C)表示C的质量分数。如果接受缺省值,那么表示取消该轴。

**Min value /0/:** <min value>

要求指定轴变量的最小值。

**Max value /1/:** <max value>

要求指定轴变量的最大值。

**Increment /.025/:** <step length>

要求指定最大步长。通常,该值为轴总长的1/40。



## 8.9.2 LIST\_AXIS\_VARIABLE

**Description:** 通过命令SET\_AXIS\_VARIABLE设定轴变量后，该命令能在屏幕上列出所有这些用于STEPPING或者MAPPING计算的轴变量。

**Synopsis:** LIST\_AXIS\_VARIABLE

所有在当前POLY3工作空间中设定的轴变量将在屏幕上显示：如：

|                  |              |              |            |
|------------------|--------------|--------------|------------|
| Axis No 1: W(C)  | Min: 0.001   | Max: 0.010   | Inc: 0.001 |
| Axis No 2: X(Cr) | Min: 0.001   | Max: 0.100   | Inc: 0.010 |
| Axis No 3: T     | Min: 1073.15 | Max: 2073.15 | Inc: 25    |

**Notes:** 如果当前的POLY工作空间中只定义了一个轴变量，那么用户只能进行STEPPING (STEP\_WITH\_OPTIONS) 计算。但是，如果用户合理地设定了两个或者更多的轴变量(最多五个)，那么用户应该执行MAPPING (MAP) 计算。

## 8.9.3 MAP

**Description:** 该命令用于从一个或者更多的初始平衡上绘制相图。注意：相图由一些线组成，在这些线上，某一相的量为零。通过该命令(见章节8.4.5)，可以生成各种类型的相图。

**Synopsis:** MAP

**Notes:** 在MAPPING计算过程中，程序将会列出每个计算的平衡的MAPPING轴变量的值和稳定的相。自TCCN版本以来，程序中取消了所计算的平衡的过长的输出形式；但是，如果通过命令SPECIAL\_OPTION (见章节8.10.22) 开启新的特殊选项

“OUTPUT\_AT\_MAP\_AND\_STEP”，那么程序可以显示这些过长的输出。

用户可以通过输入CTRL-A (PC Windows) 或者 CTRL-C (UNIX 或者 PC Linux)来结束MAPPING计算。这样做可以终止略长的计算而不会丢失已经计算的结果。

自TCCP版本以来，执行该命令进行平衡计算时，如果任何阶段存在寻找稳定相的任何收敛困难时(除了用户开启了特殊的选项 NEVER\_ADJUST\_MINIMUM\_Y外)，屏幕上将会显示出如下信息：

Convergence problems, increasing smallest site-fraction from 1.00E-30 to hardware precision 2.00E-14. You can restore using SET-NUMERICAL-LIMITS

表明当前POLY3工作空间中的最小的结点分数自动地由缺省值1.00E-30 增加到了依赖硬件的精度(PC Windows,2.00E-14)。对于随后的其它POLY模块计算，用户可以使用命令SET\_NUMERICAL\_LIMITS将最小的结点分数恢复到先前的值或者重新设定为其它的值，或者重新设定其它的数值范围(见章节8.10.7命令SET\_NUMERICAL\_LIMITS)。

MAPPING计算中的程序在所有的新版本中都在不断地被改进，在以后的版本中，仍将被改进。

特别地，对于平面上有连接线的相图，即大多数二元体系相图和三元等温截面，程序提供一个特殊的MAP程序，它能为用作轴变量的最稳定相提供检查，从而来保证连接线之间的合理步长，这样能使曲线更平滑以及提高寻找临近区域的稳定性。

如果某个相有两个或者更多的成分设置，那么在MAPPING过程中，程序将会检测溶解度间隙。另外，在某些图中，用户可能需要自己设定轴变量的步长。

在某些情况下，为了绘制一个完整的相图，用户需要计算多个初始点。



## 8.9.4 STEP\_WITH\_OPTIONS

**Description:** 该命令用于STEPPING计算。在执行该命令前，用户必须已经计算了一个平衡和通过命令SET\_AXIS\_VARIABLE设定了轴变量。程序在执行过程中，将会列出每个已计算的平衡的轴变量的值和稳定的相。该命令有若干个选项，它们是：

|                                                                                     |                    |                                                                                                                                        |
|-------------------------------------------------------------------------------------|--------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|    | NORMAL             | 表示只有轴变量变化                                                                                                                              |
|    | INITIAL_EQUILIBRIA | 表示在每次计算的平衡上，会存储一个初始平衡(还没有使用)。                                                                                                          |
|    | EVALUATE           | 表示每步后都将计算给出的变量的值，它可以改                                                                                                                  |
|                                                                                     |                    | 变其它的状态。                                                                                                                                |
|    | SEPARATE_PHASES    | 表示每步单独计算输入的相。                                                                                                                          |
|    | T-ZERO             | 表示程序将会沿着某个成分变量(被设定为STEPPING变量)计算无扩散相变中的 $T_0(T-0)$ 线(表示处于局部平衡的两个相有相同的吉布斯自由能)。自TCCP版本以来，可以使用此选项。                                        |
|   | PARAEQUILIBRIUM    | 表示程序将会沿着温度变量或者某个成分变量(该成分为主要组元或者替代组元)计算局部转变中的平衡状态[该状态下，对于处于局部平衡的两个相，它们的一个或者多个间隙元素，如C, N, O, S等的化学势相等，但是成分不同]。自TCCP版本以来，可以使用该选项，TCCQ版本中， |
|                                                                                     |                    | 极大地改进了此命令。                                                                                                                             |
|  | MIXED_SCHEIL       | 表示程序将会进行关于凝固局部平衡的Scheil-Gulliver模拟的STEPPING计算。该凝固过程中，                                                                                  |
|                                                                                     |                    | 固相中存在一个或者多个间隙物种(例如C,N,O,S等)的反扩散行为。自TCCQ版本以来，可以使用此选项。                                                                                   |

注意：通过输入CTRL-A ( Windows NT/2000/XP 或者 Windows 95/98/ME) 或者 CTRL-C (UNIX 或者 Linux)，用户可以终止STEPPING计算。

**Synopsis 1:** STEP\_WITH\_OPTIONS <a chosen option, N or I or E or S or T or P>

**Synopsis 2:** STEP\_WITH\_OPTIONS

**Ensuing Prompt:** Option? /NORMAL/: <a chosen option, N or I or E or S or T or P>

用户必须在这四个选项选择其中一个

NORMAL 以给定的状态进行STEPPING 计算

INITIAL\_EQUILIBRIA 每步都存储一个初始平衡

该命令还不能使用。它被设计用于生成所计算的平衡的矩阵。因此，用户可以使用一个轴变量，例如温度，然后执行命令STEP\_INITIAL。程序将计算一系列的平衡，并且自动将每个平衡作为执行另外一个命令STEP\_NORMAL，或者命令MAP时的初始平衡。在执行第二个命令STEP前，用户可以将成分作为轴变量，那么执行命令STEP时，程序将会采用不同的温度起始点，并且以成分变量进行STEPPING计算，因此，程序将会给出值的矩阵。实际上，用户可以更进一步地使用该命令。

### EVALUATE 每步后都求出特定变量的值

该命令为Thermo-Calc的高级用户使用的高级命令。它允许在以某个单轴进行STEPPING计算时，同时在每步后计算一个或者更多变量的值。由于变量可以被设定为状态，这表明在STEPPING计算中，用户可以改变状态。在主题词SOLIDIFICATION（Solidification Path Calculations）的介绍中，提到了该命令。

使用该选项时，需要回答下面的问题：

Variable name(s): <variable name>

要求输入在每步STEPPING计算后要计算值的变量的名称。

在一些早期版本的STEPPING计算中，通常程序会计算出所有类型的性质图，相分数图等。因此，会产生各种问题，特别是当要出现新相时。除了在命令STEP中添加一些功能来处理这个问题外，还通过对收敛过程的改进，来简化这些问题。如果某个相有两个或者更多的成分设置，那么程序在STEPPING计算（见命令SPECIAL\_OPTIONS）中会自动检测溶解度间隙。

溶解度间隙检测表明用户在对钢进行计算时，可以从MC碳化物不稳定的高温开始计算。在STEPPING计算过程中，开始阶段，MC碳化物为成分不同于FCC金属间隙相的亚稳态，后来，变为稳定相。以前，这样的计算必须从低温开始。

### SEPARATE\_PHASES 单独计算每个相

该命令可以用于在给定的温度下，绘制Gm随成分变化的曲线。

### T-ZERO 计算两个特定相的T0线

自TCCP版本以来，可以使用该选项。该命令用于沿着成分变量(该变量已经通过命令SET\_AXIS\_VARIABLE设定为STEPPING变量)计算无扩散相变中的T0(T-0)线(表示两个处于局部平衡的相有相同的吉布斯自由能)。

注意：如果用户进行T-0线计算，那么不能将温度状态设定为STEPPING计算变量。

为了保证当前体系中，在初始平衡计算后成功地进行T0线计算，尽管对于某些体系，并不需要，但是仍然推荐用户在执行命令组STEP\_WITH\_OPTION T-ZERO前，先执行命令组SPECIAL\_OPTION T-ZERO进行一次单个的T0点计算。

选择该选项时，要回答以下问题：

Name of first phase: <phase A>

Name of second phase: <phase B>

要求给出两个目标相的名称。

在STEP T-ZERO计算过程中，在相应的被扫描的状态（STEPPING成分变量）后，将会显示

示计算出的T0值。例如：

```
Phase Region from 1.000000E-01 for:
BCC_A2
```

```
FCC_A1
1.000000E-01 940.24
9.250000E-02 941.20
.....
2.500000E-03 977.61
7.500000E-09 979.34
```

```
Phase Region from 1.000000E-01 for:
BCC_A2
FCC_A1
1.000000E-01 940.24
1.075000E-01 939.62
.....
2.950000E-01 1084.87
3.000000E-01 1080.99
```

在成功地进行STEP T-ZERO 计算后，用户可以进入POST模块中绘制随STEPPING成分变量或者另外一个变化的轴而变化的T0线，或者将T0线添加到某个通常的相图上[通常为T-X垂直截面]（见TCCRExamples Book中的例23和41）。

## PARAEQUILIBRIUM

### 计算两个相之间的仲平衡状态

自TCCP版本以来，可以使用该选项。对于间隙组元作为快速扩散物种的合金体系，执行该选项，可以STEPPING计算两个相之间局部转变的仲平衡状态。

注意：在TCCP版本中，只有C可以被作为间隙组元，因此，将C设定为缺省值，但是，在TCCQ版本中，极大地提高了此选项的用途。现在，它可以在仲平衡计算中，将不止一个组元设定为快速扩散物种(例如C, N, O, S等单个元素或者组合体)。

在仲平衡状态下，沿着被命令SET\_AXIS\_VARIABLE设定为STEPPING变量的温度或者成分变量(该成分为基体或者替代组元的成分)，一种或者多种间隙组元(例如C, N, O, S等单个元素或者组合体)在两个局部平衡的相中有相同的化学势，但是成分不同。

自TCCQ版本以来，对于合金体系，该选项不仅对C元素有效，同时对其它的间隙组元(例如N, O, S等)，甚至组合体(例如C和N都被当作间隙物种)都有效。

注意：用户如果想进行STEP PARAEQUILIBRIUM 计算，那么不能将间隙组元的成分状态设定为STEPPING变量。

为了保证在合金体系中，成功地进行两个相之间的仲平衡状态的STEPPING计算，之前将初始总成分设定为状态，进行一次单点平衡计算十分重要。但是，如果目标相中的一个或者两个相在该平衡中稳定时，并不需要之前进行单点计算。同时，用户必须设定一个合理的初始总成分用于两个目标相之间的仲平衡计算，当仲平衡状态中，考虑不止一种间隙组元时，由于不同的间隙组元(例如C和N)在不同的结构相中分配行为可能有明显的区别，这就十分重要；否则，对于某些只考虑某个间隙组元的情况，计算两个相之间的仲平衡状态时，采用初始的总成分作为状态可行，但是可能在考虑其它的间隙组元(一个或者多个)的时候，可能就不行了。

另外，尽管对于某些体系并不需要，但仍然推荐用户在执行命令组STEP\_WITH\_OPTION PARAEQUILIBRIUM前，通过命令组SPECIAL\_OPTION PARAEQUILIBRIUM进行一次单点仲平衡计算。

在该选项中，用户需要回答以下问题

Name of first phase: <phase A>

Name of second phase: <phase B>

要求用户输入两个建立平衡状态的目标相A和B的名称。用户可以根据提示分别输入两个相的名称，也可以直接在一行上输入(以空格隔开，例如"FCC#2 M23C6")。

**注意：**用户必须对平衡的计算完全理解。特别地，需要注意四种不同的情况：(1)所选择的相必须有相似的供快速扩散间隙组元占据的间隙/空位亚点阵；(2)在定义的体系和指定的初始总成分下，目标相的选择必须合理；(3)两个目标相的组成定义必须包含当前合金体系中所有替代和间隙组元；或者(4)在当前定义的体系中，无法计算给定间隙组元的目标相之间的平衡状态。

Fast diffusing component: /C/: <interstitial component>

自TCCQ版本以来，可以将一个或者多个间隙组元作为快速扩散物种。

**注意：**用户必须根据目标相的相组成定义合理指定间隙组元，即所指定的间隙组元必须在目标相的组成定义中位于间隙/空位亚点阵上。

如果指定的快速扩散组元不是缺省的C，那么用户需输入合适的间隙物种。用户可以在一行上输入多个间隙物种(以空格隔开，例如"C N")。

Fast diffusing component: /NONE/:

如果当前的平衡计算中要考虑更多的快速扩散组元，那么再输入合理的间隙物种；否则，输入回车，启动平衡点计算。

在 STEP PARAEQUILIBRIUM 计算过程中，所计算的平衡状态，包括以摩尔百分比[NP(phase)]表示的相A和B的数量，以及以U-分数[例如u(phase,C) 和 u(phase,N)]表示的间隙组元在相A和B中的成分等将会在相应的扫描状态（STEPPING温度变量）后面显示。例如：

Output during stepping is:

axis value, amount of phases and composition of C in phase 1 and 2

Phase Region from 1.000000E+03 for:

```
FCC_A1#1
M23C6
1.000000E+03 ***** 4.613634E-02 2.608696E-01
-2.301756E+00
9.950000E+02 ***** 4.561035E-02 2.608696E-01
-2.293352E+00
9.900000E+02 ***** 4.508758E-02 2.608696E-01
-2.284920E+00
9.850000E+02 ***** 4.456632E-02 2.608696E-01
-2.276436E+00
9.800000E+02 ***** 4.404657E-02 2.608696E-01
-2.267900E+00
9.750000E+02 ***** 4.352831E-02 2.608696E-01
-2.259312E+00
.....
```

用户成功地进行STEP PARAEQUILIBRIUM 计算后，可以进入POST模块中绘制平衡状态图，或者将所计算的平衡状态添加到某个通常的相图上[通常为将某个间隙组元的成分作为X轴变量的T-X等浓度图，见8-7] (TCCQ Examples Book中的例23和42)。

然而，在两个相之间的平衡状态的STEPPING计算进程中，可能会在某些步骤上产生一些由于数值问题而导致的困难(通常与某成分范围内的间隙元素的U-分数有关)，或者计算完全失败。其中，后一种情况暗示所选择的目标相在目前的合金体系或者初始总成分下不合理，或者一个或者两个相的与指定的间隙元素和替代元素有关的相组成定义不合理。在这种情况下，用户必须修改初始总成分或者通过合理地选择合金体系中的快速扩散元素来合理地指定目标相。

#### MIXED\_SCHEIL

#### *Scheil-Gulliver平衡模拟*

自TCCQ版本以来，可以使用该选项。该选项用于STEPPING计算固相中有一种或者多种间隙物种 (例如 C, N, O, S等) 反扩散现象的凝固过程的局部平衡的Scheil-Gulliver模拟。

为了保证在已经指定初始总成分的合金体系中，成功地进行凝固过程的混合Scheil-Gulliver模拟的STEPPING计算，之前，用户必须特别注意以下四个方面：

- 对于可能有溶解度间隙存在的固溶相，用户已经合理地添加了必需的成分设置。
- 用户已经将温度状态设定为STEPPING轴变量(通过命令SET\_AXIS\_VARIABLE设定，同时设定温度范围和冷却过程的合理温度步长)。
- 同样，以摩尔分数或者质量分数，例如X(C)和W(N)表示快速扩散间隙组元的成分状态也很重要。否则，该选项的STEPPING计算将失败。
- 用户必须在液相稳定区域(即在温度相对较高的状态下)，进行一次单点平衡计算。

在间隙组元已经被指定为快速扩散组元的情况下，选择某一相关选项，可能允许在凝固过程中出现BCC FCC相转变。

**但是，推荐用户使用扩展的SCHEIL\_SIMULATION 模块自动进行合金凝固过程的Scheil-Gulliver模拟。**

该选项中，用户需要回答以下问题：

Fast diffusing components: <fast diffusion interstitial(s)>

要求在同一行上同时指定一种或者多种间隙组元作为快速扩散物种 (以空格隔开，例如“C N”)。

**注意：用户必须根据所选择的相的组成定义合理指定这些间隙组元，即它/它们必须在所选择的相的组成定义中位于间隙/空位点阵；否则，这样的Scheil-Gulliver 凝固没有任何意义。**

Allow BCC -> FCC ? /Y/: <Y or N>

如果当前的平衡计算中要考虑更多的快速扩散组元，那么再输入合理的间隙物种，否则，输入回车，启动平衡点计算。

在STEP MIXED\_SCHEIL计算过程中，首先计算合金的固相线温度，并且在屏幕上显示，然后所计算的凝固路径，包括剩余的液相和所有形成的固相的数量(以质量分数显示)，以及凝固过程中的潜热，会在相应的扫描状态 (STEPPING温度变量) 后显示。

例如：

Solidification starts at 1743.15 K

Phase Region from 1.744150E+03 for:  
LIQUID

Phase Region from 1.742525E+03 for:  
LIQUID  
FCC\_A1#1

## Thermo-Calc 用户指导书

|                                     |        |        |            |
|-------------------------------------|--------|--------|------------|
| 1742.5250                           | 0.9960 | 0.0040 | -1.1824    |
| 1742.4000                           | 0.9795 | 0.0205 | -202.1585  |
| .....                               |        |        |            |
| Phase Region from 1.733150E+03 for: |        |        |            |
| LIQUID                              |        |        |            |
| BCC_A2                              |        |        |            |
| FCC_A1#1                            |        |        |            |
| 1733.1500                           | 0.3294 | 0.6707 | -8032.6240 |
| 1733.0250                           | 0.3237 | 0.6763 | -8095.1490 |
| .....                               |        |        |            |

用户成功地进行STEP MIXED\_SCHEIL计算后，可以进入POST模块中根据 Scheil-Guillver 模型绘制各种描述合金凝固过程的性质图，或者在所绘制的性质图上添加相关的实验信息或者其它类型的凝固计算结果[例如，考虑或者没有考虑快速扩散间隙组元的Scheil-Gulliver模拟，平衡近似，或者带移动边界条件的DICTRA-类型模拟]。

### Notes:

在STEPPING计算中，程序将会列出每个平衡计算的STEPPING轴变量的值和稳定的相。自TCCN版本以来，程序中取消了所计算的平衡的过长的输出形式，但是，如果通过命令SPECIAL\_OPTION开启新的特殊选项

“OUTPUT\_AT\_MAP\_AND\_STEP” ([见章节8.10.22](#))，那么程序可以显示这些过长的输出。

用户可以通过输入CTRL-A (PC Windows) 或者 CTRL-C (UNIX 或者 PC Linux)终止STEPPING过程。这样，可以终止略长的输出，而不丢失已经计算的结果。

自TCCP版本以来，执行该命令进行平衡计算时，如果任何阶段存在寻找稳定相的任何收敛困难时(除了用户开启了特殊的选项 NEVER\_ADJUST\_MINIMUM\_Y外)，屏幕上将会显示出如下信息：

Convergence problems, increasing smallest site-fraction from 1.00E-30 to hardware precision 2.00E-14. You can restore using SET-NUMERICAL-LIMITS

表明当前POLY3工作空间中的最小的结点分数自动地由缺省值1.00E-30 增加到了依赖硬件的精度(PC Windows, 2.00E-14)。对于随后的其它POLY模块计算，用户可以使用命令SET\_NUMERICAL\_LIMITS将最小的结点分数恢复到先前的值或者重新设定为其它的值，或者重新设定其它的数值范围 ([见章节 8.10.7 SET\\_NUMERICAL\\_LIMITS 命令](#))。关于性质图的STEPPING计算中的程序在所有的新版本中都在不断地被改进，在以后的版本中，仍将被改进。

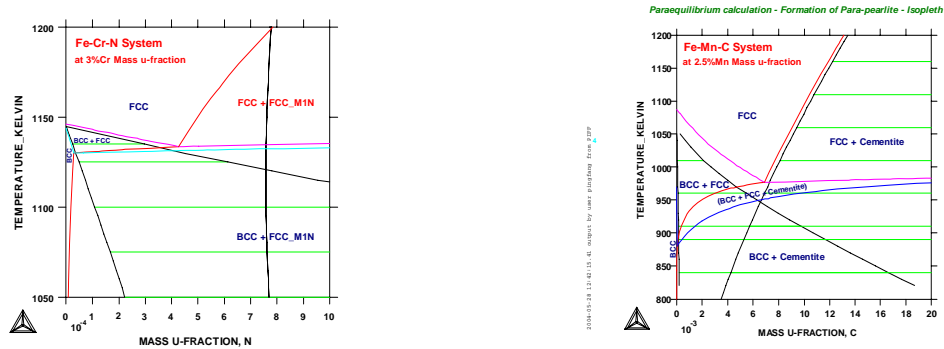


图 8-7.等浓度线的仲平衡计算结果：表示两种铁基合金中的珠光体的形成，并且添加了附加的平衡结果  
 注意：该图中，所计算的仲平衡的相边界(黑线)加入了连接线(绿线)。对于Fe-2.5Mn-C合金体系，在 BCC+FCC 和FCC+Cementite仲平衡的STEPPING计算中，C被当作快速扩散组元。在 Fe-3Cr-N 合金体系中，N被当作BCC+FCC和FCC+FCC\_M1N(即FCC#1+FCC#2)仲平衡STEPPING计算中的快速扩散组元。

### 8.9.5 ADD\_INITIAL\_EQUILBRIUM

**Description:** 该命令用于为计算相图(MAPPING计算)加入初始平衡点。当计算性质图(STEPPING计算)时，不需要使用此命令。在很多情况下，执行命令MAP前，不需要执行命令ADD\_INITIAL\_EQUILBRIUM，因为MAPPING程序会从当前已经计算的平衡状态开始计算。因此，用户可以仅设定平衡状态，MAPPING轴变量，然后执行命令MAP这样来计算一个简单的相图。但是，如果某个相图中有断开的线，那么就必须通过命令ADD加入两个或者多个初始平衡，那么MAPPING计算就将在特定的方向下从这些初始平衡开始计算所有的相边界线。

**Synopsis 1:** ADD\_INITIAL\_EQUILBRIUM <direction code>

**Synopsis 2:** ADD\_INITIAL\_EQUILBRIUM

**Ensuing Prompt:** Direction /default/: <direction code>

当初始平衡点在一个单相区域或者相图为等浓度线(连接线不在计算的平面中)时，设定方向十分重要。在这些情况下，程序将会沿着给定方向，寻找某条线(即表示某个相的数量为零的线，该相正好开始在线的一边出现，而在另一边消失)。

**Options:**

|                    |          |               |
|--------------------|----------|---------------|
| direction code(s): | 1 or 2   | 分别表示轴1或者2的正方向 |
|                    | -1 or -2 | 分别表示轴1或者2的负方向 |
|                    | DEFAULT  | 表示所有的方向       |



**Notes:** 自TCCM版本以来,程序以一种新的方式处理缺省的方向。当沿着缺省的方向执行命令ADD时,程序将会沿着轴变量进行扫描,并且当每次扫描进程穿过某个相界时,程序就会生成初始点。除此之外,如果存在任何一条没有延伸到轴的溶解度线,那么程序将会生成四个初始点,扫描穿过每个轴的中部。执行命令MAP时,程序将会沿着图中的轴变量的每个方向扫描来寻找图中的线。在这种方式下,它能保证找到相图中所有可能的相边界。当然,这种方式会比使用最少数目的初始点多消耗一点时间,因为某些线可能要重复计算。但是POLY模块能记住所有的结点,随后当它在沿着线计算的过程中,找到某个已知的结点时,会停止计算。

另外,在方向后面添加“>”可以在一个初始平衡中生成初始点组。例如:

Direction /default/: 2>

Direction /default/: -2>

它能沿着轴2的正方向(或者轴2的负方向)为每组相变化生成一个初始点。它能保证沿着这样的轴方向,成功地找到所有可能的相边界线(不只是第一个相边界)。

当用户所绘制的相图中有的线没有交点时,这种方式特别有用。因此,它能计算诸如更小成分范围内的等浓度线之类的图。同样,对于计算CVD图也非常有用。

所有通过命令ADD\_INITIAL\_EQUILBRIUM生成的初始平衡点(以前的和当前的都被保存在当前的POLY工作空间中)都可以很容易地通过执行命令

LIST\_INITIAL\_EQUILBRIUM (见章节8.10.18)显示在屏幕上。另外,通过命令

LOAD\_INITIAL\_EQUILBRIUM (见章节8.10.19),可以将某个初始平衡点(包括它的状态和平衡结果)载入到当前平衡中。通过命令DELETE\_INITIAL\_EQUILBRIUM,可以将任何一个特定的或者所有的初始平衡点从当前的POLY工作空间中删除(见章节8.10.20)。

## 8.9.6 POST

**Description:** 该命令将模块切换到后处理程序,即POST模块中。该模块有自己的命令集合。

**Synopsis:** POST

**Comments:** 在Thermo-Calc(以及DICTRA)软件系统中,在POLY模块(以及TAB模块,以及任何一种特殊的模块,例如 BIN, TERN, POT, SCHEIL 和 POURBAIX模块)中进行STEPPING或者MAPPING计算后,将在POST模块中处理计算/模拟结果,从而生成相图,性质图,扩散剖面以及各种用户期待的图形等各种图象形式[显示在屏幕上,或者以各种不同的图形形式或者数据形式(例如EXP, TAB 和 WRL)存到文件中(例如PS, EMF, PNG, BMP, PDF, JPG, TIF)],同时,也可以生成一些表格形式[显示在屏幕上,或者存入文本文档中(TXT),或者存入到空白表格程序文件中(但是自TCCR版本以来,才可以使用此功能,并且必须以MS Excel 形式XLS保存,另外仅能保证从STEPPING计算中得到的结果)。

在POST模块中,用户可以将任何一个状态变量,衍生变量,输入的符号(函数或者变量)设定为X/Y轴。同时,在绘制图后,用户可以进一步设置各种外观参数,例如曲线一标签选项,图标题和副标题,图形大小,轴的长度,轴的类型,轴类型,连接线状态,自动或者手加的标度或者,以及半自动或者手动地为相边界或者相区添加标签,图形格式,文本大小,颜色等,从而定义一个高标准的图。另外,用户可以很容易地在已绘制的图上添加实验数据。用户也可以将坐标值保存到文本文档中,该文档可以被编辑并且在另

外一个图中当做实验数据使用，或者作为PARROT模块评估的安装文件的一部分。用户可以在图中取消或者恢复某个相，也可以改变组元的参考状态。而且，用户也可将性质图（在STEPPING计算后）转换为表格形式，例如显示在屏幕上的简单目录，或者文本文档，或者空白表格程序文件（例如扩展名为.XLS的MS Excel 文件）。

参考Chapter 9 – Post-Processor Module，可以得到更多的关于POST模块的详细信息。

## 8.10 其它的有用和高级的命令

### 8.10.1 DEFINE\_COMPONENTS

*Description:* 该命令用于改变组元的设置。通常，元素被缺省定义为组元。由于一些状态的设定要用组元，例如设定数量，活度或者化学势，所以设定组元非常重要。

注意：由于该命令包含命令REINITIATE的功能，因此在POLY模块中，应该首先使用该命令。

*Synopsis 1:* DEFINE\_COMPONENTS <all new components>

*Synopsis 2:* DEFINE\_COMPONENTS

*Ensuing Prompt:* Give all new components /existing components/: <new components>

用户必须在同一行上给出所有的新组元来取代目前的组元。但是，用户不能通过该命令来改变组元的数目，如果用户希望改变组元的数目，可以使用命令CHANGE\_STATUS。如果用户希望保留某些现有的组元定义，最好重新输入，否则，程序可能会混淆，特别是在某些组元由若干个元素组成的情况下。

新的组元必须已经以物种的形式存在。例如，在Fe-Si-O体系中，用户可能希望将组元定义为FeO, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 和 SiO<sub>2</sub>，而不是缺省的Fe, Si和O。

## 8.10.2 SET\_REFERENCE\_STATE

*Description:* 当计算活度，化学势和焓时，组元的参考态十分重要（见文档“Thermo-Calc软件体系”中的章节2.13），而它由数据库决定。对每个组元来说，它的数据必须以某个相，温度和压强为参考，即所谓的“参考状态”。某个组元在所有溶解该组元的相中的所有的数据必须有相同的参考态。但是，不同的数据库可能对同一组元有不同的参考态，因此，用户必须小心，以防止混淆不同的数据库中的数据。

通常，程序缺省地以数据库中的参考态作为参考来计算活度，化学势等热力学量，那么，如果数据库中关于参考态的定义不同，就可能产生不同的值。因此，当数据库中的参考态不适合时，用户可以通过该命令自己定义组元的参考状态。

同时，用户也可以选择“SER”，即 the Stable Element Reference(通常将合金中的主要组元的参考态缺省定义为SER) 作为组元的参考状态。在这种情况下，不需要用户指定

温度和压强，因此，程序执行时，也不会询问用户。

为了在用户指定的参考状态下设定状态，用户必须在状态变量后面添加R。因此，当活度

(体系的组元或者相中的某个物种的活度)以缺省的参考态为参考时，表示为AC，当以所选择的参考态为参考时，表示为ACR。同样的，MU表示以缺省的参考态为参考的化学势，

而MUR则表示以所选择的参考态为参考。另外，体系的组元和某个相中的组元的AC和ACR

变量，可以以自然对数的形式表示，例如:LNAC(Fe)，LNACR(C)， LNAC(O<sub>2</sub>,GAS)，LNACR(O<sub>2</sub>,GAS)。

TCCR User's Guide中的附录D(状态变量和衍生变量的单位)中详细介绍了“Thermo-Calc软件系统”中如何设定各种体系的组元的参考态和如何解释计算结果。

*Synopsis 1:* SET\_REFERENCE\_STATE <component> <phase> <temperature> <pressure>

*Synopsis 2:* SET\_REFERENCE\_STATE

*Ensuing Prompt:* Component: <name of the component>

要求给出组元的名称。

Reference phase: <name of a phase used as the new reference state>

要求给出相的名称。该相的状态必须为ENTERED 或者DORMANT或者 SUSPENDED，同时，该组元必须为该相的成分。

一个细小的问题是如果某个组元以若干个物种的形式存在于相中，例如，氧以 O, O<sub>2</sub> 和 O<sub>3</sub> 的形式存在于气相中。通常，用户希望以最稳定的物种作为氧的参考状态，即O<sub>2</sub>。因此，程序会在当前温度下，计算纯组元相的所有可能状态的吉布斯自由能，从而选择最稳定的状态。

Temperature /\*/: <temperature for the reference state>

用户可以选择参考温度(K)。\*表示将当前温度用于计算。

Pressure /1E5/: <pressure for the reference state>

用户可以选择参考压强(pa)。\*表示将当前压强用于计算。

*Examples:*

```
S-R-S Fe SER
S-R-S Cr FCC * 10000
S-R-S H2O AQUEOUS * 10000
S-R-S ZE REF_ELECTRODE * 10000
```

### 8.10.3 CHANGE\_STATUS

*Description:* 该命令用于为所有随后的平衡或者局部 / 部分平衡计算(单点计算, STEPPING计算或者 MAPPING计算)设定体系中的组元, 物种和相的状态。每种组元, 物种和相都有一种状态。

缺省状态为ENTERED。

该命令最重要的用途为: 通过将某些相(在另外的情况下, 为稳定相)的状态设定为

SUSPENDED或者DORMANT来计算亚稳平衡和亚稳相图。另外一个重要的应用是通过将某

些组元的状态设定为SPECIAL状态来计算平衡状态。

对于某个组元或者某个物种, 可以选择以下状态:

|           |                                    |
|-----------|------------------------------------|
| ENTERED   | 表示在计算中, 考虑该组元或者物种。该状态为缺省状态。        |
| SUSPENDED | 表示在计算中, 不考虑该组元或者物种。                |
| SPECIAL   | 表示在以摩尔分数或者质量分数求和时, 不考虑该组元。它仅对组元适用。 |

注意: 只有组元的状态可以被设定为SPECIAL, 表示在以摩尔分数或者质量分数求和时, 不考虑该组元。例如, 对于所谓的“u-fractions” 或者其它的标准化分数, 一种或者多种组元在求和时不被考虑, 那么用户必须指定在计算摩尔分数或者质量分数时应该排除的组元。另外, 当计算平衡时, 这种组元状态特别有用。这些组元通常为间隙组元, 状态必须为SPECIAL。通过命令CHANGE\_STATUS来指定这种状态。例如, 为了计算将碳作为间隙组元的体系中的金属分数, 用户可以将碳的状态设定为

SPECIAL:

```
Change_status comp C=special
```

注意: 将组元和物种的状态设定为SUSPENDED不会总是有效, 这是程序的缺陷。

对于某个相, 可以选择以下状态:

|           |                                                                                                                                                                                                  |
|-----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| ENTERED   | 表示在平衡计算中, 考虑该相。如果这些相的存在能使体系的吉布斯自由能最小化, 那么这些相为稳定相。该状态为所有从所选择的数据库中提取的相的缺省状态。一个处于 ENTERED 状态的相总是有一个初始估计的数量(以摩尔表示, 通常, 如果该相不可能稳定, 那么数量为0, 如果该相可能稳定, 那么数量为0.5, 或者1, 或者任何一个正数), 但是该数量只是作为平衡计算中的大概的初始值。 |
| SUSPENDED | 表示在平衡计算中, 不考虑该相。                                                                                                                                                                                 |
| DORMANT   | 表示在平衡计算中, 不考虑该相, 但是计算它们析出的驱动力。                                                                                                                                                                   |
| FIXED     | 表示在该平衡状态下, 处于FIXED状态的相必须稳定, 并且有特定的数量[总是使用一种初始估计值即“NPF(phase)”, 表示处于FIXED                                                                                                                         |

状态的相的组元（每摩尔分子式单位）的标准化摩尔数]（参考该命令结尾的部分，见更多信息）。

*Synopsis 1:* CHANGE\_STATUS <keyword> <name(s)>=<status> <value, optional>

*Synopsis 2:* CHANGE\_STATUS

*Ensuing Prompt:* For phases, species or components? /PHASES/: <keyword>

keyword = phase or species or components

Phase name(s): <name(s) of the phase(s)>

如果选择"phase"作为关键字，那么用户必须在同一行上给出所有状态要改变的相的名称。相名称之间以逗号或者空格隔开。另外，也可以直接在相名称后面通过等号直接赋予状态这种方式来直接设定相状态。

注意：星号"\*"可以表示所有的相。特殊的标记"\*S"，即直接在\*后面添加S,表示所有处于SUSPENDED状态的相，"\*D"表示所有处于DORMANT状态的相，"\*E"表示所有

处于ENTERED状态的相。

Name(s): <name(s) of the specie(s) or component(s)>

如果选择"species"或者"component"作为关键字，那么用户必须在同一行上给出所有状态要改变的物种或者组元的名称。物种或者组元名称之间以逗号或者空格隔开。另外，与将"phase"作为关键字一样，也可以直接在物种或者组元名称后面通过等号直接赋予状态这种方式来直接设定物种或者组元状态。

注意：星号"\*"表示所有的物种或者组元。特殊的标记"\*S"，既直接在\*后面添加S,表示所有处于SUSPENDED状态的物种或者组元，"\*D"表示所有处于DORMANT状态的

物种或者组元，同样，"\*E"表示所有处于ENTERED状态的物种或者组元。

Status /ENTERED/: <new status>

要求给出新状态。

- 对于物种，可以使用ENTERED或者SUSPENDED状态。
- 对于组元，可以使用ENTERED，SUSPENDED或者SPECIAL状态。SPECIAL状态表示在以摩尔分数或者质量分数求和时，不考虑该组元，当计算体系组元的"u-fractions"或者其它标准化的分数时，该状态十分有用。
- 对于相，可以使用ENTERED，SUSPENDED，DORMANT或者FIXED状态。DORMANT的意义与SUSPENDED一样，只是要计算驱动力。FIXED状态表明该状态下，该相以一定量稳定存在。

例如，对于"u-fractions"，当一种或者多种组元在求和中不被考虑时，用户必须指定在计算摩尔分数时应该排除的组元，即通过命令CHANGE\_STATUS来将该组元的状态设定为SPECIAL：

Change\_Status comp C=special

Start value, number of moles /0/: <initial amount>

对于处于ENTERED状态的相，用户可以给出该相的初始数量（通常，如果该相不可能稳定，那么数量为0，如果该相可能稳定，那么数量为0.5，或者1，或者任何一个正数），但是该数量只是作为平衡计算中的大概的初始值。

Number of moles /0/: <equilibrium amount>

对于处于FIXED状态的相，用户必须给出该相的平衡数量(总是使用一种初始估计值即"NPF(phase)"，表示处于FIXED状态的相的组元(每摩尔分子式单位)的标准化摩尔数)。如果平衡数量为0，那么表示该相处于它的稳定极限。

**特别注意：**在平衡计算(单点计算，STEPPING或者MAPPING计算)中，当将某个相的状态指定为FIXED时，必须特别注意以下几点：

- 1 表示相的数量的变量NP(phase)，BP(phase)和VP(phase)，以及在它们后面添加了 M/W/V-后缀的量，不能被用于设定状态。但是，用户可以通过命令CHANGE\_STATUS设定相关的状态，例如CHANGE\_STATUS phase <phase>=fix <amount>中的 <amount>大致与以F作为后缀的量“NPF(phase)”相同。
- 2 量“NPF(phase)”表示体系中的特定相的组元(每摩尔分子式单位)的标准化摩尔数，它与其它的以F作为后缀的状态变量[例如 GF(phase), HF(phase) 和 DGF(phase)]不同，它不能在POLY命令中直接使用，表明它不能被直接估值或者列出/显示。如果用户希望显示出平衡状态中的这样一个标准化的相数量值，那么可以用一个合适的符号(函数或者变量)替代它，例如：

$$\text{NPFabc} = \text{NP(abc)}/\text{NA}$$

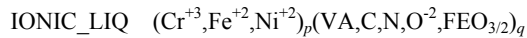
$$\text{或者 } \text{NPFabc} = \text{NPM(abc)}/\text{NA} * \text{N}$$

N为体系的总大小(以mole表示)。NA为为一个与相有关的量(对于离子溶体相来说，该量也与平衡有关)，它表示一摩尔分子式单位的相abc的总原子数(除去间隙组元和空位)。

例如，在Fe-Cr-Ni-C-N-O 体系(从某个特定的数据库中提取)中，SIGMA，FCC，BCC和LIQUID相可能采用了某些模型，它们的NA值必须通过不同的方式求得，如下：

|        |                                                                             |         |
|--------|-----------------------------------------------------------------------------|---------|
| LIQUID | (C,Cr,CrO <sub>3/2</sub> ,Fe,FeO,FeO <sub>3/2</sub> ,N,Ni,NiO) <sub>l</sub> | NA = 1  |
| FCC_A1 | (Cr,Fe,Ni) <sub>l</sub> (Va,C,N,O) <sub>l</sub>                             | NA = 1  |
| BCC_A2 | (Cr,Fe,Ni) <sub>l</sub> (Va,C,N,O) <sub>3</sub>                             | NA = 1  |
| SIGMA  | (Fe,Ni) <sub>8</sub> (Cr) <sub>4</sub> (Cr,Fe,Ni) <sub>18</sub>             | NA = 30 |

如果在相同的Fe-Cr-Ni-C-N-O体系中，液相采用了Two-Sublattice Ionic Liquid Model，即



求NA的值就变得更复杂：

$$\text{NA} = p + q * y_C^2 + q * y_N^2 + q * y_{O^{-2}}^2 + q * y_{\text{FeO}_{3/2}}^2$$

其中，化学计量系数p和q也依赖实际的平衡状态(而不是在体系中有确定的值)。对于其它的一些用带离子成分的多亚点阵模型来描述的(固态)相，例如某些数据库中的SPINEL 和 HALITE相，也会产生类似的问题。

- 3 显然，将某个处于FIXED状态的相的数量设定为0并不奇怪，因为它仅表示该相在平衡状态中稳定，只是在平衡计算中，质量为0而已。换句话说，就是在相图上，该相处于零-分数线[zero-fraction line (ZFL)]上，即它在相应的相边界线一边稳定，而在该边界的另一边不稳定。当计算固相线时，这种方式很有效。
- 4 然而，将某个处于FIXED状态的相的数量设定为非零值[它必须总是正数，即1，或者0.5，或者0.3，或者1.5] 时，不必要精确设定为等于所计算的平衡状态中该FIXED相的稳定数量。另外，<equilibrium amount> 为“NPF(phase)” 值，它只被作为平衡计算中，处于FIXED状态的相的一个估计的初始值。

因此，当一个状态为FIXED的液相的数量为 1 时，这并不表明它为一个液相平衡状态(液相可能与某些固相平衡，但是液相占据了体系中所有的质量)。当液态混合相被预定义为单亚点阵溶体相(例如多组元合金体系中的金属液相)和体系的总大小为 1 mole(即N=1)时，才能通过将液相的数量设定为 1 来计算液相平衡状态。

当某个相由一个包含两个或者多个亚点阵的溶体模型来描述，并且这些亚点阵可能也有不同的化学计量系数时[表示混合相的NA>1，见上面的例子]，当为某相设定FIXED状态时，不应该将数量设为 1。取而代之，用户应该使用一个范围在0到“NPF(phase)” [该值等于或者小于1/NA (如果体系总大小为 N=1) 或者 1/NA\*N (如果N不为 1 )]之间的值。因此，如果一个多组元体系中

## Thermo-Calc 用户指导书

有个采用Two-Sublattice Ionic Liquid Model (或者任何一种其它的multiple-sublattice ionic solution phases)模型描述的IONIC LIQUID 相时, 在设定FIXED相状态时, 很难采用一个合适

的”NPF(ION LIQ)“值,因为它应该等于或者小于 $N/[p+q \cdot y_C^2 + q \cdot y_N^2 + q \cdot y_{O^{2-}}^2 + q \cdot y_{FeO_{3/2}}^2]$ 的值。

在下面的例子中，计算了处于一定温度，压强和总成分的Fe-Cr-Ni-C 体系中的两个平衡状态，其中SIGMA 和FCC相的状态分别为FIXED。

\*\*\* **Example: Equilibrium State 1:**

POLY\_3: c-st ph SIGMA=fix .137726659E-4 = NP(SIGMA)/NA  
= NPM(SIGMA)/NA\*N

POLY 3: 1-c

P=100000, X(CR)=1E-1, X(NI)=1E-1, X(C)=1E-4, N=2

## FIXED PHASES

SIGMA=1.377267E-05

DEGREES OF FREEDOM 0

POLY 3: c-e

15 ITS, CPU TIME USED 0 SECONDS

**SIGMA phase is stable !**

(with fixed NPF at .137726659E-4)

POLY 3: l-e

OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/:

Options /VWCS/:

Output from POLY-3, equilibrium number = 1, label A0

Conditions:

P=100000, X(CR)=1E-1, X(NI)=1E-1, X(C)=1E-4, N=2

## FIXED PHASES

SIGMA=1.377267E-05

DEGREES OF FREEDOM 0

Temperature 577.14, Pressure 1.000000E+05

Number of moles of components 2.00000E+00, Mass 1.11484E+02

Total Gibbs energy -3.92693E+04, Enthalpy 1.90411E+04, Volume 1.29025E-05

| Component | Moles      | W-Fraction | Activity   | Potential   | Ref.stat |
|-----------|------------|------------|------------|-------------|----------|
| C         | 2.0000E-04 | 2.1548E-05 | 3.3550E-07 | -7.1537E+04 | SER      |
| CR        | 2.0000E-01 | 9.3280E-02 | 5.2568E-02 | -1.4135E+04 | SER      |
| FE        | 1.5998E+00 | 8.0141E-01 | 1.9013E-02 | -1.9015E+04 | SER      |
| NI        | 2.0000E-01 | 1.0529E-01 | 1.9130E-03 | -3.0035E+04 | SER      |

BCC A2#1                  Status ENTERED      Driving force 0.0000E+00

Number of moles 1.7831E+00, Mass 9.9047E+01 Mass fractions:

FE 8.47657E-01 CR 1.04366E-01 NI 4.79771E-02 C 1.71162E-12

|          |                |               |            |
|----------|----------------|---------------|------------|
| FCC_A1#1 | Status ENTERED | Driving force | 0.0000E+00 |
|----------|----------------|---------------|------------|



# Thermo-Calc 用户指导书

Number of moles 2.1549E-01, Mass 1.2372E+01      Mass fractions:  
 NI 5.64585E-01 FE 4.34618E-01 CR 7.96782E-04 C 7.54907E-13

M23C6#1                      Status ENTERED      Driving force 0.0000E+00

Number of moles 9.6667E-04, Mass 4.2322E-02                      Mass fractions:

CR 9.24289E-01    C 5.67603E-02    FE 1.86006E-02    NI 3.50241E-04

SIGMA#1                      Status FIXED                      Driving force    0.0000E+00

Number of moles **4.1318E-04**, Mass 2.2147E-02                      Mass fractions:

CR 5.92227E-01    FE 3.66819E-01    NI 4.09539E-02    C 0.00000E+00

POLY 3: l-st p

### \*\*\* STATUS FOR ALL PHASES

| PHASE                                                                      | STATUS  | DRIVING FORCE   | MOLES                 |
|----------------------------------------------------------------------------|---------|-----------------|-----------------------|
| SIGMA                                                                      | FIXED   | 0.00000000E+00  | <b>4.13179977E-04</b> |
| M23C6                                                                      | ENTERED | 0.00000000E+00  | 9.66666595E-04        |
| FCC_A1                                                                     | ENTERED | 0.00000000E+00  | 2.15489190E-01        |
| BCC_A2                                                                     | ENTERED | 0.00000000E+00  | 1.78313096E+00        |
| HCP_A3                                                                     | ENTERED | -3.96334108E-02 | 0.00000000E+00        |
| FCC_A1#2                                                                   | ENTERED | -4.90774776E-02 | 0.00000000E+00        |
| CHI_A12                                                                    | ENTERED | -2.51869838E-01 | 0.00000000E+00        |
| CEMENTITE                                                                  | ENTERED | -4.03402719E-01 | 0.00000000E+00        |
| HCP_A3#2                                                                   | ENTERED | -4.07818999E-01 | 0.00000000E+00        |
| FE4N                                                                       | ENTERED | -5.18975862E-01 | 0.00000000E+00        |
| CR3SI                                                                      | ENTERED | -5.92805912E-01 | 0.00000000E+00        |
| M7C3                                                                       | ENTERED | -6.53940414E-01 | 0.00000000E+00        |
| CRSI2                                                                      | ENTERED | -6.81955340E-01 | 0.00000000E+00        |
| CBCC_A12                                                                   | ENTERED | -1.14394354E+00 | 0.00000000E+00        |
| ENTERED PHASES WITH DRIVING FORCE LESS THAN                                |         |                 | -1.15                 |
| CUB_A13 LIQUID M3C2 ALNI_B2 AL3NI2 KSI_CARBIDE FECN_CHI M5C2 V3C2 GRAPHITE |         |                 |                       |
| DIAMOND A4                                                                 |         |                 |                       |

POLY 3: show NP(SIGMA) NPM(SIGMA)

NP(SIGMA)=4.13179977E-4

NPM(SIGMA)=2.06589989E-4

POLY 3:

**\*\*\* Example: Equilibrium State 2:**

POLY\_3: c-st ph FCC=fix 2.15659726E-01 = NP(FCC)/NA  
= NPM(FCC)/NA\*N

POLY 3: 1-c

P=100000, X(CR)=1E-1, X(NI)=1E-1, X(C)=1E-4, N=2

## FIXED PHASES

FCC A1=.2156597

DEGREES OF FREEDOM 0

POLY\_3: c-e

## Thermo-Calc 用户指导书

12 ITS, CPU TIME USED 0 SECONDS

**FCC phase is stable !**

**(with fixed NPF at 2.15659726E-01)**

POLY\_3: **l-e**

OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/:

Options /VWCS/:

Output from POLY-3, equilibrium number = 1, label A0

Conditions:

P=100000, X(CR)=1E-1, X(NI)=1E-1, X(C)=1E-4, N=2

FIXED PHASES

FCC\_A1=.2156597

DEGREES OF FREEDOM 0

Temperature 577.00, Pressure 1.000000E+05

Number of moles of components 2.00000E+00, Mass 1.11484E+02

Total Gibbs energy -3.92547E+04, Enthalpy 1.90290E+04, Volume 1.29009E-05

| Component | Moles      | W-Fraction | Activity   | Potential   | Ref.stat |
|-----------|------------|------------|------------|-------------|----------|
| C         | 2.0000E-04 | 2.1548E-05 | 3.3404E-07 | -7.1540E+04 | SER      |
| CR        | 2.0000E-01 | 9.3280E-02 | 5.2615E-02 | -1.4127E+04 | SER      |
| FE        | 1.5998E+00 | 8.0141E-01 | 1.9023E-02 | -1.9008E+04 | SER      |
| NI        | 2.0000E-01 | 1.0529E-01 | 1.9130E-03 | -3.0028E+04 | SER      |

BCC\_A2#1 Status ENTERED Driving force 0.0000E+00

Number of moles 1.7825E+00, Mass 9.9015E+01 Mass fractions:

FE 8.47809E-01 CR 1.04267E-01 NI 4.79241E-02 C 1.69116E-12

FCC\_A1#1 Status FIXED Driving force 0.0000E+00

Number of moles **2.1566E-01**, Mass 1.2382E+01 Mass fractions:

NI 5.64613E-01 FE 4.34593E-01 CR 7.94157E-04 C 7.48497E-13

M23C6#1 Status ENTERED Driving force 0.0000E+00

Number of moles 9.6667E-04, Mass 4.2322E-02 Mass fractions:

CR 9.24313E-01 C 5.67604E-02 FE 1.85777E-02 NI 3.49412E-04

SIGMA#1 Status ENTERED Driving force 0.0000E+00

Number of moles 8.2636E-04, Mass 4.4294E-02 Mass fractions:

CR 5.92327E-01 FE 3.66758E-01 NI 4.09149E-02 C 0.00000E+00

POLY\_3: **l-st p**

\*\*\* STATUS FOR ALL PHASES

| PHASE  | STATUS  | DRIVING FORCE  | MOLES                 |
|--------|---------|----------------|-----------------------|
| FCC_A1 | FIXED   | 0.00000000E+00 | <b>2.15659726E-01</b> |
| SIGMA  | ENTERED | 0.00000000E+00 | 8.26359318E-04        |

```

M23C6 ENTERED 0.00000000E+00 9.66666596E-04
BCC_A2 ENTERED 0.00000000E+00 1.78254725E+00
HCP_A3 ENTERED -3.97480337E-02 0.00000000E+00
FCC_A1#2 ENTERED -4.93283385E-02 0.00000000E+00
CHI_A12 ENTERED -2.51973421E-01 0.00000000E+00
CEMENTITE ENTERED -4.03528585E-01 0.00000000E+00
HCP_A3#2 ENTERED -4.07616231E-01 0.00000000E+00
FE4N ENTERED -5.19312878E-01 0.00000000E+00
CR3SI ENTERED -5.92513532E-01 0.00000000E+00
M7C3 ENTERED -6.54249240E-01 0.00000000E+00
CRS12 ENTERED -6.81614967E-01 0.00000000E+00
CBCC_A12 ENTERED -1.14437450E+00 0.00000000E+00
ENTERED PHASES WITH DRIVING FORCE LESS THAN -1.15
CUB_A13 LIQUID M3C2 ALNI_B2 AL3NI2 KSI_CARBIDE FECN_CHI M5C2 V3C2 GRAPHITE
DIAMOND_A4
POLY_3: show NP(FCC) NPM(FCC)
NP(FCC_A1)=2.15659726E-1
NPM(FCC_A1)=1.07829863E-1
POLY_3:

```

## 8.10.4 LIST\_STATUS

**Description:** 该命令用于列出组元，物种或者相的状态。用户可以根据需要任意选择列出所有或者部分状态。

**Synopsis 1:** LIST\_STATUS <keyword(s)>

**Synopsis 2:** LIST\_STATUS

**Ensuing Prompt:** Option /CPS/: <keyword(s)>

keyword = C, 或者P, 或者S, 或者任何一种组合体

- C 表示列出所有的组元状态。
- P 表示列出所有的相状态。
- S 表示列出所有的物种状态。

缺省值为CPS。如果输入回车，程序将列出所有的组元，相和物种的状态。如果只输入选项P，将只列出相的状态。如果用户对组元的状态感兴趣，那么输入C。同时，用户也可以输入CS，程序会列出组元和物种的状态。

另外，通过命令CHANGE\_STATUS (见上)，用户可以改变组元，相和物种的状态。

**Results:** 程序在列出组元，物种，或者相的状态时，输出的形式与CHANGE\_STATUS选项中指定

的关键字有关，如下：

- 对于组元，程序将列出它们的状态和参考状态。
- 对于状态为 ENTERED 和 FIXED的相，程序将会列出它们的状态，驱动力和平衡数量。

注意：程序以稳定性依次下降的顺序列出亚稳相。为了避免输出过长，自 TCCN 版本以来，只有 10 个亚稳相(状态为 ENTERED)会分行列出来，而将其余的更不稳定的相列在同一行上。对于状态为 DORMANT 的相，程序将会列出它们的相名称和驱动力。对于状态为 SUSPENDED 的相，程序仅列出相名称。

- 对于物种，程序仅列出它们的状态。

*Example:*

```
POLY_3:1-st
Option /CPS/:
*** STATUS FOR ALL COMPONENTS
COMPONENT STATUS REF. STATE T(K) P(Pa)
VA ENTERED SER
C ENTERED GRAPHITE * 100000
FE ENTERED SER
NI ENTERED SER
*** STATUS FOR ALL PHASES
PHASE STATUS DRIVING FORCE MOLES
FCC_A1 FIXED 0.00000000E+00 1.00000000E+00
BCC_A2 ENTERED 0.00000000E+00 0.00000000E+00
HCP_A3 ENTERED -2.69336869E-01 0.00000000E+00
CEMENTITE ENTERED -2.86321394E-01 0.00000000E+00
M23C6 ENTERED -3.44809821E-01 0.00000000E+00
LIQUID ENTERED -4.95421844E-01 0.00000000E+00
CBCC_A12 ENTERED -6.16764645E-01 0.00000000E+00
M7C3 ENTERED -6.56332559E-01 0.00000000E+00
M5C2 ENTERED -6.83594326E-01 0.00000000E+00
GRAPHITE ENTERED -1.02142788E+00 0.00000000E+00
DIAMOND_A4 ENTERED -1.73225646E+00 0.00000000E+00
ALNI_B2 ENTERED -4.79816887E+00 0.00000000E+00
ENTERED PHASES WITH DRIVING FORCE LESS THAN -4.80
AL3NI2 GAS
HCP_A3 DORMANT -2.69336869E-01
SUSPENDED PHASES:
V3C2 KSI_CARBIDE FECN_CHI FE4N CUB_A13
*** STATUS FOR ALL SPECIES
C ENTERED C2 ENTERED C4 ENTERED C6 ENTERED FE ENTERED VA
ENTERED
C1 ENTERED C3 ENTERED C5 ENTERED C7 ENTERED NI ENTERED
```

## 8.10.5 COMPUTE\_TRANSITION

*Description:*

该命令实际上为命令CHANGE\_STATUS, SET\_CONDITION 和 COMPUTE\_EQUILIBRIUM

的组合物, 因此, 当变化某个已经设定的状态可能导致某个新相形成时, 可以用此命令来直接计算平衡。用户只能在至少成功计算一个平衡后才能使用该命令, 否则, 程序将会提醒用户需要首先通过平衡计算来找到当前状态下的稳定相。自TCCN版本以来, 可以使用该命令, TCCP版本中, 进一步改进了该命令。

执行该命令时, 程序将会调用命令CHANGE\_STATUS暂时将某个用户指定的相的状态改变为FIXED, 并且数量为0。同时, 暂时释放用户选择的某个已经存在的平衡状态。程序将会计算一个新的平衡, 在该平衡中, 该特定的相为稳定状态, 但是它在体系中的平衡数量为0。然后, 所被释放的状态将会被赋予一个能保证计算的平衡的计算值。接着, 程序将会自动将那个特定的相的状态改变为原来的状态, 即ENTERED, 并且将先前暂时释放的状态重新设定为状态, 并且赋予它某个通过计算得到的值, 该值能保证平衡中, 那个特定的相能形成, 但是数量为0。

该命令用于寻找熔点, 沸点或者溶解度范围方面特别方便, 并且当计算某个特定相变为稳定状态的平衡时, 用户如果希望为该平衡设定最理想的状态, 该命令也十分有用。另外, 通过该命令, 用户也可以得到在其它状态不变的情况下, 某个状态的值与保证体系中特定相稳定, 但数量为0的值相差多远。

当用户成功地进行COMPUTE\_TRANSITION计算后, 用户可以进行 COMPUTE\_EQUILIBIRUM计算来确信所计算的过渡平衡确实是一个稳定的平衡, 用户也可以通过命令LIST\_EQUILIBRIUM 来查看该过渡平衡状态的详细信息。

自TCCP版本以来, 如果用户在回答问题“Phase to form:”时, 如果输入 ANY(而不是某个特定相的名称), 那么程序在给定的变化方向和被释放的状态的估计改变值下, 可能会寻找到任一新相: 负号表示在小于所释放的状态的值下, 任何新相将形成, 正号表示在大于所释放的状态的值下, 任何新相形成; 所释放的状态的估计改变值表示用户希望新相形成的范围(但是它只是一个估计的值, 所以任何一个值只要在它的合理的范围内, 就可以了)。用户可以根据需要, 重复进行该类计算, 因此, 该功能在用于沿着某一被释放的状态的变化方向寻找出所有可能的相转变方面, 十分有用。

*Synopsis:*

COMPUTE\_TRANSITION

*Ensuing Prompt:*

Phase to form: <phase name>

要求给出用户希望形成的新相的名称, 例如 BCC。这样, 就将新相的状态设定为FIXED, 数量为0, 程序将会输出如下信息:

You must remove one of the these conditions

P=100000, T=800, N=1, X(Fe)=.5      DEGREE OF FREEDOM 0

注意: 自TCCP版本以来, 用户在回答 “Phase to form:”问题时, 如果输入 ANY, 那么程序也可能在所释放的状态的某一变化方向上, 寻找到任一新相。在这种情况下, 屏幕上将会显示出如下信息:

Give the state variable to be removed /T/: <one condition>

要求给出要释放的某一状态。这样, 程序就能计算特定(或者任一)的新相将要形成的过渡平衡中的该状态的值。

因此, 在上面的问题中, 如果输入X(Fe), 那么在成功的计算后, 屏幕上将会显示如下信息:

To form BCC the condition is set to X(Fe)=.48605791769

然后, 程序将会被释放的状态的值设定为该计算的值, 即 X(Fe) 的值。如果输入命令 ST\_CONDITIONS, 屏幕上将会显示如下信息:

P=100000, T=800, N=1, X(Fe)=4.86057918E-1

DEGREES OF FREEDOM 0

注意：在TCCP版本中，如果用户在回答问题“Phase to form:”时，输入关键字ANY(而不是某个特定相的名称)，那么在计算过渡平衡前，程序将会进一步要求用户给出表示变化方向的符号和所释放的平衡的估计改变值

Estimated change (with sign) /1/: <+/-#>

要求给出表示变化方向的符号和所释放的平衡的估计改变值，在该例子中，即X(Fe)的估计改变值：负号表示在小于所释放的状态的值下，任何新相将形成，正号表示在大于所释放的状态的值下，任何新相形成。所释放的状态的估计改变值表示用户希望新相形成的范围(但是它只是一个估计的值，所以任何一个值只要在它的合理的范围内，就可以了)。例如，如果输入组合形式 -.02，在成功的计算后，屏幕上将会显示如下信息

To form BCC\_A2#1 the condition is set to X(Fe)=.493708756187

程序会将被释放的状态的值设定为计算的值，即X(Fe)的值。如果输入命令

SET\_CONDITION，屏幕上将会显示如下信息：

P=100000, T=800, N=1, X(Fe)=4.93708756E-1

DEGREES OF FREEDOM 0

## 8.10.6 SET\_INPUT\_AMOUNTS

*Description:* 该命令用于详细指明体系如何由各种物质组成。因此，该命令最适合用于物质数据库。例如，在C-H-O-N 体系中

S-I-A N(H2)=10,N(H2O)=25,N(C1O2)=5,N(N2)=100

POLY模块会将其转换为依照当前组元设定的状态。例如，如果该体系中，元素都为组元，那么以上输入与以下等同：

SET-CONDITION N(H)=70,N(O)=35,N(C)=5,N(N)=200

注意：用户也可以在命令SET-INPUT-AMOUNTS中输入负的数量。

*Synopsis 1:* SET\_INPUT\_AMOUNTS <N(<specie>) or B(<specie>)>=<value>

*Synopsis 2:* SET\_INPUT\_AMOUNTS

*Ensuing Prompt:* Quantity: <N(<specie>) or B(<specie>)>

此时，用户必须指定 N(<specie>)或者B(<specie>)。在输入时，用户可以采取在数量前加个等号“=” [例如， N(H2)=10 或者 B(H2O)=1000]，或者输入回车来根据提示输入这两种方式。

Amount: <value of the quantity>

要求指定数量。

## 8.10.7 SET\_NUMERICAL\_LIMITS

*Description:* 该命令用于改变收敛的标准。当在计算复杂体系时，如果需要加快计算速度，该命令十分有用。

首先，该命令会在屏幕上列出关于体系定义的各种限制，如下：

LIMITATIONS of the present version of Thermo-Calc

Max number of elements : 40

Max number of species :1000

Max number of sublattices in a phase : 10

Max number of constituents in a phase: : 200

Max number of constituents in an ideal phase :1000

注意：自TCCP版本以来，对于非理想溶体相，例如采用SIT，HKF或者ITZ模型的水溶液，可以包含的成分的最大数量从80增加到200。

Synopsis: SET\_NUMERICAL\_LIMITS

Ensuing Prompt: Maximum number of iterations /200/: <xxx>

通常，程序将会在终止前尝试500次迭代(先前的版本中，能进行200次迭代)。由于某些模型的计算时间超过 1 CPU 秒/迭代，那么该数目也能用于检查CPU时间，并且如果程序使用了500 CPU 秒/迭代，那么计算将终止。

Required accuracy /1E-6/: <yyy>

要求输入相对精度，程序要求在收敛前，每个变量的相对误差小于此值。一个较大的值通常表示较少的迭代次数但是较低的精度。该值应该至少比机器精度大一个数量级。

Smallest fraction /1E-30/: <zzz>

该值赋予非常不稳定的成分。通常，它仅用于可能有如此低分数的气相中。

Approximate driving force calculation for metastable phases /Y/: <Y or N>

通常，POLY程序为了终止迭代，只要求计算出处于平衡状态的稳定相。尽管在所有的迭代过程中，程序也计算了亚稳定相，但是它们可能没有被计算到最合适的成分点，因此，它们的驱动力可能只是一个近似值[回答该问题时，选Y[Yes],那么程序将采取这种方式执行]。另外，如果精确计算出亚稳相的驱动力非常重要，尽管需要更多的迭代次数，同时，如果亚稳相的收敛不好，那么命令STEP和命令MAP也可能终止。

止，对于这些情况，用户也可以通过回答N(NO)来强迫亚稳相计算收敛。

Notes: 自TCCP版本以来，执行命令COMPUTE\_EQUILIBRIUM, STEP\_WITH\_OPTION, MAP或者SPECIAL\_OPTIONS进行计算时，如果任何阶段存在寻找稳定相的任何收敛困难时(除了用户开启了特殊的选项 NEVER\_ADJUST\_MINIMUM\_Y外)，屏幕上将会显示出如下信息：

Convergence problems, increasing smallest site-fraction from 1.00E-30 to hardware precision 2.00E-14. You can restore using SET-NUMERICAL-LIMITS

表明当前POLY3工作空间中的最小的结点分数自动地由缺省值1.00E-30 增加到了依赖硬件的精度(PC Windows, 2.00E-14)。对于随后的其它POLY模块计算，用户可以使用命令SET\_NUMERICAL\_LIMITS将最小的结点分数恢复到先前的值或者重新设定为其它的值，或者重新设定其它的数值范围。

## 8.10.8 SET\_ALL\_START\_VALUES

Description: 该命令用于为平衡计算提供初始值，例如，当计算失败，或者体系中有溶解度间隙，或者有有序化时，可以使用该命令。另外，如果温度和压强没有被设定为状



态，那么程序将会询问这些值。对于每个相，程序会询问该相是否平衡以及它的成分。

Synopsis: SET\_ALL\_START\_VALUES

Ensuing Prompt: T /XXXX/: <temperature in K>

如果温度没有被设定为状态，那么用户必须提供所估计的最终值(K)。

P /100000/: <pressure in pa>

如果压强没被设定为状态，那么用户必须提供所估计的最终值(P)。

Automatic start values for phase constitutions? /N/: <Y, N or F>

用户可以回答N (No), Y (Yes) 或者F (FORCE), 缺省值为No。

F选项的作用：在某些情况下，用户设定了一些不可能的状态，例如W(C)=1.5 [W(C)为质量分数，其值必须小于1]，程序在执行时，尝试通过将每个相中的碳含量设为最大这样来满足该状态，但是不管怎样，都将失败。当用户发现错误，并且将 W(C)设定为0.015时，计算可能仍将失败，因为程序可能从先前的值开始计算。为了"更新"初始值，用户可以选择F (FORCE)。

如果用户回答Y(Yes)，那么该命令将会立即终止，并且程序将会自动为所有可能的相设定相成分初始值。

如果用户输入回车接受N (No)，那么程序将会询问每个处于ENTERED状态的相的初始数量以及它们的主要成分或者每个成分的结点分数。

Should <phase> be stable /N/: <Y/1 or N/2>

用户必须估计该相是否稳定。对于所有处于ENTERED状态的相，程序将会询问该问题以及以下两个问题。

注意：用户设定的稳定相的数目不能大于组元的数目，但是必须至少将一个相(该相要能溶解所有的成分)设定为稳定状态。为了与以前的兼容，用户也可以回答1(Yes)或者0(No)。

相的名称后面可以添加带数字的"#”，例如BCC\_A2#2。对于有溶解度间隙的相，应该有两个相的名称相同，但是“#”后的号码不同。

Major constituent(s): <name of major constituent(s) in the phase>

要求指定相中含量最大的成分。如果相中不只一种成分的含量较大，那么可以在同一行上输入它们的名称。如果用户希望使用缺省的成分，回答星号“\*”即可；如果回答\$，将不会改变成分；如果没有主要成分，回答NONE；如果没有合理地指定主成分，程序将会询问相中的单个分数。

Y(<phase>,<constituent>) /XXXXXXXXXX/: <YYYYY>

缺省值为当前值/XXXXXXXXXX/。用户可以通过输入回车接受缺省值，也可以指定一个新值(YYYY)。

相或者成分的名称后面可以添加带数字的“#”例如，Y(BCC\_A2#2,FE), Y(BCC\_A2#2,C#2)。对于有溶解度间隙的相来说，应该有两个相的名称相同，但是“#”后的号码不同。对于有亚点阵的相来说，在第二个亚点阵或者编号更高的亚点阵中的成分也需要添加带数字的“#”后缀。

## 8.10.9 SET\_START\_VALUE

*Description:* 该命令用于为一个单独的变量设定初始值。由于程序自动设定的值能处理大多数的问题，因此，它很少被使用。

*Synopsis:* SET\_START\_VALUE

*Ensuing Prompt:* State variable: <name of a state variable>  
 要求给出状态变量的名称。

Value:  
 要求给状态变量赋初始值。

### 8.10.10 SET\_START\_CONSTITUTION

*Description:* 该命令与SET-ALL-START-VALUES 比较相似，但是它用于可能成分错误的单个相。

*Synopsis:* SET\_START\_CONSTITUTION

*Ensuing Prompt:* Phase name: <name of a phase, and possible major constituent(s)>  
 要求给出要进行成分设定的相的名称。  
 如果该相中，有一个主要成分，那么用户必须在同一行上输入该主要成分与相名称。  
 输入“\*”，表示用户选择缺省的主要成分；输入“\$”，表示用户保持相同的成分；  
 输入NONE，表示用户将给出单个结点分数。

Y(<phase>#<composition\_set>,<constituent>#<sublattice>)/xxx/: <SF>  
 要求给出成分的结点分数(SF)。缺省值/xxx/为上一次计算的值。

### 8.10.11 RECOVER\_START\_VALUES

*Description:* 该命令用于在平衡计算中，恢复初始值。但是，该命令还没有被应用。

*Synopsis:* RECOVER\_START\_VALUES

### 8.10.12 ENTER\_SYMBOL

*Description:* 该命令用于设定符号来表示某些能给用户带来方便的量。符号可以是常数，变量，函数或者表。

*Synopsis 1:* ENTER\_SYMBOL <keyword> <name>=<value, expression or variables>

*Synopsis 2:* ENTER\_SYMBOL

*Ensuing Prompt:* Constant, variable, function or table? /FUNCTION/: <keyword>  
 关键字可以为常数，变量，函数或者表。

常数仅能一次性定义，用于给某个数值取个名字。例如，以 pascal 为单位的1个大气压的值可以用P0来表示，即执行ENTER CONSTANT P0=101325。已定义的常数可以当作数值用于状态的定义中，例如，SET-COND P=P0。

函数为状态变量或者其它函数的表达式。程序保存了这些表达式，因为函数之间互相依赖，因此，当给定某个函数的值时，所有的函数都被求值。

变量与函数很相似，因为它们都可以是状态变量的表达式。但是，与函数不同的是，仅当在定义变量或者在命令EVALUATE中列出它们时，它们才会被求值。另外，可以在任何时候为某个变量定义一个新的表达式。程序将会求出该表达式的值，并且将该值存储为该变量的值。在通过命令SET\_CONDITION设定状态时，可以将变量作为值来使用。

表用于列出通过 STEP 或者MAP命令求出的结果。表就是任意数量的状态变量，函数或者变量的一个目录。在后处理程序POST模块中，也可以使用表。

注意：在表和变量之间存在某种特殊的联系。如果在某个表中使用了某个变量，那么在执行命令TABULATE或者将该表用于画图时，程序将在每行都求出该变量的值。

Name: <name of the symbol>

每个符号都有唯一的名字，该名字必须以某个字母开头，最多包含8个字母。合法的字符包括字母(大写或者小写)，数字和下划线“\_”，而其它的任何特殊字符，例如括号“(”和“”)”，加号“+”，减号“-”，斜线“/”或者“\”，点“.”等，都是非法的。

如果用户希望在同一行上输入符号和值或者函数，那么必须以等号“=”隔开，例如，

TC=T-273.15。否则，程序将会提出以下问题：

注意：定义不同类型的符号(常数，函数，变量或者表)，程序将会提出不同的问题。

Function: <definition for a function or variable>

函数和变量为状态变量或者其它的函数，常数或者变量的表达式。该表达式为FORTRAN语言表达式和算符+，-，\*，=，也可以使用\*\*(仅用于表示整数幂)。同样，也可以使用单元函数，例如LOG，LOG10，EXP，SIN，COS 和ERF。用户可以在一行或者多行上定义表达式。另外，通过输入分号“;”或者在下个问题前输入回车来终止表达式。

函数的例子：

|                   |                   |
|-------------------|-------------------|
| GM(LIQUID)        | 每摩尔组元液相的吉布斯自由能表达式 |
| H.T/4.184         | 体系的热容(以焦表示)       |
| ACR(CR)/X(FCC,CR) | FCC相中，Cr的活度系数     |
| T-273.15          | 温度(以摄氏度表示)        |

& <continuation of the definition for the symbol>

当在定义函数时，如果一行空间不足，可以输入符号“&”，表示将在新的一行继续输入。如果用户完成了输入，输入回车。

Value: <value for a constant>

常数的值只能一次性指定。

Value or expression: <value of expression for a variable>

可以将某个数值或者某个表达式赋予某个变量。该表达式将会被立即求值，然后被忽略。这就提供了一种可能，既保存在不同的状态下平衡计算中得到的值，因为所有的状态和函数都将被求和，从而用于设定新的状态。

Variable(s): <variable(s) in a table>

表由状态变量或者函数组成。通过表，可以列出STEPPING计算中得到的结果。例如：

ENTER TABLE K=T,X(LIQ,C),X(LIQ,CR),ACR(C)

表示表名为K，包含四列，即温度，液相中C和Cr的摩尔分数，C的活度。

& <continuation of the definition for the table>

当在定义表时，如果一行空间不足，那么可以输入符号“&”，表示将在新的一行继续输入。如果用户完成了输入，输入回车。

### 8.10.13 LIST\_SYMBOLS

*Description:* 该命令用于列出所有的常数，函数，变量和表的定义。变量将会与函数一起列出，但是变量结尾处有百分号“%”。

通过命令SHOW或者EVALUATE，可以求出某个函数或者变量的值。而对于某个表，通过

命令TABULATE列出。

*Synopsis:* LIST\_SYMBOLS

### 8.10.14 DELETE\_SYMBOL

*Description:* 该命令用于删除符号(即通过命令ENTER\_SYMBOL定义的常数，变量，函数或者表)。

*Synopsis 1:* DELETE\_SYMBOL <name of a symbol>

*Synopsis 2:* DELETE\_SYMBOL

*Ensuing Prompt:* Name: <name of a symbol>

要求指定要删除的符号的名称。每次只能删除一个符号。

### 8.10.15 SHOW\_VALUE

*Description:* 该命令用于在屏幕上列出任何一个状态变量，函数或者变量的当前值。

*Synopsis 1:* SHOW\_VALUE <name(s) of state variable(s) or symbol(s)>

*Synopsis 2:* SHOW\_VALUE

*Ensuing Prompt:* State variable or symbol: <name(s) of state variable(s) or symbol(s)>

要求给出单个，或者若干个变量，或者符号(输入的函数或者变量)的名称。注意：“\*”表示所有的相或者组元。“\$”表示所有的稳定相。因此，执行命令SHOW W(\*,\*)时，将会列出所有相的质量分数，而命令SHOW W(\$,\*)将会列出所有稳定相的质量分数。

注意：如果用户 SHOW 某个函数，那么程序将会使用当前的状态变量的值对所有的函数求值。但是如果用户 SHOW 某个变量，那么该变量将仍然保持当它被ENTERED 或者上次EVALUATED时的值。因此，如果用户希望从一个计算到另外一个计算中，保存某个值，用户可以将其赋予某个变量。在PARROT模块中，该命令被频繁用于在平衡之间转移值。

## 8.10.16 EVALUATE\_FUNCTIONS

*Description:* 该命令用于求出一个，或者多个，或者所有函数或者变量的值，并且列出来。注意：仅当变量被明确定义时，它们才能被求值。

*Synopsis 1:* EVALUATE\_FUNCTIONS <name(s) of defined function(s)>

*Synopsis 2:* EVALUATE\_FUNCTIONS

*Ensuing Prompt:* Name(s): <name(s) of defined function(s)>

要求指定一个，或者多个输入的函数，或者变量的名称。如果输入\*，程序将会对所有的函数和变量求值。

## 8.10.17 TABULATE

*Description:* 该命令用于列出通过命令STEPPING计算出的表(包含依照STEPPING轴变量变化的各种性质)的值。即使用户在STEPPING计算后才定义该表，也可以列出该表的值。

*Synopsis 1:* TABULATE <name of a defined table> <Return or a file name>

*Synopsis 2:* TABULATE

*Ensuing Prompt:* Name: <name of a defined table>

要求给出表的名称。表的状态必须为ENTERED。

Output to Screen or file /SCREEN/: <file name>

如果输入回车，表将在屏幕上列出表；如果指定某个文件名称，那么表格将被存到该文件中。

## 8.10.18 LIST\_INITIAL\_EQUILIBRIA

*Description:* 该命令用于列出通过命令ADD\_INITIAL\_EQUILIBRIUM添加的所有平衡。所有的初始平衡都用于命令STEP或者MAP中。

*Synopsis:* LIST\_INITIAL\_EQUILIBRIA

## 8.10.19 LOAD\_INITIAL\_EQUILIBRIUM

*Description:* 该命令用于将某个特定的初始平衡的所有状态和计算结果复制到当前平衡中。目前的状态和结果将丢失。

*Synopsis 1:* LOAD\_INITIAL\_EQUILIBRIUM <number of an initial equilibrium>

*Synopsis 2:* LOAD\_INITIAL\_EQUILIBRIUM

*Ensuing Prompt:* Number: <number of an initial equilibrium>

要求指定某个初始平衡的号码。该初始平衡将被装载到当前平衡中。通过命令 LIST-INITIAL-EQUILIBRIA, 可以找到该初始平衡的号码。

## 8.10.20 DELETE\_INITIAL\_EQUILIBRIUM

**Description:** 该命令用于删除某个或者所有的初始平衡。该初始平衡用作 MAPPING 或者 STEPPING 计算中的初始点 (见命令 ADD-INITIAL-EQUILIBRIUM )。

**Synopsis 1:** DELETE\_INITIAL\_EQUILIBRIUM <number of an initial equilibrium>

**Synopsis 2:** DELETE\_INITIAL\_EQUILIBRIUM

**Ensuing Prompt:** Number /ALL/: <number of an initial equilibrium>

要求指定从当前的POLY3工作空间中, 将要删除的初始平衡的号码。通过命令 LIST-INITIAL-EQUILIBRIA, 可以找到该初始平衡的号码。缺省的处理方式为删除所有的平衡。

## 8.10.21 AMEND\_STORED\_EQUILIBRIA

**Description:** 该命令在STEPPING或者MAPPING计算后给出所计算的块(以及包括在块中的相区)的信息

它允许用户列出所有或者部分计算结果, 取消所有或者部分多余的计算结果, 或者计算出的亚稳平衡部分, 或者恢复所有或者部分计算结果(如果该结果被另外一个命令 AMEND\_STORED\_EQUILIBRIA取消)。

由于保存平衡的空间可能会在STEPPING或者MAPPING计算过程中溢出, 因此它被以块形式

写入到文件中。每个块通常会包含一个或者更多范围的平衡区域。

用户可以使用以下选项:

- L 列出计算的平衡(所有或者某个特定的块)
- S 取消所有的平衡(所有的块和它们的区域)
- Q 单独取消每个平衡(特定的块和 / 或者区域)
- R 恢复所有的平衡(所有的块和它们的区域)

**Synopsis:** AMEND\_STORED\_EQUILIBRIA

**Ensuing Prompt:** Name: <name of a defined table>

**Options:** L(ist) S(uspend) Q(uey suspend) R(estore) /L/: <option>

用户可以选择列出所计算的平衡(L), 取消所有的平衡(S), 或者单独取消每个平衡(Q), 或者恢复所有的平衡(R)。

**Block** /\*/: <block number>

用户在选项L, S, Q 或者R中, 必须指定块的编号。用户可以通过输入回车接受 “\*”, 来选择所有的块。

如果用户选择了L, 包含在STEPPING计算或者MAPPING计算中得到的区域和平衡信息的某个块(如果已经指明该块的编号)或者所有块(如果输入 “\*”), 将会在屏幕上列出或者在文本文件中列出。

如果用户选择了Q, 某个块(如果已经指明该块的编号)或者所有块(如果输入 “\*”)中的每个范围将会在屏幕上显示, 并且程序将会询问用户是否取消或者保留它(需要回答Y或者N) :

S(uspend) K(eep) /K/: <S or K>

如果用户选择了S或者R, 指定了某个块, 那么程序将会询问在块中将要被取消或者恢复的区域; 如果用户输入“\*”, 那么程序将会提出如下问题: (需要回答Y或者N)

Really suspend all /N/: <Y or N>

Really restore all /N/: <Y or N>

如果用户回答N, 那么程序将会接着询问用户将对哪个块或者某个块中的哪个区域执行S或者R作用。

Really suspend all /N/: <Y or N>

要求用户确定选择: Y表示取消全部, 而N表示不取消全部。

Really restore all /N/: <Y or N>

要求用户确定选择: Y表示恢复全部, 而N表示不恢复全部。

Range: <range(s) of region>

用户可以指定需要执行取消(选项S), 或者恢复(选项R)作用的一个或者多个范围。

如果输入 “\*”, 将取消或者恢复特定的块中的所有范围。另外, 用户可以先使用LIST选项来了解范围。

S(uspend) K(eep) /K/: <S or K>

对于将要被取消或者保留的某个特定的块中的每个区域, 程序将会询问选项(Q)。在随后的绘图中, 不会考虑被取消的区域。

Output file: /SCREEN/: <file name>

该问题仅用于列出结果(选项L), 之后, 命令将终止。用户必须指定文件名, 通过输入回车, 选择缺省的SCREEN(终端)。所有存储在各类块上的平衡以及它们的范围都将在屏幕上或者文件中列出。

## 8.10.22 SET\_MINIMIZATION\_OPTIONS

*Description:* 该命令(自TCCR/TCW4以来, 可以使用该命令)用于选择POLY模块中执行吉布斯自由能最小化的方式。在TCCR/TCW4版本中的POLY模块中, 程序将缺省使用全域最小化技术用于各种单点平衡计算(部分用于STEPPING或者MAPPING计算)。用户可以使用该命令永久关闭全域最小化技术(对于在目前的TCC程序中的所有随后的计算来说), 从而仅使用通常的

POLY

优化程序(该程序与先前版本, 例如TCCQ/TCW3, TCCP/TCW2等版本中的程序相似), 并且附加地调整进行通常的最小化的方式(主要体现在如何控制达到平衡状态中吉布斯自由能最小值的步骤上)。当在平衡计算中执行全域最小化技术时, 用户可以更进一步调



新

整某些程序的行为方式,例如指定方格点,在STEPPING/MAPPING计算中处理溶体相的

的可能的成分设置等。由于对于某些计算,全域最小化技术也使用通常的POLY优化程序,因此,也可以通过改变控制达到平衡状态中吉布斯能最小值的步骤的方式来提高收敛。当然,过后,可以再次使用该命令来开启全域最小化模块。

该命令由两个部分组成:一个是调整全域最小化的设置,另一个是调整通常的POLY优化程序(普通计算)。句法和缺省选项如下:

Settings for global minimization:

Use global minimization /Y/:

Maximum number of gridpoints per phase /20000/:

Settings for general calculations:

Force positive definite Phase Hessian /N/:

Control minimization step size /N/:

前两个选项用于在全域最小化中,调整吉布斯能最小化的方式,后两个选项将会影响程序如何使用通常的POLY优化从而达到某个平衡状态的最小值。

*Synopsis:*

SET\_MINIMIZATION\_OPTIONS

*Ensuing Prompt:*

Use global minimization /Y/: <Y or N>

用户可以回答Y (Yes) 或者N (No), 来决定是否使用全域最小化技术。

如果用户回答Y(Yes), 那么如果条件可能(与设定的状态有关), 那么将执行全面最小化, 并且将一直进行全域最小化检测。尽管会花费更多的计算时间, 但是计算更加准确。

如果用户回答 N (No), 在当前的TCC进程中, 将不会进行全域最小化检测, 并且也不会为随后的计算采用全域最小化技术。这表明全域最小化技术将被永久性关闭, 而程序将会使用通常的POLY优化程序。

Maximum number of gridpoints per phase /20000/: <integer number>

要求指定方格点的最大数目, 在执行全域最小化技术的计算中, 该方格点用于当前体系中的每个相的计算。方格点越多, 精度更高, 但是计算的时间更长。在

TCCR/TCW4版本中, 所有相中的要计算的格点数的总数不能超过2E6。

Force positive definite Phase Hessian /N/: <Y or N>

用户可以回答Y (Yes) 或者N (No), 来决定在通常的POLY优化程序中, 达到某平衡状态的最小值的方式。对于所有的处于平衡状态的相, 它与特殊的量: 相稳定函数QF(phase)有关 [当某个相的成分处于spinodal分解中, 该相的相稳定函数为负值, 而在其它的情况下, 为正值]。

如果某个溶体相的成分处于spinodal分解中, 如果在上面的提示中回答Y, 那么当某个Hessian矩阵的特征值为正时, 程序将使计算向最小值靠拢而不是接近于局部最小化。更进一步, 如果 Hessian 矩阵中与某个相有关的特征值接近于0.0, 那么步长太大, /Y/ 选项将会将该特征值限制在一个较小的范围内, 这将减小步长, 并且提高收敛性。通过 POLY连续命令SHOW\_VALUE QF(phase), 可以显示出处于某个

平衡状态下的某个相的最小特征值的值。

如果用户回答Y (Yes), 那么有收敛问题时, 该选择将有利于POLY优化收敛, 特别是在出现QF(phase)=0的情况下。

如果用户回答N (No), 程序将采用通常的POLY优化程序, 它与先前版本(例如TCCQ/TCW3, TCCP/TCW2版本等)中的POLY优化程序相似。

注意：对于体系中的每个相来说，该相的吉布斯自由能为温度，压强和成分的函数，

例如  $G_m(X) = G_m(T, P; y_1, y_2, \dots, y_n)$ ，用户可以计算某个Hessian 矩阵，

$\partial^2 G_m / \partial y_i \partial y_j$ ，表示了相的吉布斯自由能曲线在某个成分点下的斜率。将该矩阵

对角化，特征值就是对角线元素，即  $e_1, e_2, \dots, e_n$ 。QF(phase)量的最小值就是用这些特征值的最小值除以某个相对应的理想(化学计量比)相的相同的值：

$QF(ph) = \min(\{e_1, e_2, \dots, e_n\}) / \min(\{se_1, se_2, \dots, se_n\})$ ， $se_1, se_2, \dots, se_n$  为理想相的

特征值。因此，对于某个理想(化学计量比)相来说，QF(phase) 总是为 0。

Control minimization step size /N/: <Y or N>

用户可以选择Y (Yes)或者N (No)来决定是否需要在通常的POLY优化进程中，对达到某个平衡的最小值的步长进行控制。如果回答Y (Yes)，那么将有利于POLY优化收敛，特别是某些结点分数小于1E-4时。

## 8.10.23 SPECIAL\_OPTIONS

*Description:* 自TCCN版本以来，该命令取代了某些以前的TCC版本中的命令

SET\_MISCIBILITY\_GAP。在

TCCN版本中，添加了7个选项，而在TCCQ版本中，又添加了2个选项。

在目前的版本中，用户可以对以下14个选项进行设定：

SET\_MISCIBILITY\_GAP  
SET\_MAJOR\_CONSTITUENTS  
MISC\_GAP\_TEST\_INTERVAL  
SET\_PHASE\_ADDITION  
LIST\_PHASE\_ADDITION  
SET\_BREAK\_CONDITION  
SET\_PRESENT\_PHASE  
OUTPUT\_AT\_MAP\_AND\_STEP  
T-ZERO TEMPERATURE  
PARAEQUILIBRIUM  
STABILITY\_CHECK  
NEVER\_ADJUST\_MINIMUM\_Y  
TOGGLE\_ALTERNATE\_MODE  
SHOW\_OUTPUT\_FILE  
NONE

*Synopsis:* SPECIAL\_OPTIONS

*Ensuing Prompt:* Which option? / SET\_MISCIBILITY\_GAP /: <Option>

*Option:* 用户可以从以下12个选项中选择其一，或者选择NONE(表示不选择这些特殊选项)。对于某些选项来说，程序将会进一步给出提示。

 SET\_MISCIBILITY\_GAP

某个可以同时以两种(或者更多种)成分形式存在的溶体相必须在它的相描述中有两种(或者更多种)成分设置。以前,用户必须在GES模块中进行设定,而在TCCJ版本中,

在POLY模块中引入了命令SET\_MISCIBILITY\_GAP。现在,它成为命令

### SPECIAL\_OPTIONS

的一个子命令。通常,数据库根据需要生成一些成分设置,但是用户可以通过此命令添加或者删除某些设置。

用户通常需要为有序/无序转变的相设定两个或者更多的成分,但是用户经常会忘记为有序相和无序相都设定成分,这将导致程序运行失败。而该选项将会在进行有序相的计算时,自动为无序相生成成分设置。

如果用户有自己的数据文件,除非用户已经在TDB文件中通过命令

### TYPE\_DEFINITION

添加了成分设置或者在GES模块中通过命令组AMEND\_PHASE\_DESCRIPTION

COMPOSITION\_SET进行设置,否则必须使用该命令表明某个溶体相可能有溶解度间隙(或者表明某个溶体相可能会有某些复杂的相分离,从而不止有两种成分设置)。

选择该选项后,程序将会询问新的设置中的主要成分,用户必须正确设置,否则对溶解度间隙的检测将失败。

Phase with miscibility gap: <name of a phase>

要求指定有溶解度间隙的相的名称。

New highest composition set number /2/: <#>

通常,缺省值比当前值大一。每个相都有一个初始的成分设置。如果用户给出一个比当前的值低的值,那么该成分设置将无效。用户不能取消第一个成分设置。

以下的信息要求用户为成分设置 # (2,3,...)指定成分:

Give for composition set #

Major constituent(s) for sublattice 1: /XX/: <YY>

用户可以给出每个亚点阵中的主要成分(YY)。当计算平衡时,它能简化给出初始值,因为有溶解度间隙的相应该在每个成分设置中有不同的主要成分。

对于相中的每个亚点阵,程序都会提出此问题。有时,如果没有指定主要成分,那么程序将会针对第一个“成分设置”中的所有亚点阵,重复提出该问题。

### SET\_MAJOR\_CONSTITUENT

该选项用于设定有溶解度间隙的溶体相的成分设置的主要成分。通常,当通过命令SET\_MISCIBILITY\_GAP生成一个新成分的设置时,用户需要指定主要成分。但是对于第一个“成分设置”来说,用户必须在命令SET\_MISCIBILITY\_GAP前通过该命令指定主要成分。

Phase name: <name of a phase>

要求指定要进行相成分设定的溶体相的名称。

Composition set number /1/: <#>

组成设置的号码<#>的缺省值通常为/1/。每个相都有一个初始成分设置。

Major constituent(s) for sublattice 1: /XX/: <YY>

用户可以给出某个溶体相的每个亚点阵的主要成分(YY)。它能简化给出初始值,因为有溶解度间隙的相应该在每个组成设置中有不同的主要成分。对于相中的每个亚点阵,程序都会提出此问题。

### MISC\_GAP\_TEST\_INTERVAL

对于所有的计算，即通常的平衡计算和STEPPING和MAPPING计算，程序都将添加溶解度间隙检测。通常，数据库将会为某个相的可能溶解度间隙生成所有必须的成分设置，但是用户也可以直接输入（见其它的SPECIAL\_OPTION的选项）。测试中，程序将会尝试所有组成设置的缺省成分，计算该缺省成分是否能使该成分设置以稳定或者亚稳定的形式存在，而成分与该相的任何一种其它的成分设置不同。如果计算成功，表明该设置在稳定或者亚稳定的溶解度间隙范围内。如果所有的成分设置的成分不同，那么将跳过检测，否则，将显示每个被检测的相的信息。在某些后来的版本中，这条信息可能会被取消。

Miscibility gap test frequency /5/: <#>

该命令相当难操作，但是它对于在STEPPING和MAPPING计算过程中控制溶解度间隙的检测非常有用。通常，程序每5次计算进行一次检测，但是如果MAPPING或者STEPPING计算中出现困难，那么用户可以将该频率值改变为另外某个数值#。

 SET\_PHASE\_ADDITION

在某些情况下，有必要为某个相(化学计量比相或者溶剂相)的吉布斯自由能添加某种恒定的贡献。当然，用户可以总是在TDB或者GES模块中为某个化学计量比相或者某个溶剂相中的某个纯end-member 添加该贡献。但是，如果所添加的贡献跟平衡状态有关，例如应变能，或者表面能，或者界面能，那么将这些量与平衡状态而不是热力学数据联系起来更方便。为此，命令SPECIAL\_OPTIONS中添加了两个特殊的选项，即SET\_PHASE\_ADDITION 和LIST\_PHASE\_ADDITION。

用户可以为某个相的吉布斯自由能添加某种对能量有贡献的因素的贡献数值。该值必须为常数(表示该贡献不是平衡状态中的相成分或者温度，压强的函数)，并且必须总是以J/mol相的分子式单位为单位给出。

Phase name: <name of a phase>

指定将要添加某种贡献的相(化学计量比相或者溶剂相)的名称。

Addition to G per mole formula unit: <xxxxx>

所给出的值将会被添加到某相(化学计量比相或者溶剂相)的吉布斯自由能上。该值可以表示形核阻碍，表面张力，弹性能或者其它方面的贡献。

注意：它与成分，温度或者压强无关。

 LIST\_PHASE\_ADDITION

该命令用于列出在当前计算的平衡下，通过命令SET\_PHASE\_ADDITION设定的所有相的吉布斯能 $G_m$  (J/mol 分子式单位) 的额外贡献值。

 SET\_BREAK\_CONDITION

该命令用于设定终止命令STEP的条件。

Break Condition: <a break condition>

用户可以指定某种终止条件，该条件能使STEPPING计算在没达到轴的末尾前终止。终止条件可以设定为 $NP(LIQ) < 0.001$  或者 $W(FCC,CR) > 13$  或者  $REST=1$ ，其中 REST为用户定义的函数或者变量。

 SET\_PRESENT\_PHASE

如果用户通过该选项指定了某个相，那么在执行MAP命令时，该相在所有计算的平衡中必须稳定。该命令能方便地用于将三元体系中单变量线的计算限制在液相面的计算上。通常，该计算必须有两个成分轴和一个温度轴，并且所有的单变量线，包括3个固相平衡的单变量线都将被绘出。另外，如果在该命令中设定液相，那么仅绘制与液相有关的线。

Phase name: <name of a phase>

要求指定在所有的平衡计算中，必须处于稳定状态的相的名称。

 OUTPUT\_AT\_MAP\_AND\_STEP

通常，在MAPPING或者STEPPING计算中，屏幕上显示的信息为压缩信息，对于每个相的集合来说，仅显示出MAPPING或者STEPPING变量的前几个值。但是，如果用户希望显示所有MAP或者STEP计算的详细信息，那么用户可以将该选项的状态设定为ON。

On? /Y/: <Y or N>

用户可以回答Y (Yes)或者N (No)。缺省值为Y，表示在随后的MAPPING或者STEPPING计算中，列出所有详细信息。如果回答N，表示将显示状态设置为正常状态。

 T-ZERO TEMPERATURE

该选项用于计算当两个特定相的吉布斯自由能相等时的温度，即所谓的 $T_0$ 。在使用该选项进行计算前，用户必须在某一估计的温度下，计算一个平衡，但是，如果两个目标相中有一个稳定，那么不需要先计算平衡。

Name of first phase: <phase A>

Name of second phase: <phase B>

要求给出需要进行 $T_0$ 温度计算的两个目标相的名称。

如果程序成功地计算了 $T_0$ 温度，那么屏幕上将会显示如下信息：例如：

The  $T_0$  temperature is 840.82 K

Note: LIST-EQUILIBRIUM is not relevant

第一条信息给出了两个特定相之间的 $T_0$ 温度。第二条信息表示命令

LIST\_EQUILIBRIUM 与该选项无关，不会列出体系处于 $T_0$ 温度时的平衡状态。

## PARAEQUILIBRIUM

对于间隙组元作为快速扩散物种的合金体系，执行该选项，可以计算两个相之间的仲平衡状态。

注意：在TCCP版本中，只有C可以被作为间隙组元，因此，将C设定为缺省值，但是，在TCCQ版本中，极大地提高了此选项的用途。现在，它可以在仲平衡计算中，将不止一个组元设定为快速扩散物种(例如C, N, O, S等单个元素或者组合体)。

在仲平衡状态下，沿着被命令SET\_AXIS\_VARIABLE设定为STEPPING变量的温度或者成分变量(该成分为基体或者替代组元的成分)，一种或者多种间隙组元(例如C, N, O, S等单个元素或者组合体)在两个局部平衡的相中有相同的化学势，但是成分不同。

为了保证在合金体系中，成功地进行两个相之间的仲平衡状态的STEPPING计算，之前将初始总成分设定为状态，进行一次单点平衡计算十分重要。但是，如果目标相中的一个或者两个相在该平衡中稳定时，并不需要之前进行单点计算。同时，用户必须设定一个合理的初始总成分用于两个目标相之间的仲平衡计算，当仲平衡状态中，考虑不止一种间隙组元时，由于不同的间隙组元(例如C和N)在不同的结构相中分配行为可能有明显的区别，这就十分重要。否则，对于某些只考虑某个间隙组元的情况，计算两个相之间的仲平衡状态时，采用初始的总成分作为状态可行，但是可能在考虑其它的间隙组元(一个或者多个)的时候，可能就不可行了。

Name of first phase: <phase A>

Name of second phase: <phase B>

要求用户输入两个建立平衡状态的目标相A和B的名称。用户可以根据提示分别输入两个相的名称，也可以直接在一行上输入(以空格隔开，例如"FCC#2 M23C6")。

**注意：**用户必须对平衡的计算完全理解。特别地，需要注意四种不同的情况：(1)所选择的相必须有相似的供快速扩散间隙组元占据的间隙/空位亚点阵；(2)在定义的体系和指定的初始总成分下，目标相的选择必须合理；(3)两个目标相的组成定义必须包含当前合金体系中所有替代和间隙组元；或者(4)在当前定义的体系中，无法计算给定间隙组元的目标相之间的平衡状态。

Fast diffusing component: /C/: <interstitial component>

自TCCQ版本以来，可以将一个或者多个间隙组元作为快速扩散物种。

**注意：**用户必须根据目标相的相组成定义合理指定间隙组元，即所指定的间隙组元必须在目标相的组成定义中位于间隙/空位亚点阵上。

如果指定的快速扩散组元不是缺省的C，那么用户需输入合适的间隙物种。用户可以在一行上输入多个间隙物种(以空格隔开，例如"C N")。

Fast diffusing component: /NONE/:

如果当前的平衡计算中要考虑更多的快速扩散组元，那么再输入合理的间隙物种；否则，输入回车，启动平衡点计算。

NP(FCC) = 1.0012 with U-fractions C = 4.02917E-04 N = 9.9616962E-05

NP(M23C6) = 0.0012 with U-fractions C = 2.60870E-01 N = 0.0000000E+00

All other compositions the same in both phases

Note: LIST-EQUILIBRIUM is not relevant

第一行显示了体系中间隙组元C的总u-分数。第一行和第二行列出了以摩尔百分比表示的相的数量，以及以u-分数表示的特定的相中间隙组元C和N的含量。最后两行表示在当前的平衡状态下，所有其它的成分在两个相中相同。另外，命令LIST\_EQUILIBRIUM 与该选项无关，不会列出体系在当前状态下的平衡状态。

当两个相之间的平衡状态计算失败时，屏幕上将会显示如下信息：

\*\*\* ERROR 4 IN NS01AD

\*\*\* Numerical error

表明所选择的目标相在目前的合金体系或者初始总成分下不合理，或者一个或者两个相的与指定的间隙元素和替代元素有关的相组成定义不合理。在这种情况下，用户必须修改初始总成分或者通过合理地选择合金体系中的快速扩散元素来合理地指定目标相。

## STABILITY\_CHECK

在多组元体系的某些成分范围内，经常发生某个不稳定的溶体相区域处于某个溶解度间隙中，并且难于寻找稳定范围(所谓的spinodal曲线或者仅仅为spinodal)这类情况。处于spinodal中的体系的成分将会有波动，它在热力学上处于不稳定状态，可能发生所谓的pinodal 分解(即会分解为有两种稳定成分区域的混合物，每种成分处于溶解度间隙的两边)。

从TCCP版本开始，该选项使程序在随后的单点平衡计算和MAPPING/STEPPING计算中，自动检测稳定相和不稳定相的内在稳定性。因此，它能检测出在随后的计算中，是否有相发生spinodal分解。如果在计算中，某一不稳定相位于溶解度间隙内，程序将会给出警告，提示用户取消该不稳定相，或者采用命令组

SET\_ALL\_START\_VALUE FORCE自动生成相成分的初始值或者生成其它的成分



设置。如果用户知道该不稳定相绝对不可能在当前的计算中形成，那么可以忽略该警告信息。

Stability check on? /Y/: <Y or N>

用户可以回答Y (Yes)或者N(No)。缺省值Y表示在随后的所有单点和 MAPPING/STEPPING 计算中，开启自动稳定性检测。如果回答N,表示在各种计算中，将不会进行稳定性检查。

Check also for unstable phases? /Y/: <Y or N>

如果用户开启了自动稳定性检测选项，那么在这里可以选择是否也检测不稳定相的稳定性。缺省值为Y (Yes)。如果计算发现在随后的单点或者MAPPING/STEPPING 计算中，某个不稳定相位于溶解度间隙内，那么程序将会给出一条警告信息，提示用户在计算设置中选择性地做一些调整(例如取消不稳定相，或者采用命令组 S\_A\_S\_V F设定相成分的初始值等)。如果回答N (No)，程序将只对稳定相进行检测。

### NEVER\_ADJUST\_MINIMUM\_Y

如果用户开启此选项，那么在随后的单点计算和MAPPING/STEPPING 计算中，物种的最小分数将会被永久设定为可能的最小值(例如1.00E-31，PC Linux)。即使存在收敛问题，如果不使用命令SET\_NUMERICAL\_LIMITS，那么不会允许自动调整数值范围[调整到依赖硬件的精度(PC Linux, 2.00E-14)]。

### TOGGLE\_ALTERNATE\_MODE

该选项用于在PARROT优化过程中，将用于实验平衡计算的ALTERNATE模块的触发器的

值设定为DEFAULT，ALWAYS 和NEVER。DEFAULT 表示程序将会根据依赖命令

SET\_ALTERNATE的Alternate Technique 来计算实验点。ALWAYS表示即使在 PARROT

模块中，关闭了Alternate Mode，那么程序也会根据Alternate Technique 来计算实验点。NEVER 表示即使在PARROT模块中，开启了Alternate Mode，程序也只会实

验点当作正常平衡来计算。

注意：用户不能使用ALTERNATE模块来计算单相实验数据。

### SHOW\_OUTPUT\_FILE

如果用户选择了该命令，那么必须给出某一文本文件的名称，从命令SHOW\_VALUE 中得到的输入结果将写入该文件中。自TCCQ版本以来，只稍微改进了此选项，因此，

所有的输出仍将显示在屏幕上。

### NONE

表示在随后的单点平衡计算和MAPPING/STEPPING 计算中，取消任何一种先前作出的选择。



**注意:** 自TCCP版本以来, 执行命令序列SPECIAL\_OPTIONS进行平衡计算时, 如果任何阶段存在寻找稳定相的任何收敛困难时(除了用户开启了特殊的选项 NEVER\_ADJUST\_MINIMUM\_Y外), 屏幕上将会显示出如下信息:

Convergence problems, increasing smallest site-fraction from 1.00E-30 to hardware precision 2.00E-14. You can restore using SET-NUMERICAL-LIMITS

表明当前POLY3工作空间中的最小的结点分数自动地由缺省值1.00E-30 增加到了依赖硬件的精度(PC Windows, 2.00E-14)。对于随后的其它POLY模块计算, 用户可以使用命令SET\_NUMERICAL\_LIMITS将最小的结点分数恢复到先前的值或者重新设定为其它的值, 或者重新设定其它的数值范围(见章节8.10.7命令 SET\_NUMERICAL\_LIMITS)。

### 8.10.24 CREATE\_NEW\_EQUILIBRIUM

*Description:* 在PARROT/ED\_EXP 模块中进行数据评估时,通过该命令,用户可以在POLY模块中生成若干个平衡。这些平衡中的状态和相的设置都不同(但是组元的设置通常相同)。通常, 这里有一个平衡。如果用户想保留该平衡中关于状态和相的设置, 那么可以通过该命令生成另外一个平衡, 并且设置另外一种状态。在PARROT模块中, 实验信息以平衡序列的形式保存。

*Synopsis:* CREATE\_NEW\_EQUILIBRIUM

*Ensuing Prompt:* Equilibrium number /2/: <a new equilibrium number>

在POLY3工作空间中, 每个平衡都有唯一的整数编号。过后, 用户可以通过命令 SELECT\_EQUILIBRIUM来检索某个平衡编号。

Initiation code /2/:

当生成某个平衡时, 用户可以选择输入所有的组元和相(初始编码为2), 或者仅输入组元(初始编码为1), 或者取消所有的相, 组元等(初始编码为0)。其它所有的值都不合法。

注意: 输入的组元和相的状态可以在过后通过命令CHANGE\_STATUS改变。

### 8.10.25 SELECT\_EQUILIBRIUM

*Description:* 在PARROT/ED\_EXP模块中进行数据评估时, 如果已经生成两个或者两个以上的平衡, 那么通过该命令, 可以在平衡之间进行切换。

*Synopsis 1:* SELECT\_EQUILIBRIUM <choice on equilibrium>

*Synopsis 2:* SELECT\_EQUILIBRIUM

*Ensuing Prompt:* Number /NEXT/: <choice on equilibrium>

用户可以回答FIRST, LAST, NEXT, PREVIOUS 或者PRESENT。大多数命令仅对当前的平衡作用。另外, REINITIATE 和DEFINE\_COMPONENT用于移除所有的平衡。

## 8.10.26 MACRO\_FILE\_OPEN

*Description:* MACRO就是在一个简单的文本文件(通常TCC中, 缺省扩展名为“TCM”, DICTRA中, 扩展名为“DCM”)中预定义各种TCC(和DICTRA)命令序列, 然后直接通过该命令执行这些命令。因此, 它是一种特别方便和简单的执行命令的方式。这些命令可以是各种模块中的命令, 例如TCC软件中的SYS, POLY, PARROT和TAB模块, DICTRA软件中的SYS, POLY, PARROT和DICTRA\_Monitor 模块中的命令。

当用户经常要进行相同或者类似的计算, 而只需要对原先的设置(例如体系的定义, 状态的设置, 绘图状态的设置等)做一点改变时, 该命令就非常有用, 例如在优化过程中绘图等。所有合法的TCC(和DICTRA)命令可以存在MACRO文件中, 用户只需输入在后面加了文件名的命令MACRO就可以调用这些命令。

MACRO文件可以包含任意的TCC(和DICTRA)命令。MACRO必须以EXIT终止或者在SYS, GES, POLY, PARROT或者POST模块中通过命令SET\_INTERACTIVE中断。

MACRO的一个有趣的功能为能够使程序与用户进行交互对话。因此, 用户可以下面的方式输入:

```
GO POLY-3
SET AXIS VAR 2 T
@?Low-temperature-limit
@?High-temperature-limit
```

TMACRO将会在“@?”停止, 屏幕上会在文本后写入“?”, 等待用户的输入。它将会把用户的输入输入到Thermo-Calc程序中。在该例子中, 要求用户输入温度轴的上限值和下限值。

用户也可以设定MACRO变量, 它们标记为 #1, #2等最多9个变量。它们可以通过以下方式赋值:

```
@#3First element?
```

程序将会给出提示First element?, 等待用户的输入。用户的输入将会赋予MACRO 变量3。同时, 用户也可以在MACRO的不同部分使用这些变量。例如:

```
DEFINE-SYSTEM ##3
```

表示将MACRO 变量3的内容完整复制给 “##3”。用户也可以将其用于更复杂的命令:

```
SET AXIS VAR 1 x(##3) 0 1,,,
```

表示将MACRO变量3的摩尔分数作为轴1。

注意: 当程序处于POLY, POST, SYS, GES或者PARROT 模块中时, 用户必须通过命令SET\_INTERACTIVE来终止MACRO命令。

在执行MACRO 文件时, 当出现“@&”时, 程序将暂停。

MACRO文件也可以有行数不限的注释行, 注释行以符号“@@”开头。这些注释行为说明

MACRO文件的内容提供了极大的帮助, 而它们不会被当作命令行, 因此当TCC调用该文件时, 它们不会影响到所有正常的Thermo-Calc命令的执行。

在 SYS 模块中, 如果在任何一个其它的SYS/TDB/TAB/GES/POLY/POST/ PARROT/

ED-EXP 命令或者特殊模块命令前执行了命令SET\_LOG\_FILE, 并且给出了文件名 \*.LOG, 那么 TCC 软件将自动生成MACRO文件。这种\*.LOG 是一种简单的文本文件, 通过简单的文本编辑器(例如Notepad, Wordpad, PFE, Emacs, vi等等), 就可以进一步编辑, 例如去掉不必要的命令行, 修改某些命令, 设置和定义, 添加某些停顿点, 添加某些有用的以符号”@@“开头的注释行等等。然后, 可以将其保存为带标准扩展名 TCM”的MACRO 文件。

一个有经验的用户可以直接通过TCC(DICTRA)外的任何一个简单的文本编辑器直接写或

者编辑一个合理的MACRO文件, 用于计算或者模拟。

自TCCN版本以来, 一个MACRO文件可以有5个嵌套层次, 即一个MACRO文件可以引用另外一个 MACRO 文件, 如果一个子层次的MACRO被命令SET\_INTERACTIVE终止, 那么它将在先前的MACRO的下一个命令中继续执行。如果它被命令end-of-file终止, 那么整个TCC程序将中断。该项功能可以用于很多不同的方面, 特别是, 当用户在某

个特定的时间(例如, 在晚上)进行合金设计, 而该设计需要对类似的材料体系/过程(这些体系或者过程在许多不同, 但是合理编辑的MACRO 文件中指定, 这些MACRO 文件组织层次达到5)进行许多次计算/模拟时, 用户可以在某个特定的时间(例如, 在离开办公室前)来运行MACRO(处于最高层次), 在过后(例如下一天的早上), 用户可以系统和高效地检查/比较/分析结果(所有这些结果可以以各种图形文件形式, 和/或者

EXP/TEXT/XLS/文件保存)。

值得一提的是: 只需要在MACRO文件[或者是如果使用了MACRO文件的任何一个子层次, 处

于最高水平的MACRO文件]的每个开头添加SYS\_Module命令SET\_ECHO,那么它就能非常方便方

便地用于自动在屏幕上显示TCC(或者DICTRA)软件中, 所有连续操作的各种命令的完整信

息。

*Synopsis 1:* MACRO\_FILE\_OPEN <name of a Macro file>

*Synopsis 2:* MACRO\_FILE\_OPEN

*Ensuing Prompt:* Macro filename: <name of a Macro file>

指定文件名。缺省的扩展名为TCM”。

*Notes:* 在 Windows NT/2000/95/98/ME 环境中, 如果在该命令后没有给出合适的MACRO文件名, 那么屏幕上将会弹出一个Open file 窗口, 以便用户恰当地指定路径在Look in 框中)

和文件名 (在File name 框中), 如图 8-6。

另外, 用户不能改变文件类型(即TCM, 在 Files of type 框中)。如果用户点击Open按钮,

那么程序将会执行这些文件中的各种Thermo-Calc 命令。另外, 用户也可以取消Open file

窗口, 那么程序将不会打开当前的MACRO文件。

如果MACRO文件包含了某些SYS/TDB/TAB/GES/POLY/POST/PARROT/ED\_EXP模块中的命令,

而这些命令用于设定\*.LOG 文件, 保存 / 读取 GES5/POLY3/PARROT 工作空间, 切换 USER

数据库, 编辑\*.POP 文件中的实验数据, 生成新的\*.PAR 文件, 添加实验数据 \*.EXP 文件, 绘制或者转寸图等等, 那么屏幕上将会弹出一个相应的窗口(例如, **Save As, Open file, Print窗口等等**)。用户可以根据意愿或者当用户知道在MACRO 文件的某一点上该做什么时, 通过给出文件名(最好带扩展名。如果该文件不在MACRO所在的工作区域内, 那么用户需要指定文件的合理和完整的文件名)和某些时候, 带上在某些相关的命令或者参数 / 选项后需要的选项这样来避免程序弹出窗口 (见相关的命令和模块, 可以得到更多信息)。

*More Notes:* 当某个 MACRO 文件用于在屏幕上画图时, 如果先前使用了命令SET\_PLOT\_FORMAT 改变缺省值, 从而改变画图环境, 那么必须先通过命令SET\_PLOT\_FORMAT使画图环境恢复到缺省值, 即1 (Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME)或者9 (Linux 和所有类型的UNIX 平台)。  
参考TCEX12.TCM 和TCCR Examples Book, 见更全面的例子。参考章节14.2.8, 见更多关于如何建立MACRO文件的详细信息。

### 8.10.27 REINITIATE\_MODULE

*Description:* 该命令用于将模块更新到最初的状态。该命令将移除所有的重新设置的状态, 改变的状态, 输入的符号等。同样, 存储文件的名称也重新恢复到缺省值。  
*Synopsis:* REINITIATE\_MODULE

### 8.10.28 PATCH

*Description:* 当用户知道其在做什么时, 可以使用该命令。自TCCN版本以来, 可以使用该命令。  
*Synopsis:* PATCH

## 8.11 水溶液

由于水溶液中的多相交相互作用的复杂性,用于水溶液计算的Thermo-Calc 软件/数据库/界面程序包中添加了一些特殊的功能, 这些功能与相的定义, 参考状态的定义, 附加的衍生变量, 模型和数据控制, 以及高级易用的模块有关。

### 8.11.1 水溶液中相的定义和参考状态

不管采用什么模型来描述水溶液相，它总是以所谓的AQUEOUS相作为参考。用户不要混合使用不同的模型来描述此相，因为无论什么时候，只要提取了某个包含水溶液相的数据库，那么将会有某个特定的水溶液模型(已经预定义在数据库中)与之联系，例如SIT与TCAQ和PAQ水溶液数据库联系，全面修订过的HKF Model与AQS水溶液数据库联系。

为了处理各种带电的水溶液物种(自由离子或者络合物)和水溶液相中的内在电子平衡，在水溶液物种的化学分子式中采用了一个特殊的元素，即“ZE”。例如，H1ZE1 表示 $H^+$ ，H1O1ZE-1表示 $OH^-$ ，C2H1O4ZE-1表示 $HC_2O_4^-$ ，C2H3O2ZE-1表示 $CH_3COO^-$ ，C6FE1H2N6ZE-2表示 $FeC_6H_2N_6^{2-}$ (在GES模块中有详细介绍)。

更进一步，为了计算水溶液相中的标准电势(氧化还原电势)，在数据库中预定义了一个假想的电极相(称作“REFERENCE\_ELECTRODE”，以标准氢电极作为参考)用于所有的Thermo-Calc计算。当然，REFERENCE\_ELECTRODE 相永远不能与水溶液相保持平衡，因此，在GES5和POLY3空间中，该相的状态必须被设定为SUSPENDED。

对于水溶液体系，为了建立水溶液相，以及计算水溶液的活度，浓度，酸度(pH)，电势(Eh)等等，基本元素O(氧)，H(氢)和ZE(电子)的组元定义必须总是H<sub>2</sub>O，H<sup>+</sup>和ZE。对于在该交互作用体系定义的其它元素来说，它们的组元可以被定义为元素本身(例如FE，NI，C，S，NA和CL)，或者其它的有意义的分子式(例如FECL<sub>3</sub>，NICAL<sub>2</sub>，CO<sub>2</sub>/CO<sub>3</sub>-2，H<sub>2</sub>S，NACL和CL<sup>-</sup>)。

组元H<sub>2</sub>O的参考状态为在当前温度和1bar下，将H<sub>2</sub>O作为 AQUEOUS 相中的溶剂(即成分H<sub>2</sub>O)。为了方便地计算水溶液浓度，通常以重量摩尔浓度来表示(1kg水中的溶质的摩尔数)，组元水的初始量通常被设定为1.0 kg，即B(H<sub>2</sub>O)=1000或者N(H<sub>2</sub>O)=55.5084。当然，用户可以设定不同的重量，例如2kg，[B(H<sub>2</sub>O)=2000或者N(H<sub>2</sub>O)=111.0168]或者100 g[B(H<sub>2</sub>O)=100或者 N(H<sub>2</sub>O)= 5.55084]。

### 8.11.2 与水溶液相相关的模型，数据库和模块

自TCCL(发布于1996年)以来，在水溶液的热力学计算方面作了一些提高和改进。从以下几个方向做了这些提高和改进：

- (1) 在GSE模块中使用水溶液相模型 (例如, SIT, HKF 和 PITZ 模型。见章节11)
- (2) 发展和扩充热力学数据库中的水溶液数据库(例如, AQ/PAQ, TCAQ, AQS等。见章4)
- (3) 通过采用易用界面，建立和加强某些高级模块(例如，POURBAIX等。见章节10)

Thermo-Calc软件在进一步发展一些更全面的模型，可靠的数据库，高级模块和加强某些功能。

### 8.11.3 水溶液相中的辅助衍生变量

在GES和POLY模块中，采取了一种全面的方式来处理AQUEOUS溶体相，因为计算出的量对于水溶液化学，材料腐蚀，化学工程，地球化学，环境工程等特别有用。

所有用于其它相的标准状态变量(见章节8.3.3和文档“Thermo-Calc软件体系”中的章节2.5)都可以直接用于AQUEOUS 溶液相。而且，也需要定义一些衍生变量，这些变量为状态变量组成的函数。

对于某些相，例如水溶液相，气相混合物，液相等，Thermo-Calc软件(特别是某些高级的易用模块)中通过符号(变量，函数和表)预定义了一些衍生变量。另外，用户也可以根据意愿为体系定义任意的衍生变量。

在表8-2中列出了Thermo-Calc中预定义的用于AQUEOUS溶液相的一些衍生变量，并且给出了简单的介绍。因为EOS表达式和纯溶剂H<sub>2</sub>O的标准热力学性质必须与纯气态H<sub>2</sub>O等同，因此，表中也列出了用于GAS混合相的一些衍生变量。在某个特定的温度，压强，成分状态下，一个水溶液相可以与某个稳定的气相混合物或者某个饱和的蒸汽平衡。

注意：表中列出的某些衍生变量已经在GES和POLY模块中，以及某些高级模块(例如POURBAIX)中被动预定义。

注意：这些衍生变量，不管是由GES，POLY或者POURBAIX模块预定义，还是由用户定义，都被当作特殊的符号(变量，函数或者表)来保存。像章节 8.10.7中所讲，每个符号必须有唯一的名称，名称必须以某个字母开头，并且最多包含8个合法的字符[包括字母(大写或者小写)，数字和下划线"\_"],但是不能为其它任何字符，例如括号“(”和“)””，加号“+”，减号“-”，斜线“/”或者“\”，点“.”。因此，对于各种单个水溶液物种(以及气相物种)来说，这些量由带数字的名称表示，例如NS#, ML#, TIC#, RC#, logAI#, AI#, (and RA#, RF#和FUG#)。

## 8.11.4 输出模式的改进

为了尽可能多地提供各种多相平衡中的AQUEOUS溶液相的信息，稍微扩充和修改了POLY模块中的平衡结果的标准输出模式。在以下几个方面作了修改：

(1) 在表中列出了溶剂(水)和每个水溶液溶质的更多的平衡信息，包括结点分数，摩尔数，质量摩尔浓度，活度和以10为底的对数( $\log_{10} \text{Act}$ )。

(2) 同时也列出整个水溶液相的某些总体性质：酸度，电势，热力学亲和力，假想电子的活度，离子强度，滴定碱度，总质量摩尔浓度，水酸度和渗透系数等。

(3) 通过命令SET\_NUMERICAL\_LIMIT，可以改变水溶液物种的最小结点分数。

相应地，POLY命令LIST\_EQUILIBRIUM 总会自动地显示出某一水溶液相的一些修改过的以及附加的信息。

表8-2 (用于水溶液相和气相的衍生变量)

| Name<br>名称                             | Mnemonic<br>助记名 | Possibly Units<br>单位 | Meaning<br>意义                                                 | Comments<br>注释                                                                                                                               |
|----------------------------------------|-----------------|----------------------|---------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>For Aqueous Solution Phase 水溶液相</b> |                 |                      |                                                               |                                                                                                                                              |
| pH                                     | PH              | dimensionless        | Acidity<br>酸度                                                 | of the aqueous solution phase, 水溶液相的<br>$\text{pH} = -\log_{10}(\text{AC}(\text{H}^+)) =$<br>$-\log_{10}(\text{ACR}(\text{H}^+, \text{AQ}))$ |
| Eh                                     | EH              | V, mV                | Hypothetical electric<br>potential 假想电势                       | of the aqueous solution phase, 水溶液相的<br>$\text{Eh} = u(\text{ZE})/96485.309$                                                                 |
| pe                                     | PE              | dimensionless        | Logarithm of the<br>hypothetical electron<br>activity 假想电势的对数 | of the aqueous solution phase, 水溶液相的<br>$\text{pe} = u(\text{ZE})/(2.3025851 * \text{RT})$                                                   |

|       |        |                      |                                                                   |                                                                                                                                                           |
|-------|--------|----------------------|-------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $A_h$ | AH     | kJ, kcal             | Thermodynamic affinity per electron 每个电子的热力学亲和力                   | of a redox couple wrt the standard hydrogen electrode in the aqueous solution phase, 水溶液相中相对于标准氢电极的氧化还原电对的<br>$A_h = u(ZE)$                               |
| $y_w$ | YH2O   | <i>dimensionless</i> | Mole fraction 摩尔分数                                                | of the solvent H <sub>2</sub> O in the aqueous solution phase, 水溶液相中的溶剂H <sub>2</sub> O的<br>$YH2O = Y(AQ,H2O)$                                            |
| $N_w$ | AH2O   | mole                 | Mole number 摩尔数                                                   | of 1.0 kg of solvent H <sub>2</sub> O,<br>$AH2O = 55.508435$                                                                                              |
|       | NSH2O  |                      | Mole number, 摩尔数<br>NS(AQ,H2O)                                    | of the solvent (H <sub>2</sub> O) in the aqueous solution phase, 水溶液相中溶剂水的<br>$NS(AQ,H2O) = YH2O * NP(AQ)$                                                |
|       | NS#    |                      | Mole number, 摩尔数<br>NS(AQ,sp)                                     | of a solute species in the aqueous solution phase, 水溶液相中溶质物种的<br>$NS(AQ,sp) = Y(AQ,sp) * NP(AQ)$                                                          |
| $m$   | ML#    | mol/kg_H2O           | Molality, 质量摩尔浓度<br>ML(AQ,sp)                                     | of a solute species in the aqueous phase, 水溶液相中溶质物种的<br>$ML(AQ,sp) = Y(AQ,sp) * AH2O / YH2O$                                                              |
| $m^*$ | TIM    | equivalent molality  | Total molality 总的质量摩尔浓度                                           | of all solute species in the aqueous solution phase 水溶液相中所有溶质物种的<br>$TIM = \sum [ML(AQ,sp)]_{ions} + \sum [ML(AQ,sp)]_{complexes}$                        |
| $m_i$ | TIC#   | equivalent molality  | Total ionic 总的离子浓度 concentration, TIC(AQ,sp)                      | of a cation I in the aqueous p solution hase, 水溶液p中的阳离子I<br>$TIC(AQ,spI) = \sum [ML(AQ,spJ) * V(spI-in-spJ)]$                                             |
| $I$   | ISTR   | <i>dimensionless</i> | Ionic strength 离子强度                                               | of the aqueous solution phase, 水溶液相的<br>$ISTR = 1/2 * \sum [ML(AQ,sp) * Z(AQ,sp) ** 2]$                                                                   |
|       | RCH2O  |                      | Activity coefficient, 活度系数<br>RC(H <sub>2</sub> O,AQ)             | of the solvent (H <sub>2</sub> O), 溶剂(H <sub>2</sub> O)的<br>$RC(H2O,AQ) = ACR(H2O,AQ) / YH2O$                                                             |
|       | RC#    |                      | Activity coefficient, 活度系数<br>RC(sp,AQ)                           | of a solute species, 溶质的<br>$RC(sp,AQ) = ACR(sp,AQ) / Y(AQ,sp) * YH2O$                                                                                    |
|       | AIH2O  |                      | Activity, 活度<br>AI(H <sub>2</sub> O,AQ)                           | of the solvent (H <sub>2</sub> O), 溶剂(H <sub>2</sub> O)的<br>$AI(H2O,AQ) = ACR(H2O,AQ)$                                                                    |
|       | AI#    |                      | Activity, 活度<br>AI(sp,AQ)                                         | of a solute species in the aqueous phase, 水溶液相中的溶质物种的<br>$AI(sp,AQ) = ACR(sp,AQ) * AH2O$                                                                  |
|       | LogAI# |                      | Log10 Activity, 活度<br>LogAI(H <sub>2</sub> O,AQ),<br>LogAI(sp,AQ) | of the solvent or a solute species in the aqueous solution phase in common logarithm, 水溶液相中的溶质物种或者溶剂的, 以常用对数表示<br>$LogAI(H2O,AQ) = \log_{10}[AI(H2O,AQ)]$ |



|                                        |      |                                     |                                                |                                                                                                                                                                                                                  |
|----------------------------------------|------|-------------------------------------|------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                        |      |                                     |                                                | $\text{LogAI}(\text{sp,AQ}) = \log_{10}[\text{AI}(\text{sp,AQ})]$                                                                                                                                                |
| $w$                                    | AW   | <i>dimensionless</i>                | Activity 活度                                    | of H <sub>2</sub> O in the aqueous solution phase, 水溶液相中的H <sub>2</sub> O的<br>$\text{AW} = \text{ACR}(\text{H}_2\text{O,AQ})$                                                                                    |
|                                        | OS   | <i>dimensionless</i>                | Osmotic coefficient<br>渗透系数                    | of aqueous solution phase, 水溶液相的<br>$\text{OS} = -55.508435 * \ln \text{AW} / \text{TIM}$                                                                                                                        |
| $At1$                                  | AT1  | $\text{equil\_mol/kg\_H}_2\text{O}$ | Titration alkalinity<br>(definition 1)<br>滴定碱度 | of the aqueous solution phase, 水溶液相的, 通常定义为在甲基橙滴定终点(pH=4.5)时, 碳酸盐和碳酸氢盐的等同质量浓度<br>generally defined as the equivalent molality of carbonate and bicarbonate at the methyl orange endpoint (pH=4.5)                |
| $At2$                                  | AT2  | $\text{equil\_mol/kg\_H}_2\text{O}$ | Titration alkalinity<br>(definition 2)<br>滴定碱度 | of the aqueous solution phase, 水溶液相的, 通常定义为在甲基橙滴定终点(pH=4.5)时, 碳酸盐和碳酸氢盐的等同质量浓度<br>generally defined as the equivalent molality of carbonate and bicarbonate, plus sulfide, at the methyl orange endpoint (pH=4.5) |
| <b>For Gaseous Mixture Phase 气体混合相</b> |      |                                     |                                                |                                                                                                                                                                                                                  |
|                                        | RA#  | <i>dimensionless</i>                | Activity coefficient,<br>RA(sp,GAS)<br>活度系数    | of a gaseous species in the gaseous mixture, 气体混合物中的气体物种<br>$\text{RA}(\text{sp,GAS}) = \text{function}(\text{Y,T,P})$                                                                                           |
| *                                      | RF#  | <i>dimensionless</i>                | Fugacity coefficient,<br>RF(sp,GAS)<br>逸度系数    | of a pure gaseous species under TP, 在一定温度和压强下, 纯气体物种的<br>$\text{RF}(\text{sp,GAS}) = \text{function}(\text{T,P/V})$                                                                                              |
| $f$                                    | FUG# | pa, bar, psi                        | Fugacity,<br>FUG(sp,GAS)<br>逸度                 | of a gaseous species in the mixture, 气体物种的<br>$\text{FUG}(\text{sp,GAS}) = \text{RA}(\text{sp,GAS}) * \text{RF}(\text{sp,GAS}) * \text{Y}(\text{GAS,sp}) * \text{P}$                                             |
| $f_i$                                  | TFUG | pa, bar, psi                        | Total gas fugacity<br>总气体逸度                    | of the gaseous mixture phase, 气体混合相的<br>$\text{TFUG} = \text{sum}[\text{FUG}(\text{sp,GAS})]$                                                                                                                    |

输出表中的第一部分为基本量, 即相状态, 驱动力, 摩尔数, 体系组元的质量和摩尔分数。

第二部分由相成分的详细信息组成: 对应于每个水溶液物种, 有结点分数, 摩尔数, 质量摩尔浓度, 活度和以10为底的对数( $\log_{10}\text{Act}$ )。

这些性质的定义和它们之间的关系如下:

由于AQUEOUS相被当作单亚点阵溶体相来描述, 因此结点分数为每个水溶液物种(即水溶液相中的成分)的摩尔分数。换句话说, 就是下式对于所有的水溶液物种都成立:

$$\text{X}(\text{AQUEOUS,sp}) = \text{Y}(\text{AQUEOUS,sp})$$

作为Thermo-Calc中的一个普通状态变量, 在POLY模块中, 采用在GES模块和TDB数据库运用的吉布斯自由能的关系来计算该变量。

Mole为某个多相平衡中, 每个水溶液物种的摩尔数, 它与结点分数有关。

$$\text{NS}(\text{AQUEOUS,sp}) = \text{Y}(\text{AQUEOUS,sp}) * \text{NP}(\text{AQUEOUS})$$

NP(AQUEOUS)为 交互作用体系中, AQUEOUS相的摩尔数。

Molality 为某个水溶液物种的质量摩尔浓度, 即mol/kg。对于溶剂水来说, 该量的值总是 5.55084E+01, 表明摩尔浓度以每kg水的摩尔数作为参考; 对于水溶液溶质来说(阴离子, 阳离子, 中性分数), 质量摩尔浓度通过下式计算:

$$ML(AQUEOUS,sp)=Y(AQUEOUS,sp)*55.5084/Y(AQUEOUS,H2O)$$

Activity为在特定的参考状态下(过后将进一步描述), 每个水溶液物种的活度。注意: Thermo-Calc 中对组元的活度 (AC 或者ACR), 有一个更一般性的定义, 该定义将组元的参考状态用于体系的所有相中。两者的关系为:

$$AI(H2O,AQUEOUS)=ACR(H2O,AQUEOUS)$$

$$AI(sp,AQUEOUS)=ACR(sp,AQUEOUS)*55.5084$$

log10Act 为以10为底的对数表示的每个水溶液物种的酸度。

$$\log_{10}Act((sp,AQUEOUS)) = \log_{10}(AI(sp,AQUEOUS))$$

注意: 水溶液物种的参考状态和活度的定义。了解不同的参考状态和活度的定义非常重要。与水溶液化学中通常采用的方式一样, 在Thermo-Calc中, 采用以下等式:

对于溶剂(即水溶液体系中的主要组元, H<sub>2</sub>O)来说, 采用Raoult定律, 将参考态设为纯溶剂:

$$\mu_A = \mu_A^0 + RT \ln a_A$$

其中,  $a_A = \gamma_A X_A$ , 当  $X_A \rightarrow 1$  时,  $\gamma_A \rightarrow 1$  (即纯溶剂)

对于溶质(即少数组元)来说, 采用 Henry 定律, 将参考状态设为假想的状态, 其中质量摩尔浓度为1, 但是每个分子的环境与无限稀释的溶液中一样。

$$\mu_B = \mu_B^0 + RT \ln a_B$$

其中,  $a_B = \gamma_B m_B / m^\ominus$ , 当  $m_B \rightarrow 0$ ,  $m^\ominus \stackrel{\text{def}}{=} 1 \text{ mole/kg}$  (即无限稀释溶质) 时,  $\gamma_B \rightarrow 1$

参考Atkins (1982): Physical Chemistry (2<sup>nd</sup> Edition), pp. 243-248 and pp. 314-316, 见更多关于这方面的定义。

(使用这些关系不如定义它们困难)

第三部分给出了整个水溶液的溶体性质的一些附加信息, 如下

溶液性质:

$$pH = 8.8472 \quad Eh = -0.5263 \text{ V} \quad I = 3.0067$$

$$pe = -8.8962 \quad Ah = -50.7796 \text{ kJ} \quad m^* = 6.0143$$

$$Aw = 0.9010 \quad Os = 0.9622$$

$$At1 = 3.9785E-23 \quad At2 = 1.2452E-05 \text{ (equiv—mol/kg—H2O)}$$

这些性质的定义和关系如下:

pH为水溶液的酸度

$$pH = -\log_{10}(AC(H^+)) = -\log_{10}(ACR(H^+, AQUEOUS))$$

Eh为平衡的假想电势

$$Eh = u(ZE)/96485.309$$

Ah 为以标准氢电极作为参考的氧化还原对的每摩尔电子的热力学亲和力和, 即水溶液相中的假想电子的化学势

$$Ah = u(ZE)$$

pe 为假想电子活度的对数

$$pe = u(ZE)/(2.302585*RT)$$

I 为水溶液的离子强度

$$I = 1/2 * \sum (ML(AQUEOUS, sp) * Z(AQUEOUS, sp) ** 2)$$

m\* 为处于平衡状态中的水溶液体系中的所有溶质(包括自由离子和络合物)的总质量摩尔浓度

$$m^* = \sum [ML(AQUEOUS, ions)] + \sum [ML(AQUEOUS, complexes)]$$

Aw 为水溶液的水的活度

$$Aw = ACR(H_2O, AQUEOUS)$$

Os 为水溶液的渗透系数

$$Os = -55.5084/m^* \ln Aw$$

At 为水溶液的滴定碱度, 通常定义为采用甲基橙作为指示剂, 当达到滴定终点时(pH=4.5), 碳酸盐和碳酸氢盐(某些情况下, 加上硫酸盐)的质量摩尔浓度。

$$At1 = m(HCO_3^-) + m(CaHCO_3) + \dots + 2m(CO_3^{2-}) + 2m(CaCO_3) + \dots$$

$$At2 = m(HCO_3^-) + m(CaHCO_3) + \dots + 2m(CO_3^{2-}) + 2m(CaCO_3) + \dots \\ + m(OH^-) + m(CaOH) + \dots + m(HS^-) + 2m(S^{2-}) + \dots$$

## 8.11.5 水溶液相的计算

在Thermo-Calc软件包中, 水溶液的多相平衡计算与其它类型的平衡计算相同。但是, 用户必须在计算中以合理的方式定义平衡状态和参考状态, 主要取决于以下四个方面:

- 水溶液模型的复杂性。
- 水溶液物种的标准和参考状态的特殊选项
- 水和溶质的唯一的定义
- 水溶液浓度的合理定义

当用户在设计中考虑以上四个方面时, 原则上, 可以通过传统的命令行或者在特殊的高级模块中进行计算。

### 8.11.5.1 Command-line calculations

通常, 在计算包含水溶液相的平衡前, 用户必须指定以下内容:

```
DEFINE_COMPONENT H2O, H+, ZE, <others>
```

该命令用于在Thermo-Calc软件体系中, 使水溶液相可以被模型和数据库接受。前三个组元H2O, H+和ZE, 总是水溶液相中必不可少的, 对于基本元素O(氧)和H(氢)以及特别定义的元素ZE(电子), 它们是唯一正确的组元定义。否则, 将不可能建立水溶液相, 以及计算水溶液的活度, 浓度, 酸度(PH)和电势(Eh)。对于交互作用体系的其它元素来说, <others> 组元可以为相应的元素(例如FE, NI, C, S, NA 和 CL)或者其它的有意义的分子式(例如 FECL3, NI2, CO2/CO3-2, H2S, NACL 和 CL- )。

```
SET-CONDITION B(H2O)=1000
```

该命令将水溶液相中的溶剂(水)固定在1kg, 这将方便计算水溶液浓度, 通常以质量摩尔浓度来表示(1kg水中的溶质摩尔数)。当然, 用户可以设定不同的水质量(例如2000g或者100g); 用户也可以以摩尔单位来设定水的量, 例如N(H2O)=55.5084, 或者N(H2O)=111.0168 和 N(H2O)=5.55084。

```
SET-CONDITION T=298.15, P=1E5, <bulk composition for other components>
```

该命令将温度设为室温, 压强设为一个标准大气压, 或者其它不同的值, 并且设定多相交互体系中, 所有其它组元的成分。

SET-REFERENCE-STATRE H2O AQUEOUS \* 10000

该命令将多相交互体系中的组元水的参考状态设为在AQUEOUS 相中，以成分形式存在的H2O，并且参考状态的温度设为当前温度，压强设为1bar。

SET-REFERENCE-STATRE ZE REF\_ELECTRODE \* 10000

该命令将交互作用体系中的特别组元ZE的参考状态设定为REFERENCE\_ELECTRODE相，并且将参考状态的温度设为当前温度，压强设为1bar。

CHANGE-STATUS PHASE REF\_ELECTRODE=SUSPEND

该命令将REFERENCE\_ELECTRODE相的状态设定为suspended。因为，它是一个假想的相，并在交互体系中，总是不稳定。该假想的相用于计算标准电势。

可能需要使用其它的POLY命令详细说明交互作用体系，特别是对于纯固相，固相溶体（见本章中的相关部分）。

### 8.11.5.2 高级模块计算

Thermo-Calc软件中不仅包含了用于多相交互作用体系的水溶液相的计算的所有特殊条件，而且还开发了一些高级和方便的模块，以及加强的选项等。目前，通过所谓的POURBAIX 模块可以计算复杂多相交互作用体系中的pH-Eh 图和许多其它的性质图。在以后的Thermo-Calc版本中，会包括其它的用于计算水溶液体系的高级模块。

通过这些高级模块，用户不需要指定复杂的体系/组元定义和基本的计算条件；取而代之的是，程序会询问用户一些简单的问题，然后自动进行整个计算和后处理进程。

参考章节10.7，见更多关于这些高级模块的详细信息。

## 8.12 计算困难的解决方案

### 8.12.1 第一步

当一个计算收敛失败时，首先检查状态的设定是否合理。这很重要。推荐用户进行下面的检查：

#### 8.12.1.1 检查状态

仅使用温度，压强，组元的总量或者分数作为首次计算中的状态。如果用户使用了活度或者偏吉布斯自由能，那么应该确定它们的值合理(检查参考状态)。注意：W和X分别为质量分数和摩尔分数，而不是百分数！分数的和不应该超过1，如果超过了1，程序不会去检查，它将收敛失败！

注意：如果用户将组元的总数量或者总分数作为状态，那么其中一个组元的数量不应该明确给出，而通过状态N=1 给出(即表示体系是封闭的，组元的总摩尔数为1)。

注意：如果用户仅使用“质量平衡”状态，表明体系是封闭的。

### 8.12.1.2 简化体系

如果用户将相中的某个组元的分数作为状态，那么应该尝试在首次计算中，用总成分来代替该状态(因为该相可能在其某个组元处于此分数时，不稳定，可能会导致奇怪的结果)。如果收敛，并且该相确实稳定，那么用户可以将状态设为相中的某个组元的分数。

### 8.12.1.3 相

某些状态看起来不等同，但是实际上是等同的。例如，将C的活度设为 1 等同于将它的偏自由能设为 0，同时也等同于将石墨的状态设定为FIXED状态，不过后一种不那么明显(所有的状态都要求在当前的温度下，以C的石墨存在形式作为参考态)。

注意：在SGTE溶体和物质模型中，缺省的状态为298k和1bar下的稳定存在形式。如果采用这种参考状态，那么在高于298K的温度时，即使碳与石墨平衡，那么它的活度值总会小于 1。但是，不必要为每个组元都设置一种状态。将碳的数量和活度同时设定为状态是非常合法的。

### 8.12.1.4 零分数

通常，用户不能将“某个组元的分数为 0”设定为状态。当用户没有将元素设定为组元时，在极少见的情况下，用户可以将其设定为状态。用户可以选择另外一种方式，即应该执行命令组CHANGE\_STATUS COMP取消某个组元。但是，命令CHANGE\_STATUS对于元素有效，但是对于组元不会总是有效。

## 8.12.2 第二步

如果用户已经多次检查了状态，那么可以尝试命令组SET\_ALL\_START\_VALUES F。选项F表示“FORCE”，通过该命令，即使某一相稳定，程序也会自动设定初始值。然后，输入C\_E 命令。

如果仍然不成功，那么用户必须提供明确的初始值，然后执行C\_E 命令。对于自动设置初始值的问题，如果用户回答N，那么当T和P没有被设定为状态时，程序将会首先询问T和P的初始值。然后，对于所有输入的相，程序将会询问它们是否应该稳定。

通常，稳定相的初始设置的选择对收敛非常重要。特别是，当某些相不溶解所有的组元时。如果相的初始设定不能包括所有的成分空间，那么计算必定会失败。通常，对于气相和液相，不会出现此问题，因为它们覆盖了整个成分空间，通过假定只有气相或者液相，用户总可以启动迭代循环。

程序也会询问用户成分可能变化的相的主要成分。用户可以作多种回答(当程序询问此问题时，以?表示)，如果回答\*，表示缺省设定主要成分(通常为一个比较好的选择)。

如果回答\$，表示不改变目前的成分，如果回答NONE，程序将会询问每个成分的结点分数。通常，如果没有溶解度间隙，那么相的成分没有稳定相的初始设置重要。如果有溶解度间隙，那么用户必须输入稳定的成分设置以及给出间隙两边的初始成分。

## 8.12.3 第三步

如果以上的措施都失败,那么用户可以只保留一个相,而将其其它的相都取消。该相必须为用户认为其状态应该是DORMANT的相,但是也有例外。如果用户在低温下, 计算某个化学计量比相的平衡, 那么程序可能难以寻找稳定相。在这种情况下, 用户可以取消所有的相, 而只保留气相(假使气相溶解所有的组元), 即使气相可能在最后的平衡中不稳定, 这也是有用的。如果气相溶解所有的组元并且状态都合理, 那么只包含气相的计算一定收敛。当计算收敛时, 用户可以通过命令将相状态恢复到DORMANT:

```
C-S P *S=D
```

```
C-E
```

```
L-ST P
```

\*S表示所有处于SUSPEND状态的相。=D表示它们的状态被设定为DORMANT。执行新的C-E 命令后, 通过命令L-ST P令将会显示出按照驱动力降序顺序排列的相。可能稳定的相的驱动力为负, 将驱动力为最大正值的相的状态设为ENTERED, 数量为1。

```
C-S P <phase>=E 1
```

```
C-E
```

```
L-ST P
```

这次计算也应该收敛。如果不收敛, 那么可能<phase>的数据有问题。新的L-ST P 命令将显示出出现在哪个相具有最高的驱动力。然后, 将这个相的状态设为ENTERED, 继续计算, 并且重复上面的过程, 直到所有的状态为DORMANT的相的驱动力为负值。在每次成功的计算后, 要保存结果。注意: 当用户添加新相时, 可能先前状态设为ENTERED的相可能会变得不稳定(驱动力为负)。然后, 将所有的相的状态设回到ENTERED, 数量为0, 此时, 用户已经计算了第一个平衡。注意: 别忘了保存。

另外一个更麻烦的情况是利用SLAG数据库进行计算。在该数据库中, 气相仅溶解  $O_2$ , 在高氧含量下, SLAG相才能存在, 而在低氧含量下, FE\_LIQUID 相才能存在。因此, 在初始平衡中, SLAG 和 FE\_LIQUID 相都必须都稳定, 并且FE\_LIQUID 相中的FE含量必须高(在这种情况下, 见Thermo-Calc Examples Book中的例10)。

## 8.13 常见问题

### 8.13.1 为什么只能画出半个图?

Answer.: 用户使用了命令SET\_DIAGRAM\_AXIS X X(<element>), 而应该使用DIAGRAM\_AXIS X MOLE\_FRACTION <element>!

解释: 注意: MOLE-FRACTION, MOLE-PERCENT, WEIGHT-FRACTION和WEIGHT-PERCENT的作用方式相同。在本质上, 解释十分简单。当用户希望“连接线在平面中”时, 用户必须在后处理程序中采用MOLE-FRACTION作为轴变量, 以便使程序绘制出连接线两端的成分。绘图变量 MOLE-FRACTION 表示程序绘制出所有稳定相的成分。如果用户采用X(element) 或者W(element),那么用户将会仅绘制出<element>的总成分, 即X(element) 所表达的意思。

如果用户计算某个等浓度线, 那么采用哪种表达方式作为轴变量无关紧要, 因为程序会计算所有的线。仅当平面中有连接线时(在二元或者三元体系中), 才有关系。

用户可以多次尝试。原则上, 用户应该使用在命令MAP后使用MOLE-FRACTION, 在命令STEP后使用X(element)。但是, 在命令STEP后, 用户也可以使用MOLE-FRACTION, 甚至当总成分为常数时也可以使用。另外某些时候, 用户应该在MAP命令后使用X(element)或者X(phase,element), 后一种表达方式可



用于得到沿着单变量线的液相成分！因此用户应该在POST模块中灵活使用轴，尝试各种选择。请记住，MOLE-FRACTION 与 X(\*,element)等价，但是不同于X(element)因为\*表示所有的稳定相。

### 8.13.2 为什么保存后不能画图？

**Answer:** 用户在命令MAP或者STEP后面不能使用命令SAVE，因为这将破坏先前的命令得到的结果。因此，用户应该在命令STEP或者MAP前使用SAVE命令。

自TCCJ版本以来，提供了一个该问题更好的解释，即在MAPPING和STEPPING计算中，结果自动保存在某个文件上，如果之后，用户给出命令SAVE，那么将保存当前的工作空间而破坏先前的结果。

### 8.13.3 为什么 G.T 不完全等同于-S？

**Answer:** 熵S总是在一定的压强和成分下，通过计算得到。而G.T为在当前的状态下通过计算得到。

POLY模块能识别许多状态变量，例如 G, H, S, T, N, MU, AC等。用户可以将它们设定为状态或者通过命令SHOW得到它们的值，如下：

```
SHOW S
```

这将给出整个体系的熵，通过在一定压强和成分下，吉布斯能量对温度求偏导求得。用户可以使用标准化后缀，例如M 表示“每摩尔”，W 表示“每克”。

但是POLY模块也可以生成用户自己定义的由这些状态变量组成的函数，特别是通过使用点“.”来求偏导。因此，用户可以得到熵的负值，如下：

```
SHOW G.T
```

用户仅能使用一个层次的点。因此，G.T.T 不合法，用户应该使用-S.T。

如果G.T与-S不同，这并不奇怪，因为G.T为在当前的状态下，通过计算得到。并且如果用户将活度或者某个相的状态为FIX等设定为状态，那么表示用户没有设定确定的成分。

### 8.13.4 如何得到组元的偏焓？

**Answer:** 用户可以输入一个由状态变量组成的表达式来表示。

用户应该知道，组元的偏吉布斯自由能，表示如下：

```
SHOW MUR(FE)
```

用户也应该知道，偏熵为负号乘以偏吉布斯自由能对温度的导数，即 $Y[S(FE)] = -MUR(FE).T$ 。但是，用户不能使用命令SHOW S(FE)，因为状态变量S仅能用于某个相，因此，S(LIQUID) 为一个合法的状态变量，而S(FE)不是。偏熵(乘以负号)的表达式如下：

```
SHOW MUR(FE).T
```

但是用户希望得到偏焓的表达式。吉布斯自由能，焓和熵之间的关系是 $G = H - TS$ ，该表达式对于偏量同样适用。因此，某个组元的偏焓为 $H(FE) = MUR(FE) + TS(FE)$ 。S(FE)的表达式 在上面已经给出，因此，偏焓的表达式如下：

```
ENTER VARIABLE HFE = MUR(FE)-T*MUR(FE).T;
SHOW HFE
```



注意：用户不能在SHOW后面给出表达式，只能给出某单个变量或者符号。用户应该输入将HFE作为VARIABLE而不是FUNCTION，因为MUR(Fe).T的计算可能会产生某些意外的结果。

### 8.13.5 为什么当 H(LIQUID)为 0 时，而 HM(LIQUID)不为 0？

**Answer:** H依赖数量。而HM为标准化的1mole的焓值。

H的值依赖体系的大小或者相的数量。用户在计算中，设定N=2得到的H值要比在其它条件不变的情况下，设定N=1得到的H值大一倍。当用户希望得到某个特定相的焓值，而不是体系的总焓值时，情况也一样。H(LIQUID)是目前状态下，液相的焓值。如果在该状态下，液相不存在，或者它的数量为0，那么H(LIQUID)为0。但是，如果用户希望得到一个标准化的数量。例如HM，那么该值与当前的数量无关，因为它将数量定义为1摩尔组元。

### 8.13.6 为什么石墨稳定时，计算出的碳的活度小于 1？

**Answer:** 检查参考状态。

某个组元的化学势和活度必须有一个参考状态。在命令LIST\_EQUILIBRIUM中，不同的数据库，缺省的参考状态不同。

在KP和TCFE数据库中，每种元素都以某个相作为参考状态，并且该相的热力学性质都为0。对于碳，它的参考状态为石墨，因此，在任一的温度下，石墨的活度都应该为1。

在SGTE数据库和其它的数据库中，参考状态为298.15 K和1 bar下的某个相。这表明，如果用户不通过命令SET\_REFERENCE\_STATE来重新定义参考状态，那么仅在298.15 K 和1 bar下，活度为1。该命令有四个输入，组元，相，温度和压强。用户也可以在温度的问题上回答“\*”，表明参考状态必须处于当前温度下。例如：

```
SET REFERENCE STATE C GRAPHITE * 1E5
SHOW ACR(C)
```

注意：为了得到相对于用户定义的参考状态的活度值，用户必须在状态变量AC后面添加R。

### 8.13.7 如何得到过剩吉布斯自由能的值？

**Answer:** POLY中无法得到过剩吉布斯自由能，因为它是一个依赖模型的量。

用户可以得到混合吉布斯自由能，对于某个替代溶体模型来说，也一样。为了得到三元体系A-B-C中的混合焓，可以输入如下命令：

```
SET_REFERENCE_STATE A LIQUID * 1E5
SET_REFERENCE_STATE B LIQUID * 1E5
SET_REFERENCE_STATE C LIQUID * 1E5
SHOW HMR(LIQUID)
```

后缀R表示使用用户定义的参考状态。但是如果用户，混合吉布斯自由能不同于过剩吉布斯自由能。

### 8.13.8 What is wrong when I get crossing tie-lines but no miscibility gap?

回答：相交的连接线为溶解度间隙的标志。但是，用户必须提前指定某些相有或者可能有溶解度间隙。用户可以通过在POLY命令SPECIAL\_OPTION (SET\_MISCIBILITY\_GAP)或者GES 命令 AMEND\_PHASE\_DESCRIPTION ( COMPOSITION\_SET )中来为某个相设定两种或者更多的成分设置。然后，用户必须从有溶解度间隙稳定的地方开始计算，并且通过SET\_ALL\_START\_VARIABLES使所有的成分设置稳定但是有不同的初始成分。

### 8.13.9 如何直接计算溶解度间隙的最大值？

**Answer:** Not with Thermo-Calc.

这与计算熔点不同，计算熔点时，可以直接设定两个相的成分相等。

注意：该FAQ文件还没有被更新，但是以后会不定时更新，请及时访问TCS网站 ([www.thermocalc.com](http://www.thermocalc.com))，见修订版。

## 9 后续处理器模块 (POST)

### 9.1 简介

在经过 Thermo-Calc 计算或者 DICTRA 模拟之后，我们通常在被称为 POST 模块的后续处理器中处理所得到的结果。该模块可以用于绘制各种相图，性质图，扩散曲线以及用户期望从 Thermo-Calc 计算或者 DICTRA 模拟中获得的一些其它类型的图形。POST 总是由一个特殊的 POLY 或者 DICTRA 命令来控制而不像进入一个模块的常规途径（即，GOTO<模块名称>），但是有时它可以自动接入，比如通过在 TAB 模块中使用 TABULATE\_REACTION 或 TABULATE\_SUBSTANCE 命令，或者在 POLY 模块中使用 DEFINE\_DIAGRAM 命令，或者通过一些高级模块（如：BIN, TERN, POTENTIAL, SCHEIL 和 POURBAIX）。

有了这一独特的模块，用户就可以很容易地定义多种图表，包括它们的图形类别，轴变量，轴文本，符号，箭头，等等。通常许多图表都可以从单一的 Thermo-Calc 或者 DICTRA 计算生成以表示所计算体系中各种量之间的内在联系。一些特殊的 POLY 或者 DICTRA 命令（如，DEFINE\_DIAGRAM），以及一些易用的高级模块（如，BIN, TERN, POTENTIAL, POURBAIX 和 SCHEIL）在经过 MAP 或者 STEP 计算之后将会自动定义第一个图型。用户可以选择任意的状态变量或任意输入的符号（函数或变量）作为 X/Y 轴。在 POST 模块中，用户可以定义所期望的变量并选择它们作为 X/Y 轴变量，其中，程序会基于 POLY3 或者 DICTRA 工作空间中已存在的计算结果对变量进行评估。自 TCCP 版本以来，程序已经能够创建

vrml (Virtual Reality Modelling Language: 虚拟显示模拟处理) 图形文件以绘制三维图形. TCCR/TCCQ 版本中, Thermo-Calc 图形界面的性能和灵活性经有了很大程度的提高, 可以对图形进行进一步的精修 (详见 9.3.7 部分)。

当绘制好一个图形时, 我们可以指定/使用用于定义/精修高标准图形的各种外观参数/选择, 如, 曲线-标注选项, 相-区域标注, 性质线的标定, 图形标题和副标题, 图形大小, 轴的长度, 轴的类型, 轴刻度的类型, 共轭线的状态, 自动或手动改变图形比例和范围, 相界和相区域的半自动或手动标注, 图形格式, 文本字体, 颜色, 绘图光栅, 符号, 箭头等等。在 POST 模块中, (从步进计算中获得的) 计算结果也可以直接以表格的形式列出(导出为简单的文本文件或 MS Excel 电子数据表文件)。用户可以很容易地将实验数据添加到已绘制的相图或者性质图中。用户还可以将坐标保存到一个文本文件中, 而且该文件可以进行编辑并可用作实验文件并入到另一图形中, 或作为 setup 文件的一部分来进行 PARROT 模块的评估。在已绘制出的图中可以删除或者恢复相。在所得到的图形中也可以对组元的参考态进行修改。

POST 模块中存在以下命令:

POST: ?

|                          |                          |                         |
|--------------------------|--------------------------|-------------------------|
| ADD_LABEL_TEXT           | PLOT_DIAGRAM             | SET_LABEL_CURVE_OPTION  |
| APPEND_EXPERIMENTAL_DATA | PRINT_DIAGRAM            | SET_PLOT_FORMAT         |
| BACK                     | QUICK_EXPERIMENTAL_PLOT  | SET_PLOT_OPTIONS        |
| CREATE_3D_PLOTFILE       | REINITIATE_PLOT_SETTINGS | SET_PLOT_SIZE           |
| DUMP_DIAGRAM             | RESTORE_PHASE_IN_PLOT    | SET_PREFIX_SCALING      |
| ENTER_SYMBOL             | SET_AXIS_LENGTH          | SET_RASTER_STATUS       |
| EXIT                     | SET_AXIS_PLOT_STATUS     | SET_REFERENCE_STATE     |
| FIND_LINE                | SET_AXIS_TEXT_STATUS     | SET_SCALING_STATUS      |
| HELP                     | SET_AXIS_TYPE            | SET_TIC_TYPE            |
| LIST_DATA_TABLE          | SET_COLOR                | SET_TIELINE_STATUS      |
| LIST_PLOT_SETTINGS       | SET_CORNER_TEXT          | SET_TITLE               |
| LIST_SYMBOLS             | SET_DIAGRAM_AXIS         | SET_TRUE_MANUAL_SCALING |
| MAKE_EXPERIMENTAL_DATAFI | SET_DIAGRAM_TYPE         | SUSPEND_PHASE_IN_PLOT   |
| MODIFY_LABEL_TEXT        | SET_FONT                 | TABULATE                |
| PATCH_WORKSPACE          | SET_INTERACTIVE_MODE     |                         |

POST:

注意: DUMP\_DIAGRAM 和 PRINT\_DIAGRAM 只在 PC 机 Windows 环境下才可使用。

### POST 模块用户指导手册修订简史:

- 1989年1月 第一次发行 (Lars Höglund 编著)
- 1993 年10月第二次修订版 (Lars Höglund 编著)
- 1996 年10月 第三次修订版 (Lars Höglund 编著)
- 2000 年6月 第四次修订和扩展版 (Lars Höglund 和 Pingfang Shi 编著)
- 2002 年11月 第五次修订版(Lars Höglund 和 Pingfang Shi 编著)
- 2004 年6月 第六次修订版( Lars Höglund 和 Pingfang Shi 编著)
- 2006 年5月 第七次修订版( Lars Höglund 和 Pingfang Shi 编著)

## 9.2 基本命令

### 9.2.1 HELP（帮助）

**命令描述:** 该命令列出所有可用的命令或者给出某一个指定命令的解释。

**概要 1:** HELP <命令名称>

**概要 2:** HELP

**相继提示:** COMMAND: <命令名称>

**选择:** 命令名称 – 要获取帮助的命令（某一 POST 模块命令）名称。

**注意:** 在不输入任何命令名称时,按<RETURN>键,程序将列出所有可用的 POST 命令。

输入一个唯一的命令,程序将会在屏幕上显示出该命令的解释(通常可以在这本用户指导手册中找到一样的文本)。

输入一个非唯一的命令缩写形式,程序将会列出所有想匹配的命令。通过输入一个唯一的缩写或完整的命令就可获得所需的命令信息。

### 9.2.2 BACK（返回）

**命令描述:** 该命令将切换到最近所使用的模块,从 POST 模块出发, BACK 命令总是将程序返回到 POLY 模块。然而,如果在 POST 模块使用了 TAB 模块, BACK 命令则使程序返回到 TAB 模块。

**提要:** BACK

### 9.2.3 EXIT（退出）

**命令描述:** 该命令终止程序并返回到操作系统。除非之前已执行过一个 SAVE 命令（在 GES, POLY 或者 PARROT 模块中），否则所有数据和结果将会丢失。

**概要:** EXIT

## 9.3 重要命令

### 9.3.1 SET\_DIAGRAM\_AXIS (设置\_图形\_坐标轴)

**命令描述:** 用户可以为图形或列表指定一个轴变量。为了能够绘制图形，我们必须确定至少两个轴变量 (X 和 Y)，在 Thermo-Calc 中，我们可以确定三个轴变量 (X, Y 和 Z) 来绘制图形。

注意：图形中的轴变量可与绘制命令中轴的数目不同。

还请注意另外一个即使是对于经常使用的用户来说也会误解的细节。如果您想在平面上绘制一个具有共轭线的相图，而且成分轴必须是摩尔分数，质量分数或是这些量的其他两种组合，那么即使那就是您在计算相图时使用的变量，您也绝不能使用稳态变量“ $x(c)$ ”，这是因为那样只能给出两相区的一边。其中的原因很难进行解释。但这足以表明摩尔分数与稳态变量“ $x(*,c)$ ”是等同的。

当您在绘制一个 STEP 计算的结果，并且需要一个成分轴变量时，您通常应使用“ $x(c)$ ”，而不是摩尔分数。

当您在平面上绘制一个不含有共轭线的相图时，摩尔分数和“ $x(c)$ ”是等价的。

**提要 1:** SET\_DIAGRAM\_AXIS <axis name> <variable name & specification>

**提要 2:** SET\_DIAGRAM\_AXIS

**相继提示:** Axis (X, Y or Z): <axis name>  
用户必须指明须设定变量的轴 (X, Y 或 Z)。

Variable type: <variable name>  
在这里为所选的轴指定一个变量。

有效变量如下表所示:

---

|                     |                                |
|---------------------|--------------------------------|
| ➤ 基本的状态变量:          |                                |
| TEMPERATURE-CELSIUS | 作为摄氏温度，单位 °C                   |
| TEMPERATURE         | 作为温度，单位 K                      |
| PRESSURE            | 作为压强，单位 Pa                     |
| ACTIVITY            | 对于某一组分                         |
| LNACTIVITY          | 对于某一组分 $[\ln(ACR(\text{组分}))]$ |
| MOLE-FRACTION       | 对于某一组分                         |

## Thermo-Calc 用户指导书

|                 |        |
|-----------------|--------|
| MOLE-PERCENT    | 对于某一组分 |
| WEIGHT-FRACTION | 对于某一组分 |
| WEIGHT-PERCENT  | 对于某一组分 |
| NONE            | 清除坐标轴  |

- 任意有效状态变量包括那些有通配符的变量，如 X (\*, 组分)。当使用通配符时，程序将询问该变量的列的数量。
- 任意输入的函数或变量。
- 任意输入的列表。在这种情况下，程序会询问列表中的某一列或列的范围。

---

For component: <component name>

当将要绘制某一组分的活度，摩尔，质量分数或百分数时，此时必须提供该组分的名称。

Column number: <column number(s)>

指定所选定的表格中列的数目，其中这些被选表格的数据将要绘制在之前已定义好的坐标轴上。

例子:

|         |                 |
|---------|-----------------|
| 1       | 第一列             |
| 2, 3    | 第二和第三列          |
| 2, 3 >5 | 第二，三列和所有第五列以上的列 |
| *       | 所有列             |

注意：轴的数目必须和列的数目完全一致，或者一个轴必须仅有一列。在第一种情况下，列中数据对应轴一对一的进行绘制，而在后一种情况下，某一轴中所有列都将对应单独的一列绘制在一个坐标轴上。例如，用户可以使图中某一轴代表温度，而另一轴代表每一相的数量。每一相的数量以摩尔分数形式表示的状态变量是 NP(\*) 而以质量分数形式表示的则是 BPW(\*)。

### 特别提示:

Automatic diagram axis:

POST 模块可以自动设定坐标轴，这和 MAP 命令中所使用的命令完全相同。这简化了 Thermo-Calc 和 DICTRA 的使用。但此选项在 Thermo-Calc 中不能可视化使用，这是因为用户可能认为他们不能设定除计算中使用的变量以外的其他变量。在计算之后，用户可以设定任意一组状态变量作为图形的坐标轴这一功能，是 Thermo-Calc 最强大功能的特征之一。

然而，自 TCCM 版本以来，该命令已被添加到 Thermo-Calc 软件中。在 MAP 计算之后，用户无须指明这一选项。在这种情况下，Thermo-Calc 初学者就可以避免理解  $x(z)$ ,  $x(*, z)$  和摩尔分数之间的区别这样的棘手问题了。

如果状态变量 X (Z) 已在 MAP 中使用, 那么 Z 组分的摩尔分数将会被用作图形的坐标轴; 假如势能或者其他一些状态变量已使用, 那么他们将会被用作图形的坐标轴.

注意: 在 STEP 计算之后, 程序不会设定自动图形的坐标轴, 因为计算中只存在一个坐标轴.

### 9.3.2 SET\_DIAGRAM\_TYPE (设置\_图形\_类型)

**命令描述:** 通过这一命令, 用户可以选择图形的类型是直角坐标图还是三角坐标图 (吉布斯三角形, 尤其是三元体系), 默认图形类型是直角坐标.

对于三元或伪三元体系的相图, 用户通常须将等温截面绘成三角图, 如果需要的话, 所有超出连接 X 和 Y 轴端点的连接线所围成的区域外的线条将被截掉.

注意: 为了生成一个 3D-图形文件 (以 VRML 格式, \*.WRL) 以进行四面体图形输出, 该命令在命令序列 SET\_DIAGRAM\_TYPE N Y 中应先被使用. 想进一步了解, 参见 9.7 部分.

**提要:** SET\_DIAGRAM\_TYPE

**相继提示:** TRIANGULAR DIAGRAM (Y or N) /N/: <Y or N>

通过回答 Y(是), 用户可以指明输出图形的类型为三角坐标图. 否则(通过按 <RETURN>键接受 N), 程序会设定直角坐标, 而且该命令终止. 默认状态下, 这样的直角坐标的两坐标轴(几乎)拥有相同的比例(尺寸),

CREATE TETRAHEDRON WRML FILE (Y OR N) /N/: <Y or N>

如果(上一步提示下)没有选择三角坐标图, 用户此时应当回答 Y 以免随后使用 CREATE\_3D\_PLOTFILE 命令来使四面体图形生成 VRML(\*.WRL) 文件.

PLOT 3:RD AXIS (Y or N) /N/: <Y or N>

如果选择了三角坐标图, 用户可以确定是否须绘制连接 X, Y 轴接点的第 3 个轴.

CLIP ALONG 3:RD AXIS (Y or N) /N/: <Y or N>

如果用户选择了三角坐标图, 在此提示下, 通过回答 Y (是), 程序将清除所有超出连接 X, Y 轴接点的连接线所围成的区域外的线条.

### 9.3.3 SET\_LABEL\_CURVE\_OPTION (设置\_曲线\_标签\_选项)



**命令描述:** 该命令通过对曲线进行数字标注而后在图形旁边的这些数字所代表的含义来实现对后续处理器中所绘曲线的定义。注意：在有些情况下,数字的数目可能相当的大。如果这样的话,使用 SET\_FONT 命令降低字体的大小.通常情况下,0.2 已经足够了。自 TCCP 版本以来,程序提供了另外两个选项,E 和 F(用于彩色标注)。

**提要 1:** SET\_LABEL\_CURVE\_OPTION <curve option>

**提要 2:** SET\_LABEL\_CURVE\_OPTION

**相继提示:** CURVE LABEL OPTION (A, B, C, D, E, F OR N) /A/: <option>

---

THE OPTIONS MEANS:

|   |                                                       |
|---|-------------------------------------------------------|
| A | LIST STABLE PHASES ALONG LINE                         |
| B | AS A BUT CURVES WITH SAME FIX PHASE HAVE SAME NUMBER  |
| C | LIST AXIS QUANTITIES                                  |
| D | AS C BUT CURVES WITH SAME QUANTITIES HAVE SAME NUMBER |
| E | AS B WITH CHANGING COLORS                             |
| F | AS D WITH CHANGING COLORS                             |
| N | NO LABELS                                             |

---

这个问题是非常隐讳的,但通常选项 B 或 E 比较适用于相图 (经过 MAP 命令后),并且 D 或 F 比较适用于性质图 (经过 STEP 命令之后)。感兴趣的用户可以自行试用选项 A 和 C。注意：选项 B 或 E 会沿着每条曲线列出固定相,而选项 D 或 F 会沿着每条曲线给出轴变量。选项 E 或 F 为不同的曲线提供不同的颜色,选项 N (无)则消除所有的曲线标注和列表。

比如,当用户在 STEP 命令中使用 T 作为轴变量,然后相对 X 轴的温度变量 (摄氏度) 在 Y 轴绘制出各相的数量(通过使用 SET\_DIAGRAM\_AXIS Y NP(\*)命令),那么其列表可能像如下行所示:

```
1: T-273.15, NP(LIQUID)
2: T-273.15, NP(FCC_A1)
```

这意味着曲线 1 对应的 X 轴温度为 T-273.15 (当然对于所有曲线都是这样) 对应的 Y 轴为 NP (液相)。曲线 2 与曲线 1 具有相同的 X 轴,但是曲线 2 对应的 Y 轴为 NP (FCC\_A1 相)

### 9.3.4 ADD\_LABEL\_TEXT (添加\_标签\_文本)

**命令描述:** 通过这一命令用户可在相图或性质图中的某一区域添加文本。标注的书写将从一个特定的坐标点开始。用户还可以随意地让程序自动添加文本,即程序首先计算在特定坐标点的平衡态,然后标出稳定相的名称。请注意:这种自动标

注相区域的随意地计算在某些情况下可能失败。程序不能对某些轴变量自动添加标注,比如熵,焓,pH 值,Eh,等等。

标注是可以改变的,而且当轴变量随后发生改变时,标注就会消失。

自 TCCQ 版本以来,标注的文本内容及其坐标,无论是使用该命令添加还是通过 MODIFY\_LABEL\_TEXT 修改或者是在 *Thermo-Calc - Graph* 窗口进行手动编辑,都保存在工作空间中,而且他们之后都可以保存到一个 EXP 文件中(通过 MAKE\_EXPERIMENTAL\_DATAFILE 命令实现)。

提要: ADD\_LABEL\_TEXT

相继提示: Give X coordinate in axis units: <value of the X coordinate>  
确定 X 的坐标值, 标注将从该坐标开始。

Give Y coordinate in axis units: <value of the X coordinate>  
确定 Y 的坐标值, 标注将从该坐标开始。

Automatic phase labels? /Y/: <Y or N>

如果此问题的答案是 Y,程序将自动计算在给定坐标处的平衡,并用稳定相的名称生成一个标注。但是自动计算工序只适用在 POLY 模块中已绘制出的双轴的相图,而且常常失败,尤其是对于那些复杂的异类交互体系;在这些情况下,屏幕上将会出现一条提示信息。

Text: <text for the label>

如果对上一个问题的答案是 N,用户将自行确定标注文本内容。

Text size: /.44/: <size for the label>

为了保证能够将标注文本嵌入图形中,程序可能需要一个更小尺寸的文本。默认文本尺寸大小是与程序中最近的一次添加文本的尺寸一致的,而如果使第一次使用该命令时其大小则为 0.44。

### 9.3.5 MODIFY\_LABEL\_TEXT (修改\_标签\_文本)

命令描述: 该命令可将由 ADD\_LABEL\_TEXT 命令生成的标注由原始位置移动到另一位置,或者用另外一个文本替换其文本内容。

自 TCCQ 版本以来,标注的文本内容及其坐标,无论是使用 ADD\_LABEL\_TEXT command 添加还是通过该命令修改或者是在 *Thermo-Calc - Graph* 窗口进行手动编辑,都保存在工作空间中,而且他们之后都可以保存到一个 EXP 文件中(通过 MAKE\_EXPERIMENTAL\_DATAFILE 命令实现)。

**提要:** `MODIFY_LABEL_TEXT`

**相继提示:** `Which label to modify? /#/: <number of the label>`  
 在该提示之前,所有由 `ADD_LABEL_TEXT` 命令生成的标注都将用一个识别号码罗列出来。请指明你想要修改的标注号码。默认对象( # )为最后添加的标注。

`New X coordinate: /xxx/: <new X position>`  
 确定新的 X 坐标。以前的 X 坐标会在屏幕上显示,并且可以通过按 `<RETUEN>` 键来接受。

`New Y coordinate: /yyy/: <new Y position>`  
 确定新的 Y 坐标。以前的 Y 坐标会在屏幕上显示,并且可以通过按 `<RETUEN>` 键来接受。

`New text /ABCDEFGH.../: <new labeling text>`  
 确定(输入)新的标注内容。以前的的文本内容会在屏幕上显示,并且可以通过按 `<RETUEN>` 键来接受。注意,新的标注文本长度不能超过之前文本的长度。

### 9.3.6 SET\_PLOT\_FORMAT (设置\_绘图\_格式)

**命令描述:** 通过此命令,用户可以根据不同的图形设备来设置图形输出格式。其默认设备通常是屏幕输出(反向记忆)。如,对于 UNIX 和 PC Linux 来说, X-Window 被编为 9 号,而对于 PC Windows 来说, MS-Windows 被编为 1 号。默认设备的值可以通过监视器中的 `SET_PLOT_ENVIRONMENT` 命令或者您的 `TC.INI` 文件来更换。

自 TCCR 版本以来,在 PC Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下,程序提供了一个图形格式(其对应的设备值为 19),即: EMF 格式(Enhanced Windows Metafile: 增强 Windows 图元文件)。按该格式绘制的图形(即:保存为默认扩展名为 EMF 的图形文件)可通过一个合适的图形编辑器(如 MS PowerPoint 编辑器)来编辑和操作。

**提要:** `SET_PLOT_FORMAT`

**相继提示:** `GRAPHIC DEVICE NUMBER /#/: <number of the device>`  
 确定图形设备代码。由于硬件的不同,程序可能提供不同的图形格式(图形设备),通过输入问号,这些格式将会,如下所示罗列出来。

## Thermo-Calc 用户指导书

对于 UNIX 和 Linux 操作系统 (注意: 这里没有显示最后一列; 这里给出的仅仅作为用户的参考, 以表明当一个图形文件被后续 PLOT\_DIAGRAM 命令保存时的默认文件扩展名):

---

GRAPHIC DEVICE NUMBER /9/: ?

AVAILABLE GRAPHIC DEVICES:

|                                                      |     |
|------------------------------------------------------|-----|
| DEVICE 1 is Tektronix 4010                           | p1  |
| DEVICE 2 is VT240/Kermit Tek.4010 emulation          | p2  |
| DEVICE 3 is COMPIS Tek.4010 emulation                | p3  |
| DEVICE 4 is Regis graphics                           | p4  |
| DEVICE 5 is Postscript portrait mode                 | ps  |
| DEVICE 6 is Postscript landscape mode                | ps  |
| DEVICE 7 is HPGL plotter (HP7475 landscape A4)       | p7  |
| DEVICE 8 is HPGL plotter (HP7475 portrait A4)        | p8  |
| DEVICE 9 is X-Windows                                | p9  |
| DEVICE 10 is Tandberg 2200/9S, Tek.4010              | p10 |
| DEVICE 11 is HP-LaserJet II / HP-DeskJet (1Mb)       | p11 |
| DEVICE 12 is Tektronix 4105                          | p12 |
| DEVICE 13 is Tektronix 4107                          | p13 |
| DEVICE 14 is HP-LaserJet III & IV, portrait (2Mb)    | p14 |
| DEVICE 15 is HP-LaserJet III & IV, landscape (2Mb)   | p15 |
| DEVICE 16 is Color Postscript portrait mode          | p16 |
| DEVICE 17 is Color Postscript landscape mode         | p17 |
| DEVICE 18 is HP-LaserJet II / HP-DeskJet (1Mb) large | p18 |

---

对于 PC Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 操作系统 (注意: 这里没有显示最后一列; 这里给出的仅仅作为用户的参考, 以表明当一个图形文件被后续 PLOT\_DIAGRAM 命令保存时的默认文件扩展名):

---

GRAPHIC DEVICE NUMBER /1/: ?

AVAILABLE GRAPHIC DEVICES:

|                                                |    |
|------------------------------------------------|----|
| DEVICE 1 is MS-Windows                         | P1 |
| DEVICE 2 is VT240/Kermit Tek.4010 emulation    | P2 |
| DEVICE 3 is COMPIS Tek.4010 emulation          | P3 |
| DEVICE 4 is Regis graphics                     | P4 |
| DEVICE 5 is Postscript portrait mode           | ps |
| DEVICE 6 is Postscript landscape mode          | ps |
| DEVICE 7 is HPGL plotter (HP7475 landscape A4) | P7 |
| DEVICE 8 is HPGL plotter (HP7475 portrait A4)  | P8 |
| DEVICE 9 is Tektronix 4010                     | P9 |

|                                                      |     |
|------------------------------------------------------|-----|
| DEVICE 10 is Tandberg 2200/9S, Tek.4010              | P10 |
| DEVICE 11 is HP-LaserJet II / HP-DeskJet (1Mb)       | P11 |
| DEVICE 12 is Tektronix 4105                          | P12 |
| DEVICE 13 is Tektronix 4107                          | P13 |
| DEVICE 14 is HP-LaserJet III & IV, portrait (2Mb)    | P14 |
| DEVICE 15 is HP-LaserJet III & IV, landscape (2Mb)   | P15 |
| DEVICE 16 is Color Postscript portrait mode          | P16 |
| DEVICE 17 is Color Postscript landscape mode         | P17 |
| DEVICE 18 is HP-LaserJet II / HP-DeskJet (1Mb) large | P18 |
| DEVICE 19 is EMF                                     | EMF |

---

对于有些格式（如： PostScript, HP-LaserJet）来说，可能会有附加的次级提示来询问是否要为所选的格式使用程序中的提供的字体；如果是的话，将会进行进一步的确定，如字体的类型和大小。

自 TCCR 版本以来,程序提供 19 号图形编辑器(如 EMF(增强 Windows 图元文件)格式)可供使用,但它只能在 .PC Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下运行。 按该格式绘制的图形(即： 保存为默认扩展名为 EMF 的图形文件)可通过一个合适的图形编辑器(如 MS PowerPoint 编辑器)来编辑和操作。

USE HARD COPY FONTS /YES/: <Y or N>

在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下,如果已启用了—个非屏幕格式(如： 使用 PostScript 字形对以前任意图形实现硬拷贝),并且如果是 MS-Windows 格式(装置默认值为 1),它将提示用户作出是否使用硬拷贝来实现各种文本在屏幕上绘制输出的决定.请注意： 某些硬拷贝字型可能会在后续的图形绘制中看起来很奇怪。

USE POSTSCRIPT FONTS /YES/: <Y or N>

如果已使用—个非屏幕格式,它将提示用户决定是否要在硬件拷贝的输出图形中使用 PostScript 字型。 屏幕上将会出现进一步的提示以选择字体码和大小。

SELECT FONTNUMBER /9/: <font number>

指定—个有效的字形码， 或者通过给出问号,程序将会在屏幕上列出与指定设备相对应的所有可用的字体。

注意： 对于不同的图形格式,系统提供的字体通常是不同。 例如,以下列出的字体对于 PostScript 格式(设备 5 或 6)是有效的:

---

```
USE POSTSCRIPT FONTS /YES/: y
SELECT FONTNUMBER /9/: ?
```

AVAILABLE FONTS:

## Thermo-Calc 用户指导书

FONT 1 IS AvantGarde-Book  
FONT 2 IS AvantGarde-BookOblique  
FONT 3 IS AvantGarde-Demi  
FONT 4 IS AvantGarde-DemiOblique  
FONT 5 IS Courier  
FONT 6 IS Courier-Oblique  
FONT 7 IS Courier-Bold  
FONT 8 IS Courier-BoldOblique  
FONT 9 IS Helvetica  
FONT 10 IS Helvetica-Oblique  
FONT 11 IS Helvetica-Bold  
FONT 12 IS Helvetica-BoldOblique  
FONT 13 IS LubalinGraph-Book  
FONT 14 IS LubalinGraph-BookOblique  
FONT 15 IS LubalinGraph-Demi  
FONT 16 IS LubalinGraph-DemiOblique  
FONT 17 IS NewCenturySchlbk-Roman  
FONT 18 IS NewCenturySchlbk-Italic  
FONT 19 IS NewCenturySchlbk-Bold  
FONT 20 IS NewCenturySchlbk-BoldItalic  
FONT 21 IS Souvenir-Light  
FONT 22 IS Souvenir-LightItalic  
FONT 23 IS Souvenir-Demi  
FONT 24 IS Souvenir-DemiItalic  
FONT 25 IS Times-Roman  
FONT 26 IS Times-Italic  
FONT 27 IS Times-Bold  
FONT 28 IS Times-BoldItalic  
FONT 29 IS Symbol  
FONT 30 IS Helvetica-Narrow  
FONT 31 IS Helvetica-Narrow-Bold  
FONT 32 IS Helvetica-Narrow-Oblique  
FONT 33 IS Helvetica-Narrow-BoldOblique  
FONT 34 IS Bookman-Demi  
FONT 35 IS Bookman-DemiItalic  
FONT 36 IS Bookman-Light  
FONT 37 IS Bookman-LightItalic  
FONT 38 IS Palatino-Roman  
FONT 39 IS Palatino-Bold  
FONT 40 IS Palatino-Italic  
FONT 41 IS Palatino-BoldItalic  
FONT 42 IS ZapfChancery-MediumItalic  
FONT 43 IS ZapfDingbats

---

FONT SIZE /.35833/: <font size>  
确定所指定字体的相对大小。

例子:

```
SET_PLOT_FORMAT
CURRENT DEVICE: X-windows
GRAPHIC DEVICE NUMBER /9/: 5
NEW DEVICE: Postscript portrait mode
USE POSTSCRIPT FONTS /YES/: y
SELECT FONTNUMBER /9/: 27
NEW FONT: Times-Bold
FONT SIZE /.35833/: 0.32
```

### 9.3.7 PLOT\_DIAGRAM (绘图)

**命令描述:** 图形信息将会在通过 SET\_PLOT\_FORMAT 命令设定的指定图形设备上显示输出。注意：图表的轴变量必须首先设定。

自 TCCN 版本以来，此命令的功能被分割成两部分：

- 其中一部分保留在 PLOT\_DIAGRAM 命令中用于正常的屏幕显示和文件保存；而
- 另外一部分被添加到 PRINT\_DIAGRAM 命令中(在 PC Windows 环境下)用于直接的硬件-拷贝打印。(参见 9.3.7 部分)

因此,通过该命令,图形可以在屏幕上显示(如果使用默认图形设备),或保存到目标文件中。但是,当图形在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下在屏幕上绘制输出时,用户可以连接打印机直接打印输出,并将图形保存为 EMF 文件,且该文件可以很容易地插入到文档中(如下所述)。

**提要 1:** PLOT\_DIAGRAM <name of a file or RETURN for SCREEN>

**提要 2:** PLOT\_DIAGRAM

**相继提示:** OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/: <name of a file or RETURN>  
确定目标文件的名称,(注意: 在 Linux/UNIX 环境下,该提示由 "PLOTFILE /SCREEN/:" 代替)。因此,一个对应所选图形格式(之前已通过 SET\_PLOT\_FORMAT 命令进行设定)具有合适扩展名的文件将会保存在当前工作路径下。假如文件名没有给出扩展名,程序会自动赋给文件默认扩展名(如在第 9.3.5 部分中给出的列表所示: 比如,对于 Postscript portrait/landscape 模式来说为"ps",对于 HPGL landscape 来说为"p7"或"p7",对于 HPGL portrait 来说为"p8" 或"p8",等等)。



如果默认装置已经(通过 SET\_PLOT\_FORMAT 命令)设定,用户可以通过按 <RETURN>键接受 /SCREEN/ 将图形绘制在屏幕上, 或者通过给定文件名将它保存到一个文件中. 如果文件名中没有扩展名, 系统将自动给出默认文件扩展名 (即: 对于 Windows 中的 MS- Windows 为“P1”, 对于 UNIX/Linux 中的 X- Windows 为“p9”).

### 9.3.8 Thermo-Calc 图形窗口

**这不是一个 POST 命令; 设置这个特殊部分的目的就是为了强调在 POST 模块中在运行 PLOT\_DIAGRAM 命令后自动在屏幕上打开的 Thermo-Calc 图象窗口的各种特征。**

重要提示: 对于 TCC 软件的 PC Windows NT/2000/XP and Windows 95/98/ME 版本, 程序中有一个附加的且十分有用的功能用来帮助用户把计算过的 Thermo-Calc 图象导出到硬拷贝的打印机或文档中。如果已经选择用默认的图格式来绘制相图, (即: 与在 SET\_PLOT\_FORMAT 命令中一样, 或者 SET\_PLOT\_FORMAT 命令根本就没有使用, 通过按<RETURN>来为 IBM-vga 选 1.), 屏幕上将会在弹出一个 *Thermo-Calc - graph* 窗口。 在窗口的左上角, 三个交互栏 (“Menu”, “Settings” 和 “Layers”) 和一些功能按钮可以通过点击来启动或关闭(如 图 9.1 阐述)。

自 TCCP 起, 我们可以在 *Thermo- Calc* 图形窗口中已绘制的图形上直接添加, 编辑或删除各种曲线-标记文本, 相-区域-标记文本, 相-识别文本, 相图标题, 副标题, 特别注释, 轴-变量文本, 符号, 箭头或其它任意类型(如图 9.2 至 9.7 所示)。 通过在所绘相图上移动鼠标光标, 光标当前所处的 X-/Y-坐标 (按照当前绘制的 X-/Y-轴变量) 会立即显示在 *Thermo-Calc* 图形窗口的左下角, 这对决定在所绘相图的何处添加标记文本或符号非常有用。通过编辑这些文本、符号和箭头, 它们的大小, 字体, 颜色, 类型, 坐标, 旋转角, 等等, 可以很容易地被改变或从所绘的图形上删除。手动添加的文本、符号或箭头也可以出现在随后绘制的图形中。

自 TCCQ 起, 在 *Thermo- Calc* 图形窗口中通过 ADD\_LABEL\_TEXT 命令添加, 或通过 MODIFY\_LABEL\_TEXT 命令修改, 或通过手动编辑的标记文本及其坐标, 都保存在工作空间里, 且随后(通过 MAKE\_EXPERIMENTAL\_DATAFILE 命令)保存在一个 EXP 文件中。此外, 从 TCCQ 起, 在 *Thermo-Calc* 图形窗口中, 各种各样的曲线/区域标记文本/符号, 相图识别文本/符号和轴-变量文本/符号可以手动移动, 直接编辑及简单地删除。

自 TCCR 起, 在 *Thermo-Calc* 图形窗口下, 通过在所绘相图上简单地移动鼠标, 我们可以很容易地识别各种各样标准的特性曲线(在一个经步进 计算后的特性相图上) 或稳定相区域(在一个经绘制计算后的相图上), 如图 9.9 和 9.10 所示。 我们还可以通过在某个相区域移动鼠标然后右击鼠标, 再选择“Add Label”选项直接自动地将状态-相组合写到所绘相图上, 如图 9.11 所示。 而且, 使用鼠标右键, 用户还可以在所绘图形上添加任何文本, 将相图通过相连接

打印机进行打印，将相图作为一个 EMF 图像文件保存，或将图形的 EMF 格式拷贝到剪贴板(如图 9.8 所示)。

自 TCCR 起,在 PC Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下,一个图像文件可以[在用 SET\_PLOT\_FORMAT 命令定义了绘图-格式为 19 (对于 EMF) 之后]以 EMF 格式绘制; 记住: 我们必须为文件名定义正确的扩展名, 如 MyGraph3.EMF. 这样一个 EMF 文件可通过使用合适的图形编辑器(如用 MS PowerPoint)来进行编辑或处理。

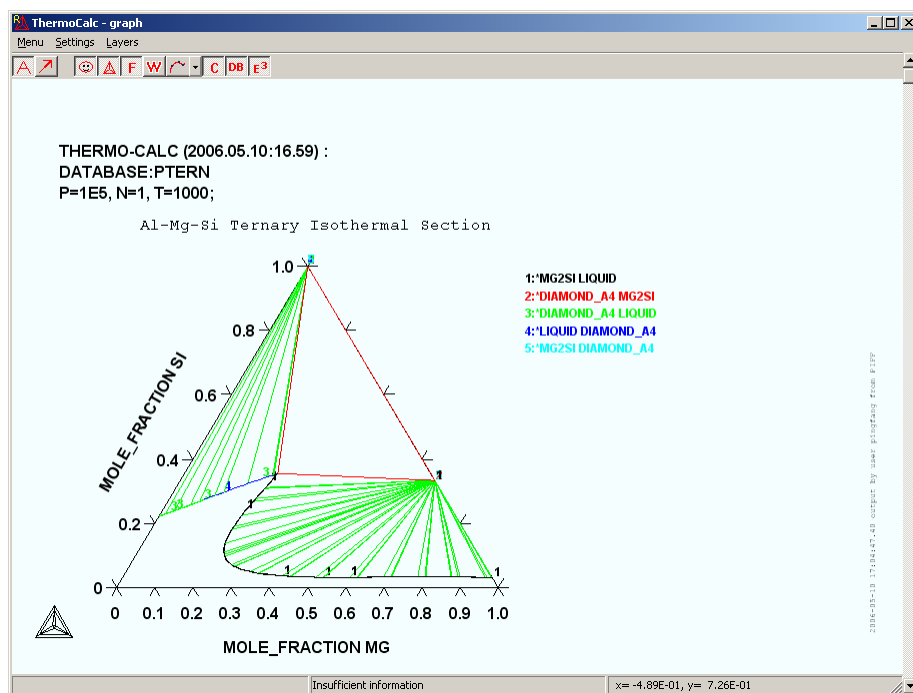
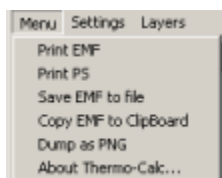


图 9.1. “Thermo-Calc - graph”窗口: 绘图输出选项.

从 **Menu (菜单)** 工具 栏, 用户可以选择下列四个选项中的一个:



➤ Print EMF

直接在相连打印机上(按 EMF 格式/性质)打印图形

➤ Print PS

直接在相连打印机上(按 PostScript 格式/性质)打印图形

➤ Save EMF to file

在“**Save Metafile As**”窗口中将 EMF (增强 Windows 图元文件)格式将图像保存到目标文件中, (如 图9.2 所示), 随后, 它可以在通过使用一些编辑应用软件 (如, Microsoft Word, PowerPoint, Excel, CorelDraw, Adobe Illustrator, 等等)作为一个 Picture File 插入到任何一个文档中。

➤ Copy EMF to Clipboard

将 EMF 格式图像复制到 Windows 剪贴板上, 之后, 它可以通过一些编辑应用软件粘贴到任何文档中。

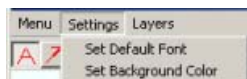
➤ Dump as PNG

在“**Save As**”窗口中将 PNG 图象代码导入到 PNG 目标文件中。这个选项实际上是 DUMP\_DIAGRAM 命令的快捷方式; 详情请看 DUMP\_DIAGRAM 命令。

➤ About Thermo-Calc Graph

查看“*Thermo-Calc Graph*”窗口的描述。

从 **Settings**（设定）工具栏,你可以选择下列两个选项中的一个:



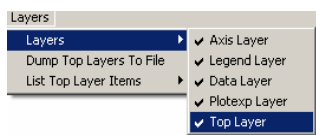
➤ Set Default Font

整体改变相图上的所有文本的字体，通过在“Font”窗口中选择您想要的那一项。(如图 9.3 所示)

➤ Set Background Color

通过在“Color”窗口中指定您想要的颜色来添加/精修所绘图形的背景色，(如图 9.4 所示).

从 **Layers**（图层）工具栏,你可以选择下列三个选项中的一个及其子选项



➤ Layers

决定要在图形上绘制哪一层 (axis (轴), legend (图例), data (数据), plotexp (绘制实验数据) 以及/或者 top layers (顶层))

➤ Dump Top Layer to File

选择将所绘图形的 top layer 导出到一个文件上。

➤ List Top Layer Items

列出顶层 (top layer) 的所有条目

各种功能按钮可以通过点击打开或关闭，如下所述：



**Add/Edit Text Items:** 可手动和直接添加和编辑用户定义的标记/识别文本(它们的显示设定将会在“Add Text to Diagram”窗口中进一步定义，如 图 9.5 所示).



**Add Arrow Items:** 可手动和直接添加用户定义的指示箭头。为编辑一个添加箭头的显示设定，您可以先选定按钮，然后点击该箭头以打开“Edit Arrow”窗口 (如 图 9.6 所示) 以便进一步修改和调整.



**Plot Header:** 打开或关闭标题绘制。



**Plot Logo:** 打开或关闭 Thermo-Calc 标识绘制.



**Plot Footer:** 打开或关闭页脚绘制.



**Write Contoured PS Text:** 打开或关闭 PostScript 文本的写入.



**Plot Symbols at Node Points:** 打开或关闭结点符号的绘制。



**Set Symbol Number & Size:** 为在“Set Symbol Number and Size”窗口中设定在结点处所绘符号的数目/类型和大小 (如 图9.7 所示)。

**Condition Texts:** 打开或关闭条件绘制。



**Database Name:** 打开或关闭数据库名称绘制。



**Remote Exponent:** 打开或关闭远程指数绘制。

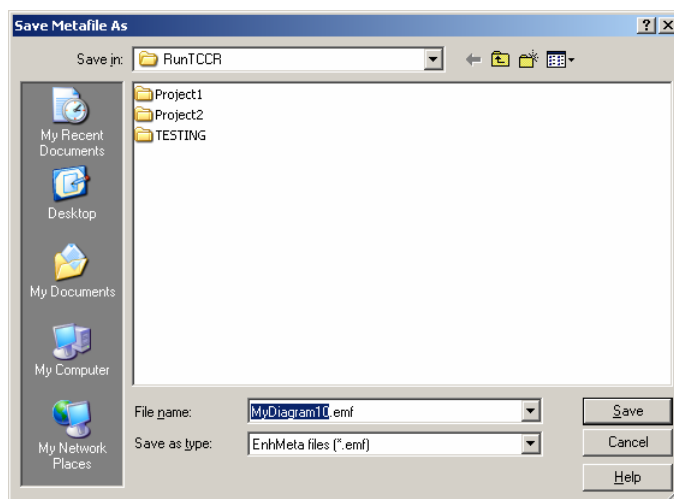


图 9.2. “Save Metafile As”窗口:将所绘图形作为一个 EMF 文件保存。

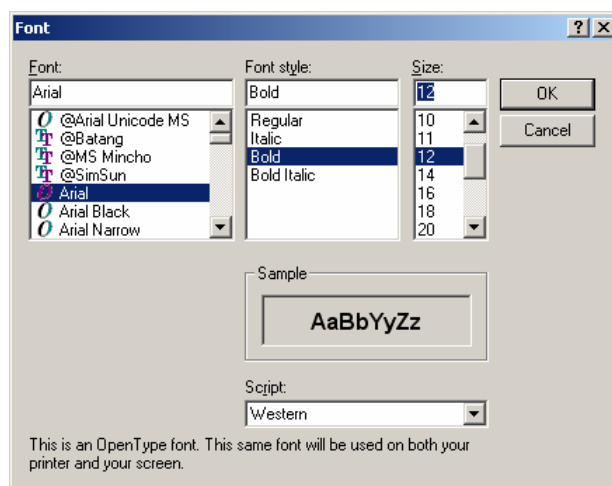


图 9.3. “Font” 窗口: 整体改变所绘图形的字体。

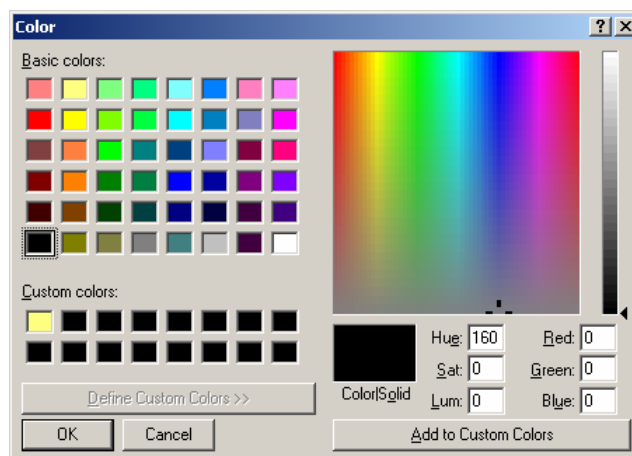


图 9.4. “Color” 窗口: 为背景或其他目的调整颜色。

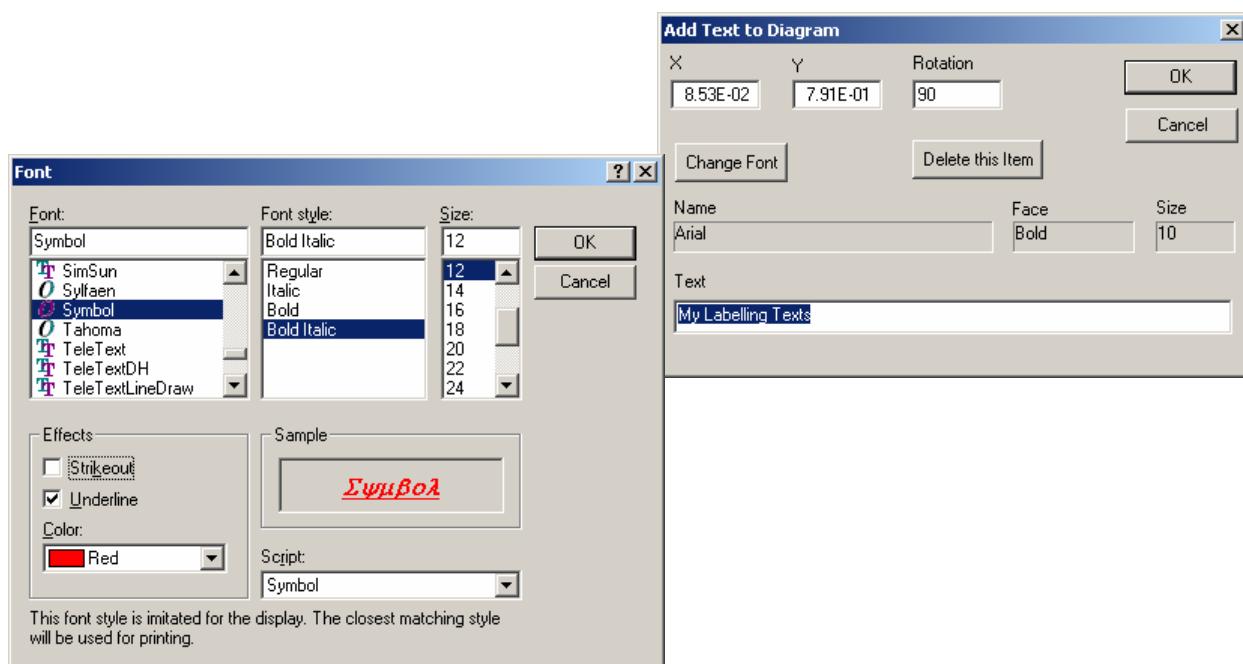


图 9.5. “Add Text to Diagram”窗口和它的子窗口“Font”：容易且灵活地编辑所需的标记/识别文本。

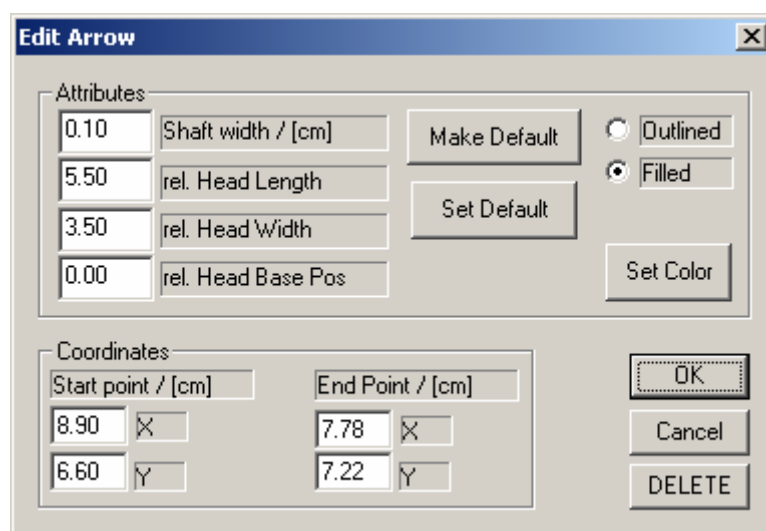
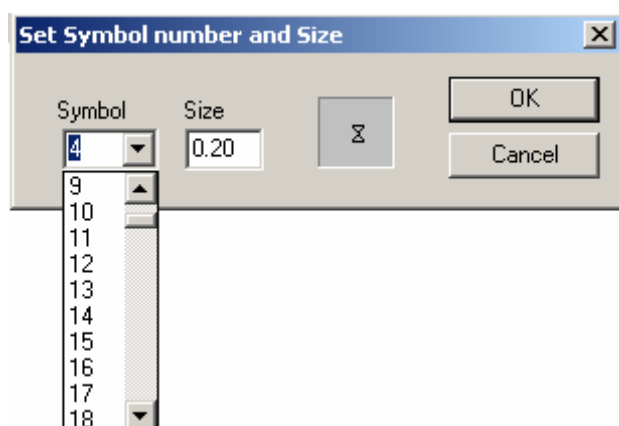


图 9.6. “Edit Arrow” 窗口：编辑箭头显示(如要改变颜色，程序会打开一个如图 9-4 所示的“Color”子窗口)。





**图 9.7. “Set Symbol Number and Size”窗口：选择要在图形上绘制的符号及其大小(一旦大小确定，它的形状也就确定了)。**

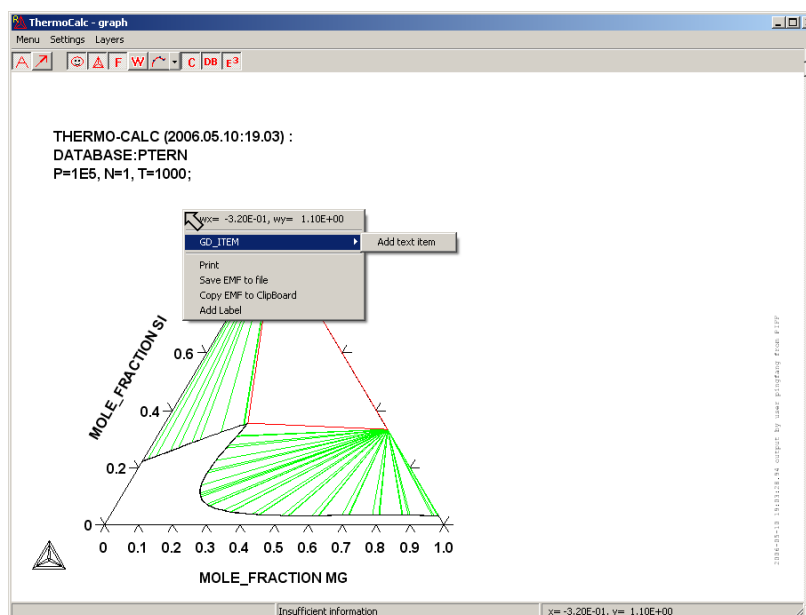


图 9.8. *Thermo-Calc - graph* 窗口的鼠标控制编辑功能:要编辑一个用户指定的文本和符号, 请点击鼠标右键, 然后选择“Add text item”选项, 程序将会弹出一个“Add Text to Diagram”窗口以添加/编辑所要的文本和字体/类型/大小, 等等(如图 9.5 所示).

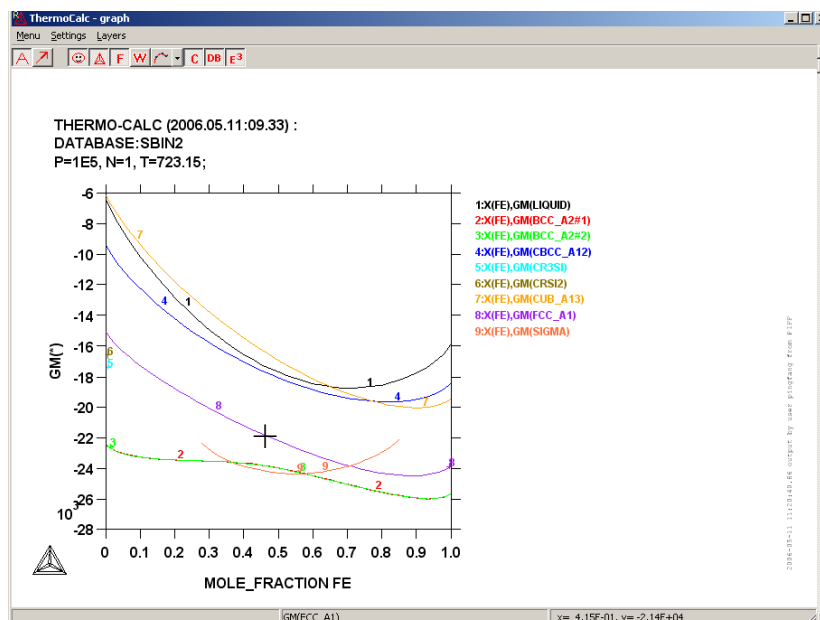


图 9.9. *Thermo-Calc - graph* 窗口的鼠标控制编辑功能: 为识别一个所绘制的性质图上的性质曲线。鼠标所在

处的识别性质会在窗口底部的中间区域显示出来[此时，为 GM(FCC\_A1)]。

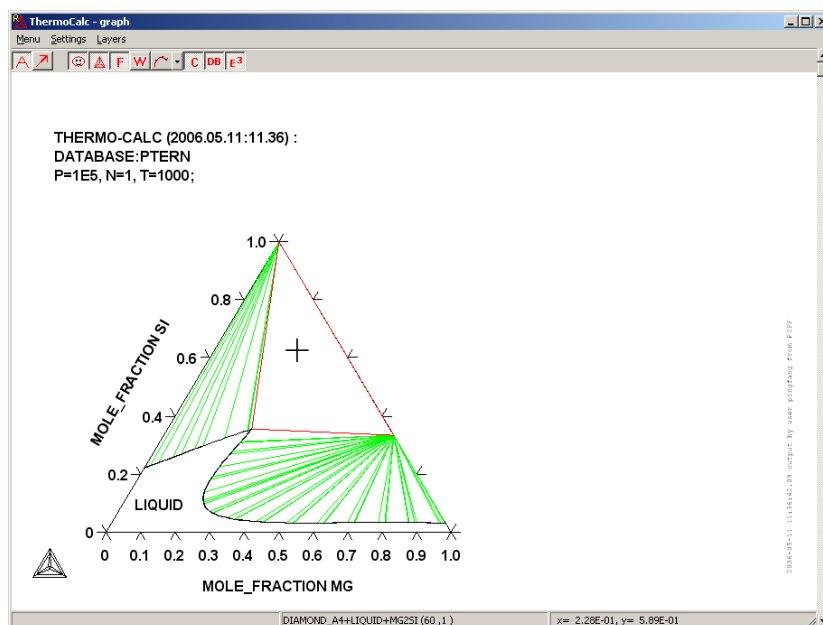


图 9.10. ThermoCalc - graph 窗口的鼠标控制编辑功能: 可确定所绘图形的相区。鼠标所在处的稳定相组合会在窗口底部的中间区域显示。[此时为 DIAMOND\_A4+LIQUID +MG2SI]

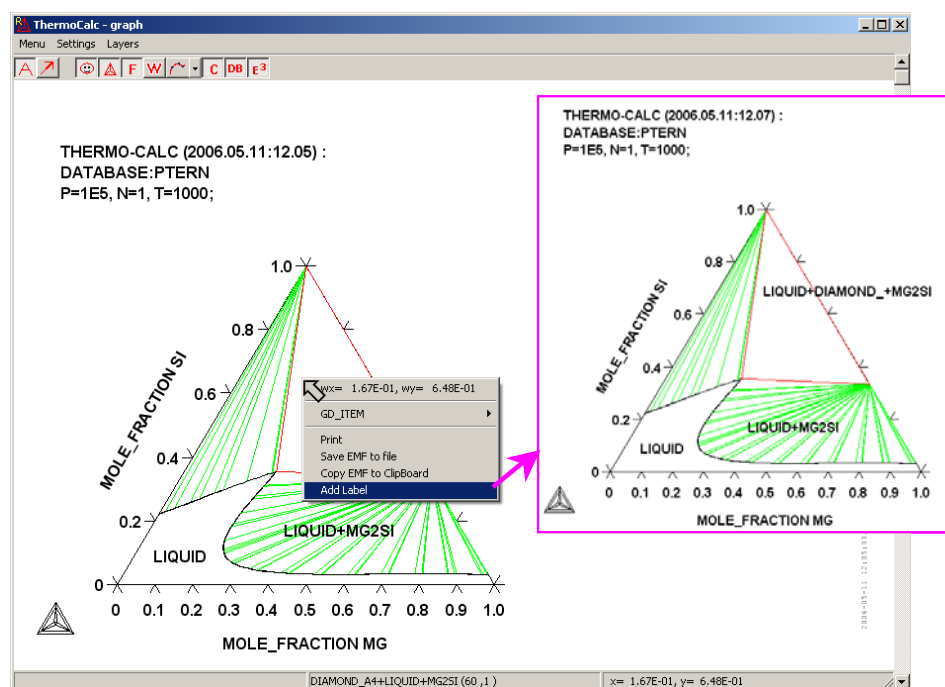


图 9.11. ThermoCalc - graph 窗口的鼠标控制编辑功能: 为在所绘图形上识别和标记一个相区域。点击鼠标右键, 然后选择“Add Label”选项, 将会写出鼠标所在处的相区域中的稳定相组合。

### 9.3.9 PRINT\_DIAGRAM

**描述:** 该命令对于即时的高质量打印是非常有用的，但是存在于 Windows NT/2000/XP and Windows 95/98/ME 环境下的 TCC 中。在创建一个 Thermo-Calc 图象后（而且，基本上已通过 PLOT\_DIAGRAM 命令在屏幕上显示），用户可以用该新添加的命令直接在相连的打印机上直接打印相图。

**概要:** PRINT\_DIAGRAM

**随后窗口:** 在这个命令之后，屏幕上将会弹出一个 **Print** 窗口（如 图 9.12 所示），其中用户可以选择想要的相连打印机，如果愿意的话，用户还可以改变打印设置。

当在 **Print** 窗口点击 OK 按钮确认所选打印机和特性后，另外一个窗口 **Ghostscript**（如 Figure 9.13 所示），将会弹出来一段时间，以显示打印进度的百分数。在这个小窗口中，如果用户确实需要也可以取消打印；否则，该窗口在打印结束后会立即消失。

**重要提示:** 为图形设置什么样的绘图设备并不重要，该命令总是能够通过选择在相连打印机上打印的图象类型将其转化为 Ghostscript-compatible 绘图格式（例如，Postscript portrait mode, 或 Color Postscript portrait mode）和一个之前指定的 Postscript-related 字体（如, Helvetica 或 Times-Bold),。

打印进程结束以后，暂时为转化和打印而设置的图形设备将会变回到之前由 SET\_PLOT\_FORMAT 命令设置的那个，以便用户可以使用 PLOT\_DIAGRAM 命令将图保存到目标文件中。

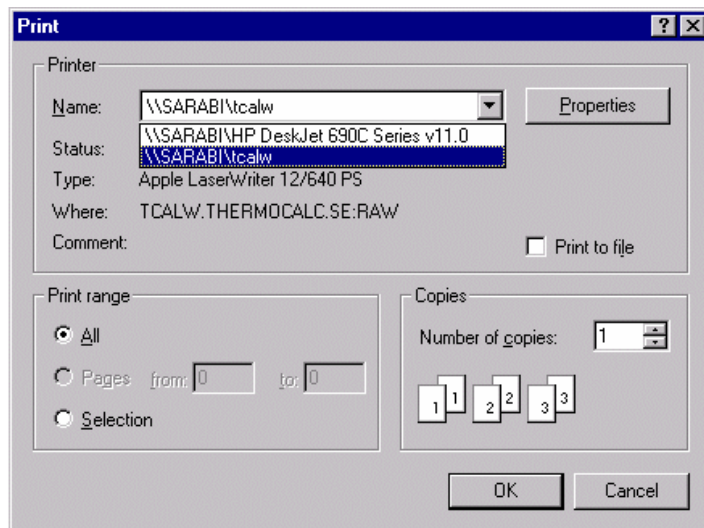


图 9.12. “Print”窗口：相连打印机及特性的选择.

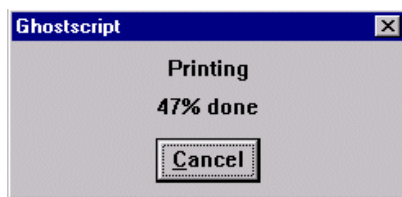


图 9.13. “Ghostscript” 窗口: 打印进度。

### 9.3.10 DUMP\_DIAGRAM

**描述:** 这也是一个很重要的命令，但是是针对一般质量的快速打印。和 PRINT\_DIAGRAM 命令相似，在创建一个 Thermo-Calc 图片后（而且，基本上已通过 PLOT\_DIAGRAM 命令在屏幕上显示），用户可以使用该新添加的命令将图片保存到一个具有如表 9.1 中所示绘图格式的文件中。

表 9.1. 用于导出一个 Thermo-Calc 图片的主要图形格式

| <i>Graphic Format</i>              | <i>Default File Extension</i> | <i>Suitable Editor(s)</i> |
|------------------------------------|-------------------------------|---------------------------|
| PNG (Portable Network Graphics)    | . PNG                         | MS Photo Editor           |
| BMP (Windows Bitmap)               | . BMP                         | MS Photo Editor           |
| PDF (Adobe Portable Document File) | . PDF                         | Acrobat Reader, CorelDraw |
| JPEG (File Interchange Format)     | . JPG                         | MS Photo Editor           |
| TIFF (Tagged Image File Format)    | . TIF                         | MS Photo Editor           |

如上表所示，保存的文件（如 PNG 格式）可以被通过如 Microsoft Photo Editor, Adobe Reader 或 CorelDraw 等软件打开或编辑,而且从这些软件，图象也可以直接在相连打印机上打印。有了这样的图形编辑器，Thermo-Calc 图片可以被剪切或粘贴到另一个 word/graphical 处理文件中去(如: Microsoft Word 或 PowerPoint 文件).

注意：该命令只适用于 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下的 TCC，但是自 PC Linux 和 UNIX 平台下的 TCCN 版本之后就不能使用了。

**概要:** DUMP\_DIAGRAM

**随后提示:** OUTPUT FORMAT (PNG,BMP,PDF,JPEG,TIFF) /PNG16/: <format or RETURN>  
为转换图象指定一个合适的图象格式或按<RETURN> 来接受默认格式 (PNG16).

RESOLUTION (LOW,MEDIUM,HIGH) /MEDIUM/: <resolution choice>  
用户应该指定一个分辨率，默认的为中等水平。

FILE NAME: <name of a graphic file>

屏幕上将会弹出一个如图 9.14 所示的 **Save As** 窗口。用户应该在 **File name** 工具栏中给定一个名称,以便用户想在 **Save in** 工具栏中保存文件时进一步定义工作目录。通常地，**Save as type** 工具栏中默认的文件类型是在之前的提示中选择的合适的图片格式。

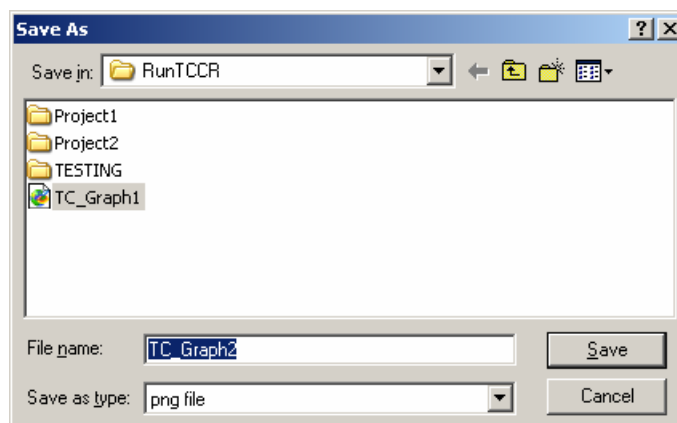


图 9.14. “Save As” 窗口：保存转变的图象文件。

**重要提示：** 和 PRINT\_DIAGRAM 命令的情况相识，对于该命令而言为图片设置什么样的绘图设备并不重要，因为该命令总能将屏幕上显示的图片转变为所选绘图格式。

打印进程结束以后，暂时为转化和打印而设置的图形设备将会变回到之前由 SET\_PLOT\_FORMAT 命令设置的那个，以便用户可以使用 PLOT\_DIAGRAM 命令将图保存到目标文件中。

### 9.3.11 SET\_SCALING\_STATUS

**描述：** 当通过 SET\_DIAGRAM\_AXIS 命令选择一个轴变量时，该轴的缩放比例通常为自动设置。通过该命令，用户可以为指定的轴选择手动和自动缩放。如果选择了手动，用户必须定义一个最大值和一个最小值。手动设置可以用来放大图形中您所感兴趣的部分。

**概要 1：** SET\_SCALING\_STATUS <name of an axis> <Y or N> <min> <max>

**概要 2：** SET\_SCALING\_STATUS

**随后提示：** Axis (X, Y or Z): <name of an axis>  
指定您想设定缩放状态的轴。

AUTOMATIC SCALING (Y or N) /N/: <Y or N>

您可以在自动 (Y) 和手动 (N) 间选择。如果选择了手动缩放，您必须进一步确定下面的参数：

MIN VALUE: <minimum value>

所指定轴起点的最小值。



MAX VALUE: <maximum value>  
 所指定轴终点的最大值。

### 9.3.12 SET\_TITLE

**描述:** 用户可以指定一个标题，且该标题将会出现在在同一次运行 TCC 时从 POST 模块中所列出的表格及所绘制的图形上

**概要 1:** SET\_TITLE <title>

**概要 2:** SET\_TITLE

**随后提示:** TITLE: <title>  
 输入您想在所有表格或图片输出上显示的标题。注意：标题最大长度为 60 个字符。

### 9.3.13 LIST\_PLOT\_SETTINGS

**描述:** 该命令用于在终端列出确定所要绘制图形类型的大部分参数的当前值。

**概要:** LIST\_PLOT\_SETTINGS

## 9.4 Experimental Data File Plot Commands

### 9.4.1 APPEND\_EXPERIMENTAL\_DATA

**描述:** 这个命令主要用于在计算的相图上添加实验点和文本。这是通过将实验数据和文本放置在格式文本文件中(扩展名总是为 EXP)来实现的，而且是在 Thermo-Calc 程序之外根据绘图语言的语法 *DATAPLOT Graphical Language* 来准备的。这在 *DATAPLOT User's Guide & Examples* 中有具体描述。

由数据生成的图片与通过 postprocessor 生成的图片叠加一块输出。这样一个实验数据文件可以一个普通的文本编辑器来创建（例如 NotePad, PFE, 等等）。

这个命令的另外一个重要用途就是将几个独立的计算结果叠加绘图。为了这个目的，这里有个命令 `MAKE_EXPERIMENTAL_DATAFILE` (如下)，它会转变根据 `DATAPLOT` 句法编写的 `EXP` 文件中的一个计算图象。在普通文本编辑器的帮助下，许多这样的文件可以被合并到一起。记住对于每个这样的 `EXP` 文件你只能有一个序言部分。

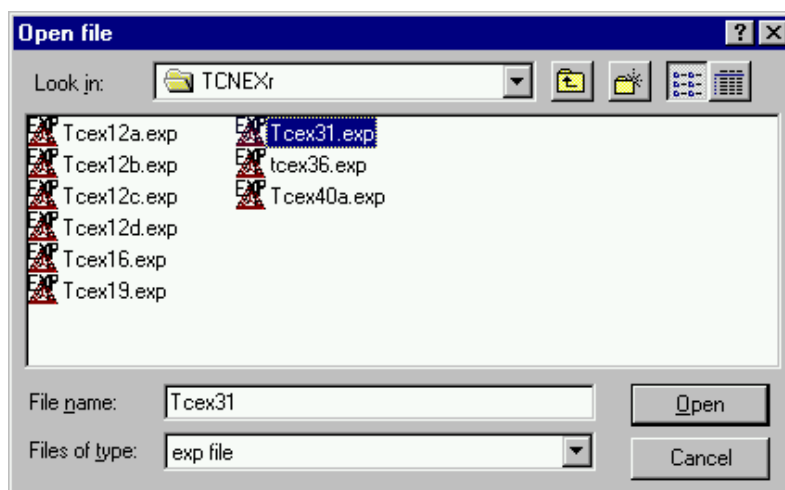
一览表: `APPEND_EXPERIMENTAL_DATA`

跟踪提示: `USE EXPERIMENTAL DATA (Y or N) /N/: <Y or N>`

定义从一个实验数据文件中获得的数据是否包含在下一个绘图 中。如果答案是 N，没有实验点将会被绘制。

`EXPERIMENTAL DATAFILE: <name of an experimental datafile>`  
用实验数据定义文件名称；这个提示只在 Linux 和 UNIX 平台有效。默认文件扩展名为“`exp`”。

在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下，一个 *Open file* 窗口将会在屏幕上弹出来。以便路径(在 **Look in** 一栏) 和文件名 (在 **File name** 一栏) 可以被合适地定义，如 *Figure 9.15* 所示。



**Figure 9.15.** “Open file”窗口: 打开一个存在的 \*.EXP 文件.

文件类型(例如 `EXP`，在 **Files of type** 一栏) 不能被改变。通过按 **Open** 按钮,程序随着读实验数据到 `PARROT` 工作空间一起进行。用户也可以取消这样一个 **Open file** 窗口，从而当前的实验数据文件就不会被打开。

PROLOGUE NUMBER: /0/: <序列数>

选择使用哪个序列。一个序列中，我们可以给出坐标轴的比例，等等。请注意，回答-1，就给出了文件中所有序列，且回答 0 时，不会附加实验数据。

DATASET NUMBER(s) /-1/: <数据集数目>

从要读的数据集中选择数据。几个数据集可能分别给出，中间用逗号或者空格隔开。请注意，回答-1 时，会给出文件中所有数据集；回答 0，不会附加实验数据。

## 9.4.2 MAKE\_EXPERIMENTAL\_DATAFILE

**描述:** 此命令可用于把图形信息写入屏幕上或者使用 DATAPLOT 格式（请参看 [\*DATAPLOT Graphical Language\*](#) 文档）的一个格式化了文本文件。我们可以用此命令在文件中写出它们，然后用普通的文本编辑器（比如 Notepad, PFE, 等）添加或者把它们编辑在一起，以便将两个或者更多的不同的计算中的图表合并。

**一览表 1:** MAKE\_EXPERIMENTAL\_DATAFILE <文件名或者 RETURN>

**一览表 2:** MAKE\_EXPERIMENTAL\_DATAFILE

**跟踪提示:** OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/: <文件名或者 RETURN>  
具体指出所需文件名。我们可以接受 /SCREEN/（按下<RETURN>）以获取列表。否则，必须在图形文件信息要写出的位置给出文件名。缺省扩展名是“EXP”（PC Windows 环境下）或者“exp”（UNIX 和 Linux）。

## 9.4.3 QUICK\_EXPERIMENTAL\_PLOT

**描述:** 此命令与 APPEND\_EXPERIMENTAL\_DATA 命令相似，但可以在 PLOY3 工作区中没有绘出图形信息时使用。它定义了一对坐标轴，标定为“X”和“Y”，且 X-和 Y-坐标轴的尺寸在 0.0 和 1.0 之间，除非从 DATAPLOT (EXP) 数据文件中读取了一个序列。  
更多有关实验数据文件格式的详情请参看 [\*DATAPLOT Graphical Language\*](#) 文档。

**一览表 1:** QUICK\_EXPERIMENTAL\_PLOT <实验数据文件名>

**一览表 2:** QUICK\_EXPERIMENTAL\_PLOT

**跟踪提示:** EXPERIMENTAL\_DATAFILE: <实验数据名>  
具体指出有实验数据的文件名；此提示只在 Linux 和 UNIX 平台有效。缺省文件名是“exp”。

Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下，屏幕上会跳出一个 **Open file** 窗口（与 APPEND\_EXPERIMENTAL\_DATA 命令相同），以便能够对路径（在 **Look in** 工具条中）和文件名（在 **File name** 工具条中）进行合适的具体化，如图 9.5 所示。

PROLOGUE NUMBER: /0/: <序列数目>

选择使用哪些序列，我们可以，比如说，给出坐标轴的比例，坐标轴标识等。请注意，如果回答-1，给出文件中所有序列，如果回答 0，不会附加实验数据。

DATASET NUMBER(s) /-1/: <数据集数目>

从应当读取的数据集中选择数据。几个数据可能分别给出，中间用逗号或者空格隔开。请注意，通过回答-1，可以给出文件中所有的数据集；而回答 0 则不会附加实验数据。

## 9.5 其他命令

### 9.5.1 ENTER\_SYMBOL

**描述:** 符号定义是 POLY 和 POST 中方便用户定义数值的一个很有用的特色。这些符号可以是常量，函数或者表格。

**一览表:** ENTER\_SYMBOL

**跟踪提示:** 常量，变量，函数或者表格？  
/FUNCTION/: <关键词>

关键词可以以 CONSTANT, VARIABLE, FUNCTION 或 TABLE 的形式具体指出。

- 
- **CONSTANTS** 只能输入一次，且只是一种给数值设置名字的方式。比如，用帕斯卡表示的一个大气压值可以在 ENTER CONSTANT P0=101325 命令后定义为 P0。已定义的常量可以作为条件设定中的值使用，如 SET-COND P=P0。
  - **FUNCTIONS** 表示状态变量或者其他函数。这些表达会保存下来，并且需要函数值时会对所有函数赋值。原因是它们可能互相依赖。
  - **VARIABLES** 与函数相似，它们也可以是状态变量的表达。然而，与函数相反的是，变量只会在输入或者在 EVALUATE 命令中已经明确的给定了名字时赋值。可以在任何时候用一个新的表达式输入变量。会直接赋值给这个表达式，且其值会以变量值的形式

存储起来。SET-CONDITION 命令中已定义变量可以以值的形式使用。

- TABLES 用于列出 STEP 或者 MAP 命令中的结果。表格包含一列状态变量，函数或者普通变量。已定义了的表格可以用于 POST 中的后处理程序。

注意事项: 表格和变量之间有一个特殊的连接。如果变量在表格中使用，会为 TABULATE 命令中的表格的每一行赋值，或者是此表格用于绘制时同样。

---

Name: <符号名>

每个符号有唯一的名字，且必须以字母开头，最多有 8 个字符。如果我们希望在同一行输入符号名、值或函数，必须用等号 “=” 把它们分开，比如，TC=T-273.15。否则，会出现一系列问题；请注意，对于这里定义的不同类型的符号（常量，函数，变量或者表格），会以不同的方式提出此问题。

Function: <函数或者变量的定义>

函数和变量在状态变量或者其他函数，常量抑或普通变量表达式中赋值。此表达式是一个类似 FORTRAN 风格的表达式，可以使用运算符+,-,\*,=和\*\* (\*\*只与整数次幂连用)。也可以使用一元函数，如 LOG, LOG10, EXP, SIN, COS 和 ERF。表达式用于多于一行的情况。用“;”或者空行终止表达式（在下一个提示时按下<RETURN>）。

函数举例:

|                       |                |
|-----------------------|----------------|
| GM (LIQUID)           | 每摩尔化合物的吉布斯自由   |
| H.T/4.184             | 体系的热容（用卡表示）    |
| ACR (CR) /X (FCC, CR) | FCC 中 Cr 的活度系数 |
| T-273.15              | 摄氏温度           |

& <继续符号定义>

“&”意思是，如果还不够的话，我们可以在新的一行继续写函数。如果我们已经完成了函数，只需再次按下 RETRUN 。

Value: <常量值>

常量只能赋值一次。

Value or expression: <变量表达式的值>

可以赋给变量数值或者表达式。表达式会立即赋值或丢弃。只保留数值。这使得不同状态下计算之间的保存成为了可能，因为所有状态变量和函数会在新的状态下赋值。

Variable(s): <表格中的变量>

表格包含一系列状态变量或函数。从 STEP 命令中获取结果的一种途径便是通过表格。

实例:

```
ENTER TABLE K=T,X(LIQ,C),X(LIQ,CR),ACR(C)
```

其意思是，称做 K 的表格包含四项，比如，温度，LIQUID 相中 C 和 Cr 的摩尔分数，以及 C 的活度。

如果我们希望获得表格中的摄氏温度，可以首先给出 ENTER FUNCTION TC=T-273 命令；然后使用表格中的符号 TC。

& <继续表格中的定义>

“&”意思是，如果表格一行不够的话，我们可以继续在新的一行中写表格。如果已经完成了表格，只需再次按下 RETRUN 。

## 9.5.2 LIST\_SYMBOLS

**描述:** 对于所有的常量，函数，变量和表格，其定义可以用此命令列出。已定义了的变量会与已定义了的函数一起列出，但变量名后会附有百分含量标志“%”。

**一览表:** LIST\_SYMBOLS

## 9.5.3 SET\_AXIS\_LENGTH

**描述:** 此命令可以用于改变坐标轴实际长度。相对长度为 1 时，坐标轴上缺省的 **tic-marks** 是 10。基于 POST 中使用的图形包中的一些特质，添加了此命令。

每 **tic-mark** 的数值和单元必须是 1, 2 或者 5 的倍数, 以获得坐标轴的合理比例。

一览表: SET\_AXIS\_LENGTH

跟踪提示: AXIS (X, Y 或者 Z): <坐标轴名称>

用户必须具体指出要设置长度的坐标轴。

AXIS LENGTH /11.5/: <坐标轴新的相对长度>

用户可以具体指出坐标轴新的实际长度。坐标轴上相对长度 1 与 10 tic-marks 相对应。

## 9.5.4 SET\_AXIS\_TEXT\_STATUS

描述: 此命令可以用于改变用户给出的一个文本中的坐标轴的规范的自动文本中的坐标轴文本。

一览表: SET\_AXIS\_TEXT\_STATUS

跟踪提示: AXIS (X, Y 或者 Z): <坐标轴名>

用户必须具体指出哪个坐标轴文本状态要改变。

AUTOMATIC AXIS TEXT (Y 或 N) /N/: <Y 或 N>

用户必须具体指出是否会用自动坐标轴文本 (Y) 或者 (N)。如果自动坐标轴尚未选定, 用户在自己以后的坐标轴文本中将会得到提示:

AXIS TEXT: <需要的坐标轴文本>

用户应当输入自己需要的坐标轴文本。

## 9.5.5 SET\_AXIS\_TYPE

描述: 此命令用于改变线性, 对数和反坐标轴的类型。

一览表: SET\_AXIS\_TYPE

跟踪提示: AXIS (X, Y 或 Z): <坐标轴名 >

用户必须具体指出要改变哪个坐标轴的坐标轴类型。

AXIS TYPE /LINEAR/: <新的坐标轴类型>

具体指出要设置哪个新的坐标轴类型。选择 LINear (缺省), LOGarithmic 或者 INVerse。只有开头的三个字符是相关的。



## 9.5.6 SET\_COLOR

**描述:** 此命令用在一些支持色彩（比如，MS-Windows）或者线型（比如，X-Windows 或者 HP-LaserJet）的设备。使用此命令，我们可以选择图表中的信息的一些类型不同 Colors 或者 LineTypes。请注意，如果一个选定的设备不支持色彩或者线型，此命令不能使用。

此命令会用关键词和缺省选项（两者如下所示），产生四个连续的提示（比如，文本和坐标轴，零变量平衡，共轭线，以及其他所有线型）。依赖于当前图形设备(用 SET\_PLOT\_FORMAT 命令)是否支持色彩或者线型，POST 会自动的连接合适的关键词。

**一览表:** SET\_COLOR

**跟踪提示:** 文本 和 坐标轴关键词 / 缺省选项 / : <RETURN 或者新的选项>

稳定平衡关键词/缺省选项 / : <RETURN 或者新的选项>

连线色彩关键词/缺省选项 / : <RETURN 或者新的选项>

所有其他线型的关键词/缺省选项 / : <RETURN 或者新的选项>

这一项通常是用于溶解度曲线。

**注意事项:** 关键词或者是色彩或者是线型，这依赖于当前图形设备是否支持色彩或者线型（用 SET\_PLOT\_FORMAT 命令）；POST 模块会自动连通合适的关键词。  
色彩的 22 个合法的选项为：

```
BACKGROUND
FOREGROUND
RED
GREEN
BLUE
YELLOW
MAGENTA
CYAN
PURPLE
GOLD4
TURQUOISE4
PINK
GRAY
ORANGERED3
MAROON
PLUM
SEAGREEN
OLIVEDRAB
SIENNA
```

ORANGE1  
CORAL1  
USERDEF

线型 8 个合法的选项为：

INVISIBLE  
NORMAL  
VERY\_THICK  
THIN  
THICK  
VERY\_THIN  
DASHED  
DOTTED

色彩或者线型一方缺省的选项如下所列：

| 文本/线   | 颜色         | 线型         |
|--------|------------|------------|
| 文本和坐标轴 | FOREGROUND | NORMAL     |
| 稳定平衡   | RED        | VERY_THICK |
| 连线     | GREEN      | THIN       |
| 其他所有线  | FOREGROUND | NORMAL     |

## 9.5.7 SET\_CORNER\_TEXT

**描述：** 此命令在绘制的图表的四个角落写文本。通常，我们可以副标题的形式写这些文本。

**一览表：** SET\_CONER\_TEXT

**跟踪提示：** CORNER /LOWER\_LEFT/: <RETURN 或新的选项>  
使用以下五个选项中的一个：

LOWER\_LEFT  
UPPER\_LEFT  
UPPER\_RIGHT  
LOWER\_RIGHT  
TOP\_OF\_TRIANGLE

**Text：** <副标题或者便笺式的文本>  
写出要写在具体图表一角的文本。

**注意事项：** 作为 TCCP 以来的一个新的特色，计算中和计算的状态会作为所有图表的一部分，在其右上角自动绘制。计算的状态总会写在绘制的图表中，除非绘制选项 WRITE CONDITIONS 已被 SET\_PLOT\_OPTION 命令切断；并且只有绘制

选项 PLOT HEADER 已被 SET\_PLOT\_OPTION 命令切断时，使用的数据库才会而且总会出现。这些情况下，我们应当避免在 UPPER\_LEFT 角中写文本。

## 9.5.8 SET\_FONT

**描述:** 用户可以在当前选定的图形设备下绘制图表时选择用作标志和数据的字体（用 SET\_PLOT\_FORMAT 命令）。对于一些设备（比如，PostScript），可能有另外一些可以使用的字体，用 SET\_PLOT\_FORMAT 命令可以选择使用哪种。

**一览表:** SET\_FONT

**跟踪提示:** SELECT FONTNUMBER /1/: <#>  
具体指出可以使用的字体号码#作为当前图形设备的缺省字体,或者通过按下<RETURN>接受 1 号字体。此处键入“?”，程序会列出当前选定图形设备下可以使用的字体。

Linux/UNIX 平台下，可以使用以下 10 种字体：p

```
FONT 1 IS Cartographic Roman
FONT 2 IS Bold Roman Script
FONT 3 IS Bold Roman
FONT 4 IS Bold Italic
FONT 5 IS Script
FONT 6 IS Bold Script
FONT 7 IS UNCIAL
FONT 8 IS Bold Greek
FONT 9 IS Gothic English
FONT 10 IS Gothic Greek
```

Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下，可以使用以下 43 种字体：

```
FONT 1 IS AvantGarde-Book
FONT 2 IS AvantGarde-BookOblique
FONT 3 IS AvantGarde-Demi
FONT 4 IS AvantGarde-DemiOblique
FONT 5 IS Courier
FONT 6 IS Courier-Oblique
FONT 7 IS Courier-Bold
FONT 8 IS Courier-BoldOblique
FONT 9 IS Helvetica
FONT 10 IS Helvetica-Oblique
FONT 11 IS Helvetica-Bold
FONT 12 IS Helvetica-BoldOblique
FONT 13 IS LubalinGraph-Book
```

```
FONT 14 IS LubalinGraph-BookOblique
FONT 15 IS LubalinGraph-Demi
FONT 16 IS LubalinGraph-DemiOblique
FONT 17 IS NewCenturySchlbk-Roman
FONT 18 IS NewCenturySchlbk-Italic
FONT 19 IS NewCenturySchlbk-Bold
FONT 20 IS NewCenturySchlbk-BoldItalic
FONT 21 IS Souvenir-Light
FONT 22 IS Souvenir-LightItalic
FONT 23 IS Souvenir-Demi
FONT 24 IS Souvenir-DemiItalic
FONT 25 IS Times-Roman
FONT 26 IS Times-Italic
FONT 27 IS Times-Bold
FONT 28 IS Times-BoldItalic
FONT 29 IS Symbol
FONT 30 IS Helvetica-Narrow
FONT 31 IS Helvetica-Narrow-Bold
FONT 32 IS Helvetica-Narrow-Oblique
FONT 33 IS Helvetica-Narrow-BoldOblique
FONT 34 IS Bookman-Demi
FONT 35 IS Bookman-DemiItalic
FONT 36 IS Bookman-Light
FONT 37 IS Bookman-LightItalic
FONT 38 IS Palatino-Roman
FONT 39 IS Palatino-Bold
FONT 40 IS Palatino-Italic
FONT 41 IS Palatino-BoldItalic
FONT 42 IS ZapfChancery-MediumItalic
FONT 43 IS ZapfDingbats
```

FONT SIZE /.34/: <##>

具体指出选定的字体的型号。推荐使用 0.34 左右的值。

### 9.5.9 SET\_INTERACTIVE\_MODE

**描述:** 此命令重新设置输入和输出单元为其初始值，比如，键盘和显示器。请记得添加之作为你的 MACRO 文件最后的命令，以便停止使用 POST 模块中此命令文件。在交互模块中它没有任何意义。

**一览表:** SET\_INTERACTIVE\_MODE

## 9.5.10 SET\_PLOT\_OPTIONS

**描述:** 使用此命令, 在所有随后产生的图表中的一些选项的绘制中会提示我们, 也可以切换至(Y)或者切断它们(N)。

**一览表:** SET\_PLOT\_OPTIONS

**跟踪提示:** PLOT HEADER /Y/: <Y 或 N>  
 切换至图表上的 Thermo-Calc 标题的绘制处。

PLOT LOGO /Y/: <Y 或 N>  
 切换至图表的左下角的 Thermo-Calc 的绘制处。

PLOT FOOTER /Y/: <Y 或 N>  
 切换至图表右边页边空白处的脚页标识符处。

WHITE-CONTOURED-PS-CHARS /Y/: <Y 或 N>  
 这个命令使我们能够在白色轮廓状态时写 PostScript 字符。

PLOT REMOTE EXPONENT(S) /Y/: <Y 或 N>  
 这个命令设定(Y)或者删除(N)坐标轴上的绘制的细微的指数。

PLOT SYMBOLS AT NODE POINTS /O/: <#>  
 这个命令使我们能够在图表中的绘制的线的结点处绘制符号。

SYMBOL SIZE /.1/: <. #>  
 设置在结点处绘制的符号的大小。

WRITE CONDITION /Y/: <Y 或 N>  
 作为 TCCP 以来的一个新的特色, 用于计算和计算的状态中的主要的数据库 (非附加) 会自动的作为标题的一部分绘制在左上角。这个选项切断 (通过回答 N) 时, 也就可能不在图表上写出计算状态了。

## 9.5.11 SET\_PREFIX\_SCALING

**描述:** 此命令通过使用带有坐标轴名和 YES 或者 NO, 抑或整数# (作为细小指数的幂) 设置了有一定幂 (缺省值为 3) 的细微指数的比例:

- “NO” 终止操作
- “YES” 排列前缀比例以便坐标轴的比例与细小指数 (三阶幂) 一起处理, 比如:
  - ... , -6, -3, 0, 3, 6, ...
- “#” 用 “#” 设置细微指数

**一览表:** SET\_PREFIX\_SCALING

**跟踪提示:** AXIS (X, Y 或 Z): <坐标轴名>  
 用户必须具体指出哪一个坐标轴要有前缀比例。

USE PREFIX SCALING /Y/: (Y 或 N 或 #)  
 如上所示, 用户必须回答或者 Y 或者 N 或者一个整数值。

## 9.5.12 SET\_REFERENCE\_STATE

**描述:** 成分的参考状态在计算活度，化学势能和焓时非常重要。详情请参看第 8.10.7 和 3.2.13 章节。

STEP 或者 MAP 计算后，使用此命令，成分的参考状态也可以在整个体系或者一个具体相中改变绘制成分的各种性质。之后，用户可以用 R 后缀，比如 MUR(组分), MUR(组分, 相), ACR(组分), ACR(组分, 相)，或者其普通对数（比如，LNACR(成分, 相)]设置图表坐标轴，作为化学势或者活度量。

**一览表:** SET\_REFERENCE\_STATE

**跟踪提示:** 成分: <成分名>  
必须给出成分名。

参考状态: <用于新的参考状态的相名>

必须在此处给出或者是 ENTERED 或 DORMANT 或 SUSPENDED 相名。成分当然必须是这个相的一个组成物。

成分是否在相中以几个形式共存，这是一个微妙的问题，比如，气态中的氧 O<sub>2</sub> 和 O<sub>3</sub>。通常，我们愿意有最稳定的形式作为氧的参考状态，比如，这种情况下的 O<sub>2</sub>。因此，此程序会在当前温度计算相中纯组分的所有可能状态的吉布斯自由能，以及选择最稳定的一个。

温度 /\*/: <参考温度>

我们可以为参考状态选择温度（用 K 做单位）。\*值意思是当前温度用于计算。

压强 /1E5/: <参考压强>

我们可以为参考状态选择压强（以 Pa 为单位）。\*值意思是当前压强用于计算。

## 9.5.13 SET\_TIELINE\_STATUS

**描述:** 如果连线在计算的版块中，我们可以选择用此命令在两相区域中绘制连线。

**一览表:** SET\_TIELINE\_STATUS

**跟踪提示:** PLOTTING EVERY TIE-LINE NO /0/: <连线号码>

绘制的连线不会被图形软件平分。用户反而可以选择绘制计算的连线的子集，比如，每一个（1），每两个（2），每三个（3）等等。接受缺省值 0，不会绘制任何连线。

## 9.5.14 SET\_TRUE\_MANUAL\_SCALING

**描述:** 坐标轴上的 **tic-marks** 通常把整个坐标轴的长度存放在偶数区间中。常规比例会稍微调整给出的最小和最大值以实现此功能。如果不需要这种自动的调整, 用此命令 (后随有一个具体坐标轴显示的 TRUE MANUAL SCALING 集 的消息) 可以避免之。

此命令工作形式类似于切换。只需对此具体的坐标轴 (后随有一个具体坐标轴显示的 TRUE MANUAL SCALING 集 的消息) 重复此命令就可以重新设置这个自动比例。

**一览表:** SET\_TRUE\_MANUAL\_SCALING

**跟踪提示:** AXIS (X, Y 或 Z): <坐标轴名>  
具体指出您想要在自动调整之间切换哪个坐标轴 (X 或 Y 或 Z) 或者避免对给定的最小和最大值的调整。

## 9.5.15 FIND\_LINE

**描述:** 此新的命令 (自 TCCP 以来) 可用于识别绘制的性质图表 (step 计算后) 中的各种性质曲线, 它在相图中的稳定相域中效果很好 (MAP 计算后)。

**一览表:** FIND\_LINE

**跟踪提示:** X 坐标轴/.484623611/: <X 坐标轴的值>  
您希望找到性质曲线的细节 (或相区) 时, 具体指出 X 坐标轴的值。

Y 坐标轴/.5153737962/: <Y 坐标轴的值>  
您希望找到性质曲线的细节 (或相区) 时, 具体指出 X 坐标轴的值。

依次, POST 模块中将会在屏幕上显示定义的性质 (性质图谱中的某条性质曲线), 或者定义的稳定相的组合 (相图中的某个相区); 比如:

```
found line : GM(FCC_A1) (for a property diagram)
found line : LIQUID+MG2SI (for a phase diagram)
```

## 9.5.16 TABULATE

**描述:** 对任何输入的表格, 该命令将列出 step 命令计算出来的表格中变量的值。此命令只对 POLY 和 POST 模块中输入的表格起作用。



与TAB 中的TABULATE 命令不同的是：用户不能通过该命令从制成的表格中将列画出来，如果要实现这种类型的绘图用户可以通过使用正常的POST 命令。

一览表：

TABULATE

跟踪提示：

Name: <name of a table entered in either POLY or POST>

- 指定输入到POLY 或者POST 模块中的表名。

OUTPUT ON SCREEN OR FILE /SCREEN/:<file name or RETURN>

如果需要将表格中的值及已定义的STEP 计算保存在文件中请指定文件名，如果只想在屏幕上看到表格中的值，请敲<RETURN> 键。

## 9.5.17 LIST\_DATA\_TABLE

描述：

这也是 TCCR 中开始出现的新命令，它可以用来显示在 POST 模块中已经定义的随着自变量(i.e.,性能相图中的X 轴变量)改变而改变的各种性能 (i.e.,性能相图中的Y 轴变量)，这些性能通常已经在 Thermo-Calc 的绘图窗口画出，并且只有在执行了STEP 计算之后才能显示出来。列出的结果可以直接显示在显示器上，也可以以微软 Excel 电子表格的形式输出（该文件文件名由用户定义，扩展名为XLS）。电子表格形式的文件可以再次编辑或通过Thermo-Calc 软件系统之外的环境中（使用微软Excel 程序）打开文件用于更加深入的绘图，这在Figure 9.16 已有说明。

注意：

该命令只有对执行了STEP 命令后的性能相图有效（对map 计算后得出的相图不起作用）

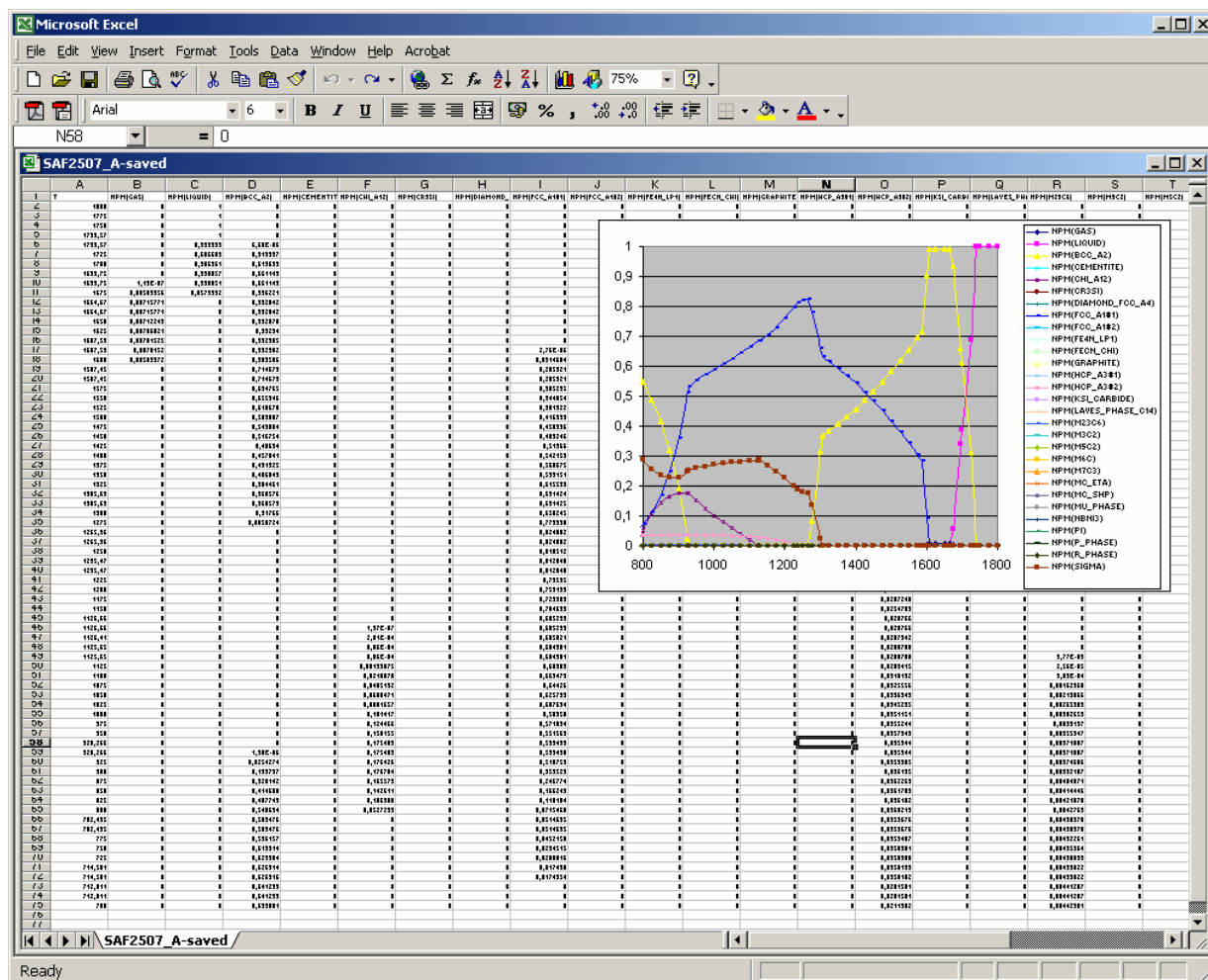
一览表：

LIST\_DATA\_TABLE

跟踪提示：

OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/:<file name or RETURN>

如果想将已定义的性能相图中的各种性能存入电子表格（以微软Excel 的形式，默认扩展名为XLS），请指定文件名；如果只想在显示器上看到简单的文字表格（对已定义的随自变量而改变的性能），请敲<RETURN> 键。



**Figure 9-16.** 一个列举属性表的例子(从一个已定义的属性图中),以 XLS 文档的形式输出。这样的文件在使用 Microsoft Excel 程序的情况下进一步的进行处理,以便形成其他类型的图表样式。

## 9.6 Odd Commands

### 9.6.1 PATCH WORKSPACE

描述: 这个指令只适用于那些认为自己知道他们在干什么的人。

PATCH WORKSPACE

## 9.6.2 RESTORE\_PHASE\_IN\_PLOT

**描述:** 这条指令恢复先前使用 SUSPEND\_PHASE\_IN\_PLOT 指令暂停的在平面图中的相.很自然,它只有在至少已经有一个相被 SUSPEND\_PHASE\_IN\_PLOT 暂停之后使用.

**一览表 1:** RESTORE\_PHASE\_IN\_PLOT <name of a phase>

**一览表 2:** RESTORE\_PHASE\_IN\_PLOT

**跟踪提示:** PHASE NAME: <name of a phase>  
给出在图中需要恢复的相的名称

## 9.6.3 REINITIATE\_PLOT\_SETTINGS

**描述:** 使用这个指令,所有的描述图的参数都将被设定为默认值. 因此,所有在 POST 模块的 plotting setting 都将丢失,而且所有的东西都会恢复到 POST 模块安装的最初设置情况

**一览表:** REINITIATE\_PLOT\_SETTINGS

## 9.6.4 SET\_AXIS\_PLOT\_STATUS

**描述:** 使用这个指令,用户可以指定是否坐标轴标题文本,和轴标记文本是否需要被绘制到图上.它对轴线与 tic-标志没效.如果希望能绘制一个没有 tic-标志的图的话,用户得首先使用 SET\_TIC\_TYPE 指令.  
这可以用来在一个 pen-plotter 上组合不同的图表,或者是更快的获得图表.默认的状态是所有的轴都需要绘制.

**一览表 1:** SET\_AXIS\_PLOT\_STATUS <Y or N>

**一览表 2:** SET\_AXIS\_PLOT\_STATUS

**跟踪提示:** Axis plot (Y or N) /Y/: (Y or N)  
使用者可以指定是否绘制轴文本(Y/N)

## 9.6.5 SET\_PLOT\_SIZE

**描述:** 通过这条指令,使用者可以改变图表的大小通过指明总体的绘制大小(正如一个相关的缩放比例因数).默认的缩放比例因数是 1,然而绘制的图表的实际大小取决于使用者通过 SET\_PLOT\_FORMAT 指令所选定的输出设施.默认的绘制大小 (与默认的大体绘制大小 1 对应的)是根据所选用的设施而调整的

**一览表 1:** SET\_PLOT\_SIZE <relative scaling factor>

**一览表 2:** SET\_PLOT\_SIZE

**跟踪提示:** GLOBAL PLOT SIZE /1/: <relative scaling factor>  
输入一个相关的缩放因子以一个数字的形式(如 0.5, 0.8, 1.0, 1.5 等等)  
通过按下<RETURN>键 默认的相关缩放因子(1)便被接受了.

## 9.6.6 SET\_RASTER\_STATUS

**描述:** 通过这条指令,可以让网格(如,在两个轴方向都使用网格线)给绘制到图表上.默认的状态是不绘制网格.

**一览表 1:** SET\_RASTER\_STATUS <Y or N>

**一览表 2:** SET\_RASTER\_STATUS

**跟踪提示:** RASTER PLOT (Y or N) /N/: <Y or N>  
绘制(Y)或不绘制(N)网格

## 9.6.7 SET\_TIC\_TYPE

**描述:** 这条指令使改变坐标轴的刻度成为可能.你可以改变坐标轴刻度标志的位置.如 在里面,还是外面或者不要.刻度标记的大小不能通过这条指令来改变,但是 他们是适应与所选用的图表设施,以及所定义的相关缩放因子(大体绘制大小)

**一览表 1:** SET\_TIC\_TYPE <1 or -1 or 0>

**一览表 2:** SET\_TIC\_TYPE

**跟踪提示:** TIC TYPE /1/: <1 or -1 or 0>  
刻度格式的默认值是 1,如 tic 被画在表格之外, -1 表示刻度 被画在表格之内,0 意味着没有刻度

## 9.6.8 SUSPEND\_PHASE\_IN\_PLOT

*描述:* 这条指令允许使用者指定起源于当前某个相的线不被绘制到图表中.如果,使用者想要把已经终止的相从新又恢复到图表中,他只需使用 `RESTORE_PHASE_IN_PLOT` 指令.

一览表 1: `SUSPEND_PHASE_IN_PLOT`

一览表 2: `SUSPEND_PHASE_IN_PLOT <name of a phase>`

*跟踪提示:* `PHASE NAME: <name of a phase>`

确定需要从图表中终止的相.

## 9.7 3D-Graphical Presentations: Command and Demonstration

自从 TCCP 版本以来,通过一个 VREM(Virtual Reality Modelling Language )观测器,如 plug-ins to web browsers 或者是 standalone 程序,可以观看到高质量的 Thermo-Calc 的三维立体图.这些观测器包括 *Cortona VRML Client* 要求在 Windows (NT/2000/XP and 95/98/ME)的环境之下(它由 ParallelGraphics, and downloadable 开发,网址 [www.parallelgraphics.com](http://www.parallelgraphics.com)),以及 *VRMLView* 要求在 Windows (NT/2000/XP and 95/98/ME), Mac, Linux and various UNIX 的操作平台之下(它由 SIM - Systems in Motion 开发的可以从 [www.sim.no](http://www.sim.no) 里面下载), 还有可供选择的观测器在 [www.web3d.org](http://www.web3d.org) 里的 VRLM Repository 列举出来. 在一些浏览器中, 需要选择正确的背景颜色或是启动所谓的照明灯来达到最好的观测效果.照明灯总是直接照在 3D 图上.

这个新的功能对于图表的呈现是很有用的,如一个由两条组成轴和一条 Z 轴(温度轴)代表的三元相图.在这种情况下,图表可以被绘制成一张三角图或一张平面的(四面体) 图.

它也可以被用来呈现四元图谱,在图表里温度以及压力加入到其中,而且在组成地方的线也被画了下来.在这种情况下,I 图表应作为绘制成四面体图与所有三个轴设为组成变量.

为了这种特殊的目的,一个新的 POST 指令 (`CREATE_3D_PLOTFILE`)被加入了进来,它可以自动把所有的默认/预定图形定义图形信息和选定数据点(表达并贮存在特定的表 或 \*.TAB 文件中,这些数据点来自与当前或是先前的 MAP/STEP 计算)转换成合适的格式并创建一个 \*.WRL 的文档为了通过合适的 VRML 观察器查看 3D 图.

这条指令提取由其他 POST 指令生成的图形定义资料如:

`SET_DIAGRAM_AXIS` 为了确定三维结构图的定轴变量.

`SET_TITLE`

为了确定三维结构图的名称 to set the title of the 3D diagram.

**SET\_DIAGRAM\_TYPE** 为了确定三维结构图的绘制类型,可实施的选象是基于矩形或三角行或四面体的图解.没有剪划线可以被使用.注意:对于四方体图,使用者必须得使用指令 **SET\_DIAGRAM\_TYPE N Y** (详情请见 *Section 9.3.2*),.

**SET\_RASTER\_STATUS** 指明是否缩短轴的刻度或全部栅格线应划在底部和背面的面孔广场 或三角三维图解.

**SET\_AXIS\_TEXT\_STATUS** 为了确定在三维立体图中的 X-, Y- 和 Z-轴文本标签

**SET\_SCALING\_STATUS** 设定人工或是自动缩放的三维立体图的轴比例而且在手动缩放的试图中确定最小值和最大值.

这里有一些对于三维立体图中可能的标度的限制.

- 方形图:  
X 与 Y 的最小值必须是 0.0。
- 三角形图  
X 与 Y 的最小值必须是 0.0。  
X 与 Y 的最大值必须相同。
- 四面体图:  
XY 与 Z 的最小值必须是 0.0  
X 与 Y 的最大值必须对于两个轴来说都相等, Z 轴的最大值可以任意选定。

例如,如果有人对 Fe-Cr-Ni-C 系统中富铁角感兴趣,那么轴变量(注意,不允许包含温度)可

选定为:

X = Cr 的含量

Y = Ni 的含量

Z = C 的含量 content,很可能 C 的含量比 Cr 与 Ni 低的多,通过在 Z 轴上使用

这个变量, 可以选择一个更适合的标度。

- 已画的线不能被剪辑.

CREATE\_3D\_PLOTFILE 指令可以使用下面三种模式来指定数据（除去图表定义信息）：

- **WS** 读取以表格形式存储的数据，这些数据是由 **POLY** 指令，**MAP**，或者 **STEP** 得到的在当前工作区的计算结果，也可以是已经计算出的结果，这些结果保存在现有的\*.POLY3 文件里。
- **TAB** 读取一个或者多个\*.TAB 文件（所有的这些文件都必须在当前的工作路径下）中以表格形式存储的数据，在这些文件当中，对于其它的先前用相关子系统计算的表格数据必须已经使用 **TABULATE** 指令保存。
- **BOTH** 读取当前工作区和以前保存在\*.TAB 文件中以表格形式保存的数据，意味着在当前工作区的表格数据可以与其他先前的 **MAP/STEP** 计算结果一起输入信息，如果合适的表已经通过使用 **TABULATE** 指令写到了\*.TAB 文件里（所有的这些文件都必须在当前的工作路径下。).

在所有的这些模式中，必须有一种已经定义了一些表格（由在 **POST** 或 **POLY** 模块的 **ENTER\_SYMBOL** 指令输入），这些表格可以进一步的使用，通过 **TABULATE** 指令来生成\*.TAB 文件。为了使这个工作简单，两个额外的帮助符号已经给定义到了 **POST** 模块当中，而且一旦 **CREATE\_3D\_PLOTFILE** 指令被使用，它就会自动的出现.:

- **TEMP\_C**=T-273.15 摄氏温度（作为一个变量）
- **ZERO** =0 作为常量值 0.0

这两个符号可以在定义表格的时候直接使用。如下面的例子：

```
ENTER-SYMBOL TABLE demotb1 = x(fcc,ni),x(fcc,cr),TEMP_C;
ENTER-SYMBOL TABLE demotb2 = x(fcc,ni),ZERO,TEMP_C;
ENTER-SYMBOL TABLE demotb3 = ZERO,x(fcc,cr),TEMP_C;
ENTER-SYMBOL TABLE demotb4 = x(fcc,ni),x(fcc,cr),ZERO;
ENTER-SYMBOL TABLE demotbA = x(fcc,ni),x(fcc,cr),x(fcc,c);
ENTER-SYMBOL TABLE demotbB = x(fcc,ni),x(fcc,fe),x(fcc,c);
ENTER-SYMBOL TABLE demotbC = x(fcc,ni),x(fcc,cr),TEMP_C,x(fcc,c);
ENTER-SYMBOL TABLE demotbD = x(fcc,ni),ZERO,x(fcc,c),TEMP_C;
```

在 **WS** 和 **BOTH** 的模式下，**CREATE\_3D\_PLOTFILE** 指令可以把这些定义的表当作输入数据。这些定义的表格也可以用来生成不同的\*.TAB 文件通过使用 **POST** 或 **POLY** 模块下的 **TABULATE** 指令，如：

```
TABULATE demotb1 crni.TAB
```

在 **TAB** 或 **BOTH** 模式下，**CREATE\_3D\_PLOTFILE** 指令可以获取一个或多个已经生成的\*.TAB 文件作为输入数据；然而所有的这些\*.TAB 文件都必须存放在当前路径之下。

注意为了进一步简化 **TAB** 文件的使用，可以将几个\*.TAB 文件组合起来，通过使用 **Windows** 的 **DOS** 界面下的以下 **DOS** 指令：



```
Copy Ter.tab+Bin1.tab+Bin2.tab+Bin3.tab Tmp.tab
```

(或者是在其他操作系统的相似指令)，或使用文本编辑器来将各个独立的文件整和到一个文件中。这时，你可以将 Tmp.tab 文件作为单一的 TAB 输入文件的输入数据，使用 CREATE\_3D\_PLOTFILE 指令。

在以下部分，将描述 CREATE\_3D\_PLOTFILE 指令，然后会有一个关于怎样观测 3D 图表的事例。此外，还会后三个标准的关于怎样在 TCCP 里生成 \*.WRC 文件的例子，这些例子在 *TCC Examples Book* 中的例 45，46，47。

## 9.7.1 CREATE\_3D\_PLOTFILE

**描述:** POST 命令会自动的将所有的默认/已定义的图表定义信息和选择的数据点（这些点是存储和表达在某个明确的表格或 \*.TAB 文件中，并且这些数据是从当前或先前的 MAP/STEP 计算得来的。）转化为合适的格式，并生成一个用于观测的 \*.WRL 文件（虚拟现实的 Markup 代码），通过一个 VRML 阅读器。详细的信息请参考上面的介绍。

**Synopsis:** CREAT\_3D\_PLOTFILE

**跟踪提示:** 使用当前的 WORKSPACE (WS), TAB 文件 或 BOTH: 选择这三个可获得的模式的其中之一: WS, 用于从当前工作区读取表格数据, TAB, 用于从现存的 \*.TAB 文件读取表格数据, 或是 BOTH, 从当前工作区和现存的 \*.TAB 文件读取组合的表格数据。注意, 对于 BOTH 模式, 你必须得打出整个单词如 “BOTH” 或者是 “both”, 否则这个指令可能会被当成 TAB 模式。  
在 WS 和 BOTH 模式下, 所有先前定义在当前工作区的表格会被列出在屏幕上, 为了选择想要的表格数据写入到 \*.WRL 文件当中。

Table Name: <表格名称>

在 WS 和 BOTH 模式下, 给出一个可获得的表格的名称, 这个表格已经由 TABULATE 指令定义, 并且至少得含有 3 个用来在 3D 图中描述点的变量。第一列大多数情况是 X 轴的数值, 第二列为 Y 轴数值, 第三列为 Z 轴数值。一个超过三列的表格也能够给输入, 而且超过三列的那写列也会被转换成 \*.WRL 输出文件, 然而当 3D 图在用 VRML 浏览器浏览时, 他们不会被使用。

Give TAB filename: /Cancel\_to\_finish/: <file name(s)>

在 TAB 和 BOTH 模式下, 指定将包含在单个 \*.WRL 输出文件的已经准备好的 \*.TAB 文件的名称, 以便观察 3D 图。一个或着多个 \*.TAB 文件可以在同一行或是在紧接着的一行指定; 然而所有的这些文件都必须存储在当前的工作路径下。这个是相当有用的, 例如, 将一个二元系加入到一个三元图中。

在 TAB 模式下，如果在这个指令主第一次出现位置下的没有指定的\*.TAB 文件名称，指令将被终止。

可以使用另外的\*.TAB 文件来重复这条指令，直到没有给出文件名为止(*i.e* 只要按下<RETURN>键)

Output file: /3Dplot/: <file name>

指明\*.WRL 格式文件的输出文件名称（包括它的扩展名.WRL，如 FeCrNiC-a.WRL），或者按下<RETURN>接受默认的 3D 绘制文件名称，在这个文件里所有的图表定义信息和需要在 3D 图中观测的表格数据 都包含在里面。所有的数据都将自动的转换成 VRML 浏览器能识别的合适文件格式。注意，如果扩展名.WRL 在指定的文件名中缺省，那么那输出文件将只是一个简单的文本文件。

X-AXIS SCALING FROM 0.0 TO XMAX: <##>

给出 X 轴的最大值。注意，X 与 Y 轴的最大值必须一致。

Y-AXIS SCALING FROM 0.0 TO YMAX: <##>

给出 Y 轴的最大值。注意，X 与 Y 轴的最大值必须一致。

Z-AXIS SCALING, GIVEN ZMIN: <##>

给出 3D 图的最小 Z 轴值。注意在四面体图的情况下，Z 轴的最小值必须为 0.0。

Z-AXIS SCALING, GIVEN ZMAX: <##>

给出 3D 图中 Z 轴的最大值。注意在四面体图的情况下，Z 轴的最大值可以任意指定。

### Notes:

在所有的模式当中，在当前工作区保存为\*.TAB 文件的被选为输入数据的表格必须含有至少三列：第一列通常为 X 值，第二列为 Y 值第三列 Z 值。所有的在表格中超过三列的数据也将会被转换为\*.WRL 输出文件，只是他们在 VRML 浏览器观测 3D 图的时候他们不会被使用。

在 TAB 与 BOTH 模式下，所有\*.TAB 文件和当前工作区选择的表格的（第一）三列必须类似的定义，以便对于某个系统能够很好的观测 3D 图。通过类似定义，这意味着如果在从先前的计算得到某个特殊列没数据的话，那个列的值，它将被输入为 ZERO 常量，而且其他列也必须含有相同的变量(或是 ZERO)。如果所有表格的三列不是类似定义的话，虽然数据的转换可以通过这条指令完成，但是\*.WRL 输出文件将在不同的地方的，各种不同类型的数据是遇上数据阻碍。因此，使用者可以以下四个表格用来将数据（这些数据保存在\*.TAB 或上在当前工作区定义的）转换到相同的\*.WRL 文件当中：

```
ENTER-SYMBOL TABLE demotb1 = x(fcc,ni),x(fcc,cr),TEMP_C;
ENTER-SYMBOL TABLE demotb2 = x(fcc,ni),ZERO,TEMP_C;
ENTER-SYMBOL TABLE demotb3 = ZERO,x(fcc,cr),TEMP_C;
ENTER-SYMBOL TABLE demotb4 = x(fcc,ni),x(fcc,cr),ZERO;
```

他们不能够与其它用以下格式定义的表格混淆：

```
ENTER-SYMBOL TABLE demotbA = x(fcc,ni),x(fcc,cr),x(fcc,c);
```

或

```
ENTER-SYMBOL TABLE demotbB = x(fcc,ni),x(fcc,fe),x(fcc,c);
```

此外，如果你敲入一个不在当前工作路径的名称，这指令仍然可能会执行，只是，一个新的空白文件（相同的名称）也会在当前路径下生成。因此，使用者在指定\*.TAB 文件名称的时候必须小心。.

对于，TAB 和 BOTH 模式，当使用这个指令在指定完所有的细节，系统可能会给出一些提示信息。例如：

```
It is possible to combine files by:
```

```
Copy Ter.tab+Bin1.tab+Bin2.tab+Bin3.tab Tmp.tab
```

```
Processing crnic.TAB
```

```
2.64306994E-08<X< 0.491403997
```

```
0.0539233014<Y< 0.241238996
```

```
6.70927989E-07<Z< 0.000157856004
```

### 9.7.2 在 Cortona VRML Client Viewer 中浏览 3D 图形

通过命令 CREATE\_3D\_PLOTFILE 生成的\*.WRL 文件可以通过网页浏览器或者独立程序等 VRML 阅读器以三维形式浏览。用户可以从网站 [www.web3d.org](http://www.web3d.org) (Web3D 协会)中的 VRML Repository 中下载一个首选的阅读器。

在 Windows(NT/2000/XP 和 95/98/ME)环境下，推荐用户使用 Cortona VRML Client(由 ParallelGraphics 发展而来，可以从网站 [www.parallelgraphics.com](http://www.parallelgraphics.com) 下载)，说明如下：

Cortona VRML Client 是一个可插入到 MS Internet Explorer 和 Netscape Navigator 中的应用软件，它能够浏览以 VRML 方式写入的有效代码。Cortona 提供导航范例(例如 walking 和 flying)，它能够使用户通过有效代码移动该浏览器。另外，它提供了一种可以使用户和代码交互作用的机制。Cortona 的设计基于通用的分量技术，该技术促进了 3D 技术的广泛应用：从图形处理器到复杂的多用户互联网服务。Cortona VRML Client 支持 OpenGL;Direct3D;Java 语言；Splines 和 NURBS;External Authoring Interface (EAI).Client 自带基于 ActiveX Automation 技术的 VRML Automation Interface(Automation Interface 用于管理 VRML 界面)。它对硬件和系统的要求如下：

- 操作系统为 Microsoft Windows NT/2000/XP 或者 Windows 95/98/ME；
- Internet Explorer 4.0 或者以后的版本，或者 Netscape Navigator 4.0 或者以后的版本；
- CPU：Pentium 90MHz 或者更快的处理器；
- 随机存取内存(RAM)：至少 16MB；
- 剩余磁盘空间：用于存储程序文件的硬盘空间至少为 6MB；
- 显示：SVGA/256 色。推荐使用 800x600 高分辨率模式；
- 输入设备：鼠标和键盘，或者控制杆；

- 声卡：任意选择。

请用户首先从网站 [www.parallelgraphics.com](http://www.parallelgraphics.com) 下载,并且安装到 Windows 电脑或者服务器上。运行安装程序（或者在 Windows 状态下点击安装图标），程序会自动安装到目录中，例如：

C:\Program Files\Common Files\ParallelGraphics\Cortona\

在电脑或者服务器上安装成功后，用户可以点击已经生成的\*.WRL 文件，或者在 Cortona 窗口中打开,然后根据说明浏览,打印或者输出 3D 形式的 Thermo-Calc 图形。Cortona User's Guide 中提供了详细的说明。将鼠标置于 Cortona 窗口，并且点击相应的按钮来选择 Help On User's Guide 这样打开 Cortona User's Guide 窗口。

图 9-17 和图 9-18 是通过 Cortona VRML Client 浏览的两个 3D 形式的 Thermo-Calc 图形（一个是三角形图形，另外一个为四面体图形）。

在 User's Guide 的 PDF 文件中，有一个称为“Open the Cortona User's Guide ParallelGraphics Software”的特殊书签，用户可以点击它来打开 Cortona User's Guide。

对于 Windows(NT/2000/XP 和 95/98/ME),Mac,Linux 和各种 UNIX 平台，推荐用户使用 SIM VRMLView(它由 SIM-Systems in Motion 发展而来，可以从网站 [www.sim.no](http://www.sim.no) 下载)。

图 9-19 和图 9-20 是通过 SIM VRMLView 浏览的两个 3D 形式的 Thermo-Calc 图形（一个是三角形图形，另外一个为四面体图形,它们采用与图 9-17 和图 9-18 相同的\*.WRL 文件）。

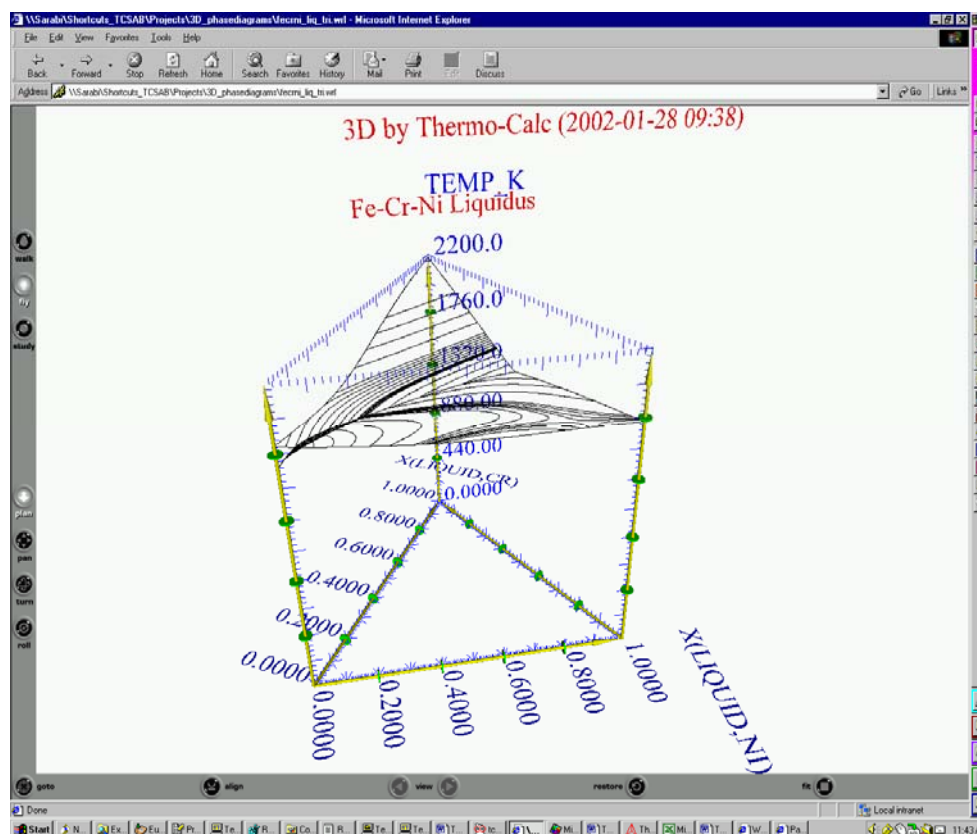


图 9-17 通过 Cortona VRML Client 浏览 3D 形式的三角形 TC 图形

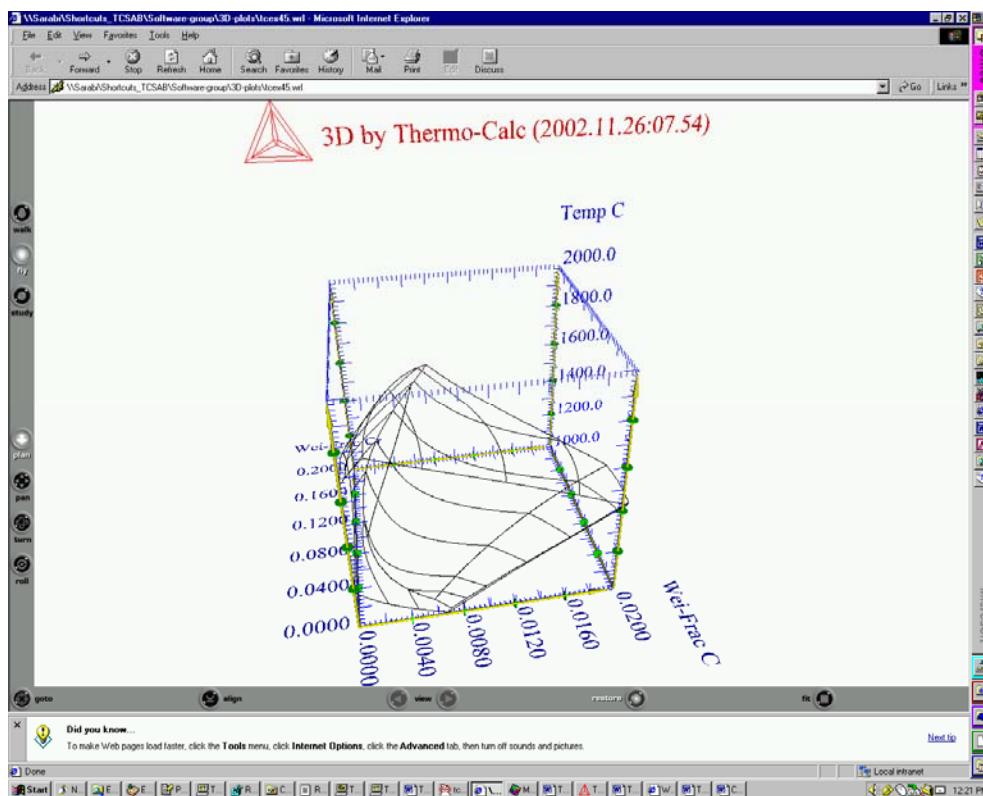


图 9-18 通过 Cortona VRML Client 浏览 3D 形式的四面体 TC 图形

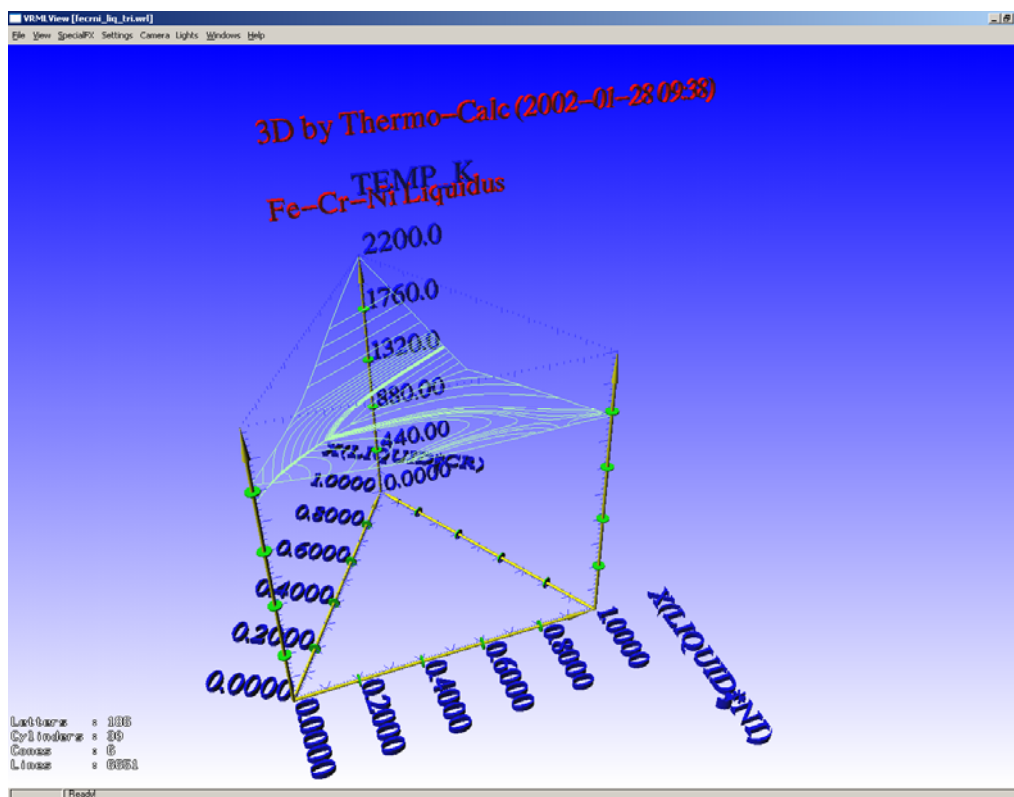


图 9-19 通过 Cortona VRML Client 浏览 3D 形式的三角形 TC 图形

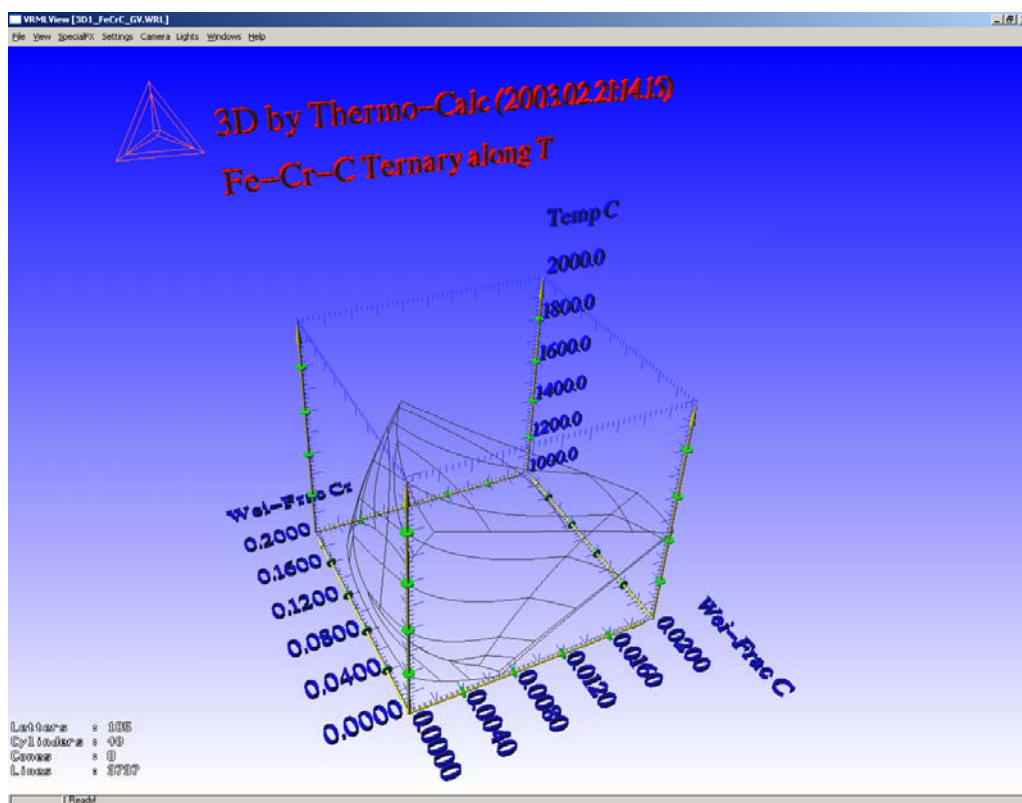


图 9-20 通过 Cortona VRML Client 浏览 3D 形式的四面体 TC 图形

## 10 一些专用模块

### 10.1 介绍

在 *Thermo-Calc* 软件系统中提到的那样，在用户界面友好的特性上的不断改进已成为 *Thermo-Calc* 软件/数据库/界面包发展的一部分。一个好的用户界面一定会提高用户在各种应用中使用这个软件/数据库/界面的效率。

*Thermo-Calc Classic(TCC)* 软件是一个交互式系统，并且用户可以通过从一个菜单上输入命令来进行控制。为使系统的命令菜单的用户界面越来越友好化，我们一直以来都在做很大努力。*Thermo-Calc* 用户界面的改进主要集中在五个方面，如表 4 中在 *Thermo-Calc* 软件系统中总结的那样。

其中的一个方面是发展一些简化模型，以能够让用户进行计算和绘制一些普通类型的相图或性质图（如：二元相图，三元相图，化学势图，Pourbaix 图等），或者进行材料加工过程的模拟（例如：凝固，多级稳态反应堆等）。下面列出了在 TCC 软件中现有的专用模块：

- |              |                      |
|--------------|----------------------|
| 1) BIN       | - 二元相图计算模块           |
| 2) TERN      | - 三元相图计算模块           |
| 3) POTENTIAL | - 化学势图计算模块           |
| 4) POURBAIX  | - Pourbaix 图和性质图计算模块 |



- 5) SCHEIL            - Scheil-Gulliver 凝固模拟模块
- 6) REACTOR        - 多级稳态反应堆模拟模块

从 TCCQ 开始, 我们已经对 SCHEIL 和 REACTOR 模型进行了大大的改进; 从 TCCR 开始, 我们已经对 TERN 模型进行了进一步的改进和增强; 具体请参考 10.5 节, 10.8 节和 10.9 节。

除 REACTOR 模型外, 在所有这些专用模型中用户只需回答一些简单的问题, 程序就可自动的解决所有计算和后处理所需的必要步骤, 这就是他们为什么有时被称为易用模型的原因。REACTOR 模型有一个命令菜单用户界面, 这与所有基本模型 (例如: SYS, TDB, GES, TAB, POLY, POST, PARROT 和 ED-EXP) 中哪些命令的相似。然而, 用于计算和模拟的软件/数据库系统不能用数据恢复系统的方法来建立, 用户必须清楚如何在软件/数据库系统的框架中定义自己的问题。

未来的版本将会建立更多这样的易用模型, 以便可以用一种标准方式来处理一些有着更广泛应用的普遍问题, 或者解决在设定计算/模拟条件和步进/绘制变量时所需更易理解的技术中的一些棘手情况。例如, PREDOM 模型将用来计算和绘制所谓的优势区相图, 而 HTCORR 模型将会用来模拟高温材料的腐蚀过程。

我们最终将在一些已有的模型 (比如 POURBAIX 和 SCHEIL) 中加入更多的选项, 而且也会对一些选项的功能进行进一步的提高和扩充, 以便使这些模型能够处理更加复杂的相互作用体系并提供更加精密的结果和表达。

这个专用模型指导书<sup>②</sup>将会对现有专用模型及其应用进行详细地描述。

## 10.2 专用模块产生或使用的文件

### 10.2.1 POLY3 文件

在执行一个简单易用的专用模型 (即, BIN, TERN, POT, POURBAIX 或 SCHEIL 模型) 时, Thermo-Calc 软件将会自动把所有有关以下定义及所设置的信息存储到当前工作目录下的一个文件中:

- 体系的定义;
- 热力学数据;
- 成分的定义;
- 参考态的设置;
- 相、成分和物种的状态设置;

---

#### ② 专用模型用户指导书修订史:

- 1993 年 10 月 REACTOR 模型的第一次发行 (由 Bo Sundman 编辑)
- 2000 年 6 月 所有其他模型的第二次发行 (由 Pingfang Shi 编辑)
- 2002 年 11 月 所有专用模型的第三次发行 (由 Pingfang Shi 编辑)
- 2004 年 6 月 SCHEIL 和 REACTOR 模型的第四次发行 (由 Pingfang Shi 编辑)
- 2006 年 5 月 TERNARY 和 SCHEIL 模型的第五次发行 (由 Pingfang Shi 编辑)



- 平衡条件说明;
- 步进/绘制变量设置;
- 初始平衡点;
- 绘制/步进计算结果;
- 第一个图的轴变量/文字设置;
- 各种符号(常量, 变量, 方程和表)的定义。

这样的文件将产生并存储在 POLY3-工作空间结构中, 因此与文件相关的扩展名总是“.POLY3”(在 PC Windows NT/2000XP 或者 Windows 95/98/ME 环境下)或“.poly3”(在 PC Linux 和 各种 UNIX 平台上)。

在自动存储的过程中, 专用模型的名字总是以默认名称出现, 例如:

BINARY/GCURVE/PFCURVE.POLY3 (BIN 模块), ISOTERN/MONOVAR/PFCURVE.POLY3 (TERN 模块), POT.POLY3 (POTENTIAL 模块), POURBAIX.POLY3 (POURBAIX 模块), 以及 SCHEIL.POLY3 (SCHEIL 模型)。用户可以在计算结束后将这种\*.POLY3 文件以另外的名字备份, 或者当有另一个工作空间(POLY3, GES5 或 PAR)被加载或程序结束后将它重命名。

所有这种\*.POLY3 文件可用标准的 POLY 模型读出, 并且可被用于其他目的的计算(在 POLY 模型中), 图象处理(在 POST 模块中), 或数据处理(在 GES 模块中)中。在 PORUBAIX 和 SCHEIL 模型中还有一些选项可以选择打开之前保存的\*.POLY3 文件(分别为 POURBAIX-或 SCHEIL-类型), 以便进行另外有相同化学体系但温度-(压强)-成分条件不同的体系, 或者根据相同的计算体系和条件绘制其他性质图。

## 10.2.2 RCT 文件

在运行 REACTOR 专用模块时, 除了那些保存在 POLY3 工作空间中的信息以外(详见 10.2.1 节), Thermo-Calc 软件会自动将所有与反应堆、分配系数定义相关的信息保存在当前工作目录下的一个文件中。这种文件将会产生并保存在 REACTOR-工作空间结构中, 并且文件的扩展名总是“\*.RCT”。

## 10.2.3 GES5 文件

在运行完一个专用模块后, 用户可以到 GES 模块里处理各种不同的数据和描述, 并把所有关于体系定义, 热力学数据和各种符号(常量, 变量, 方程和表)保存到当前工作目录下的一个\*.GES5 文件中。该专用模块名可以以默认名称出现[例如: BINARY.GES5, TERNARY.GES5, POT.GES5, POURBAIX.GES5, SCHEIL.GES5, 和 REACTOR.GES5], 或者程序会要求用户输入一个自定义的名称。用户可以将这种 GES5 文件以另外的名字备份, 或者如果有另一个工作空间(POLY3, GES5 或 PAR)被加载或该程序已结束时将它重命名。所有的这些 GES5 文件可由标准的 GES 模块读出并可用于其他目的。

## 10.2.4 MACRO 文件

一个专用模型的 MACRO 文件(默认扩展名为\*.LOG 或 \*.TCM)可通过使用 SYS-模块命令 SET-LOG-FILE, 或使用一个文字编辑器书写各种命令行和应答行来创建。

用户应记住, 在为专用模型(BIN, TERN, POTENTIAL, POURBAIX 或者 SCHEIL)创建的 MACRO 文件中, 所输入的模块命令(如, go BIN, go TERN, go POT, go POUR 或者 go SCH)和 SET-INTERACTIVE 命令 (对于 POURBAIX-模块的 MACRO 文件)或普通的 POST 命令 (对于一个 BIN-/TERN-/POT-/SCHEIL-模块的 MACRO 文件)之间的每一行都是一个相应问题的答案。因此, 在模型计算和图象处理中一个空行总是一个相应问题的默认回答。所以, 注释行 [在字符@@之后]和 MACRO-文件 标准-控制说明 [MACRO-FILE-OPEN <另外一个文件名>]都不能在这样的应答行中插入。暂停-控制符号[@&]或半交互式输入-控制符号[@?]也不能插入。否则, 模块就不能正常地继续运行 MACRO 文件。

然而, REACTOR 模块的 MACRO 文件没有这种特点, 所以用户可以在任意位置编写所有类型的合法的注释行或字符, 就像在所有用于计算和后处理的各种基本模块中运行的标准 MACRO 文件一样。

## 10.3 与专用模型的相互作用

用户可以从 SYS (System Utility)模块及所有存在 GOTO\_MODULE 命令的模块里 (例如, TDB, GES, TAB, POLY 或 PARROT 模块)直接进入这种专用模型。例如, GO BIN 命令将转换到 BIN 模块, 来计算一个二元体系的相图或吉布斯自由能曲线。

如上面提到的那样, 命令行的结构不适用于这五个专用且简单易用模型(如, BIN, TERN, POT, POURBAIX 和 SCHEIL); 相反, 用户只需回答几个简单的问题以便进行自动的计算和图象的生成。

如果是从 SYS 模块进入, 那么那些五个专用模中的四个 (即: BIN, TERN, POTENTIAL 和 SCHEIL)通常在 POST 模块中结束, 以便用户可对所做图的外型 (比如设置曲线标签选项, 加文字说明, 转换坐标类型或图的类型, 改变坐标范围来放大某一区域, 去除无关相, 加实验数据点, 制作实验数据文件, 生成硬件备份等) 进行进一步的调整和修改。然而, BIN, POTENTIAL 和 SCHEIL 模型也可以在进入这个专用且简单易用的模块之前的模块中结束; 在这种情况下, 如果当前工作空间还未被改变, 用户可直接进入 POST 模块 (经由 POLY 模块) 对所绘制的图的外形进行必要的调整和修改。

不管它是从哪里被访问的, POURBAIX 模块总是在 SYS 模块中结束。作为该模块这样一个独一无二的特性, 用户可以在该模块中直接且简单地对所绘制的 Pourbaix 图或其它类型的图进行调整和修改。通过一个选项, 用户甚至可以在不影响 POURBAIX 模型的情况下与 POST 模块交流以对图象进行进一步的完善, 以便用户可立即对图作出修改。

由于 REACTOR 模块是按基本模型相同的方式建立的, 用户需通过各种命令与程序一步步地交互。这些命令和所有基本模块(SYS, TDB, GES, POLY, POST, PARROT 和 ED-EXP 模块)是相似的。

在接下来的六节中, 我们将详细地阐述每一个专用模型与用户的相互作用。用户可以参考 \TCEx\ 部分和 TCCR 实例集中与这些模型的相关 MACRO (\*.TCM) 文件。

## 10.4 BIN 模块

### 10.4.1 BIN 模块介绍

二元相图广泛应用于各种材料设计和工程, 材料化学, 化学, 地球化学, 环境化学, 等等中。在上个世纪人们对二元合金体系进行了大量的实验研究, 并且这些所获得的二元相图对合金的发展显得尤为重要。由 ASM International 发行的, 基于实验数据和一些拓扑方法的“*ASM Binary Alloy Diagrams*”的系列丛书已经被材料研究与发展行业广泛应用。

然而, Thermo-Calc 软件/数据库/界面中所采用的先进计算热力学方法提供了一个更加精妙的方式来研究铁和合金的相图和一些其它的热力学性质, 以及许多工业和自然材料(陶瓷, 无机材料, 有机物质, 聚合物, 矿物, 原子能物质等等)。正如在 *Thermo-Calc Software System* 文档和最近的一些出版物中描述的那样, 通过应用一些完善的热力学模型和数据库, 强大的计算和模拟工具以及简单易用的模块, 我们就可以精确地计算和绘制所有类型的相图和性质图。

按照常规, 我们可以非常容易地在 TCC 中计算和绘制多种类型的二元体系的相图和性质图。这可通过运行相应的命令行结构模块实现, 即: 在 TDB 模块中定义二元系并获得热力学数据, (如有必要) 在 GES 模块里处理相的描述和参数, 在 POLY 模块中设置计算条件和绘制变量, 并在 POST 模块中确定图的外形。按照这种方式, 用户还可以计算和绘制一个伪二元系的相图(或叫做准二元系, 即在一三元系中某个组元具有固定的活度或化学势, 如: 在一定的  $O_2$  的活度下  $CaO-SiO_2$  体系, 当液相氧化物  $FeO$  和液相  $Fe$  平衡时  $Ca-Fe-O$  体系, 以及在碳的活度一定时的  $Fe-Cr-C$  体系)。当然, 在二元相图或性质图的计算和图象处理中(比如, 在 \TC EX\ 部分和 **TCCQ 实例集** 中的例 TCEX4.TCM, TCEX16.TCM 和 TCEX17.TCM), MACRO 文件的应用会使这种命令行结构的计算和图象处理大大简化和高效。

为使用户界面更加简单和直接, 从 TCCL 版本开始, 我们就建立了一个专用且简单易用的、名为 **BIN Module**; 以及在 TCW 软件中的 **Binary Phase Diagram Module**。BIN 模块由一系列基于问题行的结构构成, 且用户只需提供一些合适的答案。该模块可以直接自动地计算和绘制二元合金体系的相图(成分 vs. 温度)或者吉布斯自由能曲线(各相的吉布斯自由能 vs. 温度)或相分数的绘制(各种稳定相的分数 vs. 温度)。此外, 利用 BIN 模型的计算结果, 我们可以在 POST 处理器得到许多其它类型的相图和性质图。

如下所述, BIN 模型的过程非常简单, 只要几步就可完成一个二元体系的相图, 或吉布斯自由能曲线或相分数图的计算和图象处理。

#### 第一步: 选择合适的溶体数据库

该模块需要一个合适的溶体数据库以获得所有的热力学数据。基本上, 端元性质, 二元相互作用参数以及体系所有的评估信息(至少要包括将要计算和绘制的二元体系的信息)都包括在该数据库中。这种溶体数据库可基于一个普通的溶体数据库(这就表明该数据库也可包括三元或更高组元的相互作用参数), 但通常是专为 BIN 模块而设计的(详见 第 10.4.2 节)。用户也可转换到满足进行 BIN 模型计算基本要求的自定义溶体数据库。

#### 第二步: 指定两个元素

必须给出当前所选数据库中包含的第一个和第二个元素的名字(写在单独一行中且两个之间留一空格或分单独两行)。

#### 第三步: 选择一个主选项

程序将询问(三个主选项中)用户是否要对已定义好的二元体系的相图(默认为 P), 相分数绘制(F), 吉布斯自由能曲线, 或(G)活度图(A)的计算和绘制。

如果选择主选项 G 或 A, 程序将进一步要求用户输入一个特定温度 (°C) 来计算在该温度下二元结合处所有成分范围内的所有可能相的吉布斯自由能曲线[用 GMR (\*) 表示], 或每个二元化合物的活度曲线[用 ACR (\*) 表示]。

如果选择主选项 F, 用户必须以摩尔分数的形式给出二元结合处的第二个组元的成分, 以便可以计算体系中所有稳定相在某一温度区间、该成分处的相分数。

#### 第四步: 自动计算并绘制所需的图

该模块将自动执行以下任务:

- 从所选的数据库中获得所有的热力学描述和信息;
- 为所需的计算定义初始平衡条件;
- 设定绘图或步进变量 [对于主选项 P, 通常将第二个元素的摩尔分数作为第一个绘图变量, 且其范围为 0.0 到 1.0; 将温度条件 (K) 作为第二个绘图变量, 且其范围为一个合理的从低到高的变化的温度区间; 对于主选项 G 和 A, 通常将第二个元素的摩尔分数作为步进变量, 且其范围从 0.0 到 1.0 的摩尔分数; 对于主选项 F, 通常将温度条件 (K) 作为步进变量, 且其范围为一合理的最小值和最大值的区间];
- 计算初始点;
- 进行绘图或步进的计算;
- 在屏幕上绘出最初想要得到的图。这是所选的主选项(P 或 G 或 A 或 F)的默认输出, 并且它的坐标轴变量通常如下设置:
  - 对于主选项 P:
 

|     |                       |               |
|-----|-----------------------|---------------|
| X = | X(2 <sup>nd</sup> E1) | 连接处第二个元素的摩尔分数 |
| Y = | T-C                   | 温度 (°C)       |
  - 对于主选项 G:
 

|     |                       |                      |
|-----|-----------------------|----------------------|
| X = | X(2 <sup>nd</sup> E1) | 连接处第二个元素的摩尔分数        |
| Y = | GMR (*)               | 所有可能相的吉布斯自由能 (J/mol) |
  - 对于主选项 A:
 

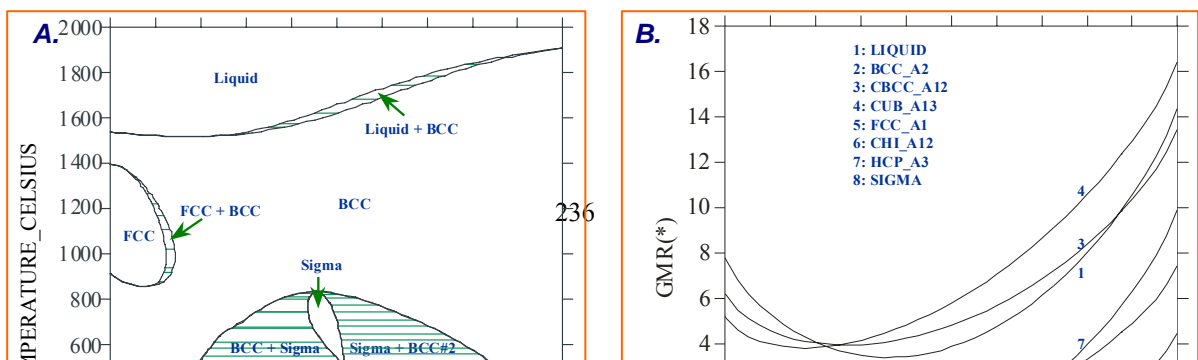
|     |                       |               |
|-----|-----------------------|---------------|
| X = | X(2 <sup>nd</sup> E1) | 连接处第二个元素的摩尔分数 |
| Y = | ACR (*)               | 所有组分的活度 (无量纲) |
  - 对于主选项 F:
 

|     |         |               |
|-----|---------|---------------|
| X = | T-C     | 温度 (°C)       |
| Y = | BPW (*) | 体系中所有稳定相的质量分数 |

默认的设置也适用于坐标轴类型, 坐标轴文本, 坐标轴缩放系数, 曲线标签选项 (对于主选项 P 是 N 或 E, 对于主选项 G 或 F 是 F), 颜色和粗细 (对文本和轴, 零变量平衡点, 共轭线以及溶解度线等其它线条而言), 字体和大小 (对于标签和数字而言), 图表标题 (由所选数据库名和二元结合处的元素名组成), 等等。

图 10-1 阐述了 Fe-Cr 二元系的由 BIN 模块生成的三个图形的例子, 其中每个图形对应三个主选项中的一个, 分别是: P (相图), G (吉布斯自由能曲线), A (活度曲线) 以及 F (相分数绘制)。注意: 下面的这些图已经通过下一步(见第五步)进行了细微的修正。

与此同时, 一个 POLY3 文件将会自动存储在当前的工作目录下, 对于主选项 P 而言其默认名是 ISOTHERM.POLY3, 对于主选项 G 和 A 是 GCURVE.PLOY3, 对于主选项 F 是 PFCURVE.POLY3。这些 PLOY3 文件可在标准的 PLOY 模块重新打开, 以便在 POST 模块中对其它相图或性质图作进一步的图象处理, 或者在 PLOY 模块中直接进行其它类型的绘制或步进计算。注意: 在用相同的主选项来做另外一个 BIN 模型的计算之前一定要将这种文件复制 (如果这个 PLOY3 工作空间仍在进行) 或重命名 (如果这个 PLOY3 工作空间已经停止) 到另外一个文件夹下。



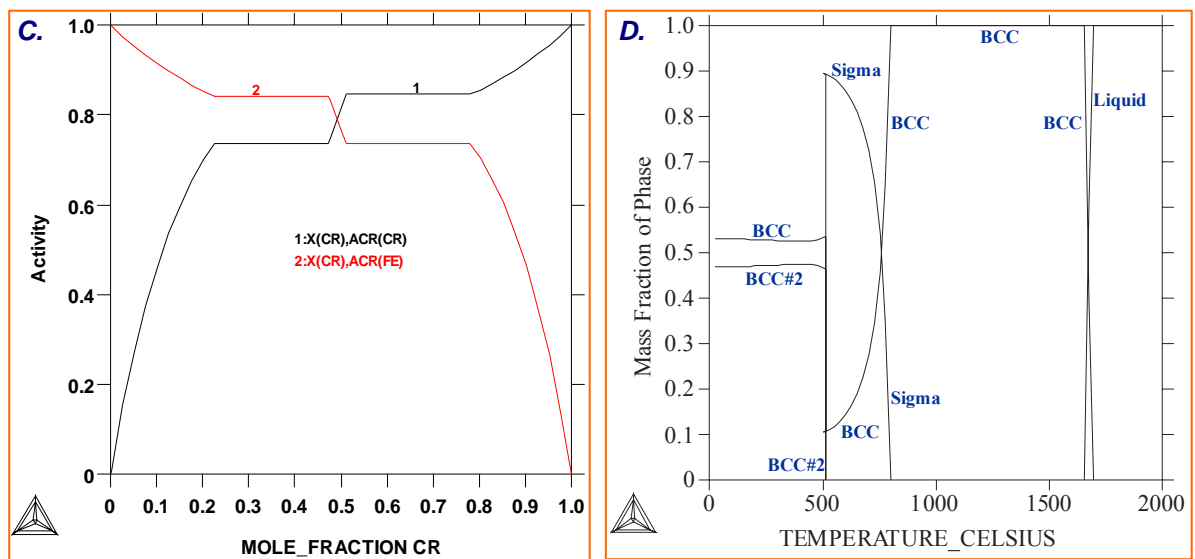


图 10-1. 由BIN 模型自动计算的Fe-Cr 二元体系的相图, 吉布斯自由能曲线和相分数图, (输出图形分别对应P, G 和 F 三个主选项).

- A 列出了 Fe-Cr 二元相图 [Cr 的摩尔分数 vs. 温度 (°C)];
- B 画出了整个 Fe-Cr 二元连接点在 600°C 时所有可能相的吉布斯自由能曲线 [ $\Delta G$ , GMR (\*) in J/mol];
- C 显示了 Fe-Cr 二元结合点在 600°C 时两个体系组元的活度曲线 [i.e., ACR (\*)];
- D 绘出了当 Cr 在二元结合点处的摩尔分数为 0.55 时, 稳定相随温度(°C)变化的质量分数[i.e., BPW (\*)]

#### 第五步: 进一步精修所生成的相图或吉布斯自由能曲线或相分数图

最后, 该模块总是在标准的 POST 模块中结束, 以便按用户意愿来进行进一步的图象处理及自动地生成(最初的)图表。图 10-1 中所示的图已经在这一步进行了精修。

现在, 用户可以应用 POST 模块所有的命令, 修改和/或增加坐标轴类型, 坐标轴文本, 坐标轴缩放系数和方式, 坐标轴刻度线状态, 共轭线状态, 曲线标签选项, 相区或性质标签文本, 颜色和粗细, 图形的标题和子标题, 坐标轴长度, 图的大小等等来精修图形, 。

用户也可以重新设置组分的参考态, 在图形中去除或重新增加相, 在所计算的图上加实验数据点, 改变绘制选项及定义不同的绘图模式。

经过这样进一步的图象处理, 用户可以选择将生成的图在与计算机相连的打印机上打印出来, 或将图形保存为图形文件(使用合适的字体和大小), 或将图形转存到图象设备中(同时



保存为一个图象文件)，或将生成和修改过的图形完整的曲线的 x-/y-坐标、线和点的以及一些图象设置输出到一个\*.EXP 文件。有关 POST 命令的详细说明请见第 9 章。

### 第六步：进一步绘制一些其它类型的相图或性质图

如果用户需要, 他/她可采用相同的计算结果(保存在当前的运行中或重新打开的 BINARY.POLY3, GCURVE.PLOY3, PFCURVE.POLY3 文件, 或其它 BIN-模型的 \*.POLY3 文件复件), 在 POST 模块监控器中生成一些其它类型的相图或性质图。用户可以为新的图形定义合适的坐标变量, 并像第五步中所描述的那样采用所有的 POST 模块命令来重新定义和精修图形。

用户可通过选择合适的平衡量来设置坐标变量，其中这些平衡量可以是状态变量（强度变量、能量变量、成分和结构变量之一）或导出变量。用户还可以输入一些额外的符号（方程或变量或表）来用作新的坐标变量或用于制表。

通常地, 对应于一个绘制变量 (如果计算由主选项 P 控制), 或步进变量 (如果是主选项 G 或 A 或 F) 的变量, 必须要被选择作为独立坐标变量 (对应于主选项 P 的图形的 x- 或 y-坐标, 对应主选项 G 或 A 或 F 图形的 x-坐标)。如果一个成分变量被用来作绘制变量, 二元结合点中两个元素 (组分) 中的任意一个的成分或活度 (摩尔分数, 摩尔百分数, 质量分数或活度) 可被用作独立坐标轴变量; 如果温度已作为步进变量, T (K) or T-C (°C) 可作为独立轴变量。

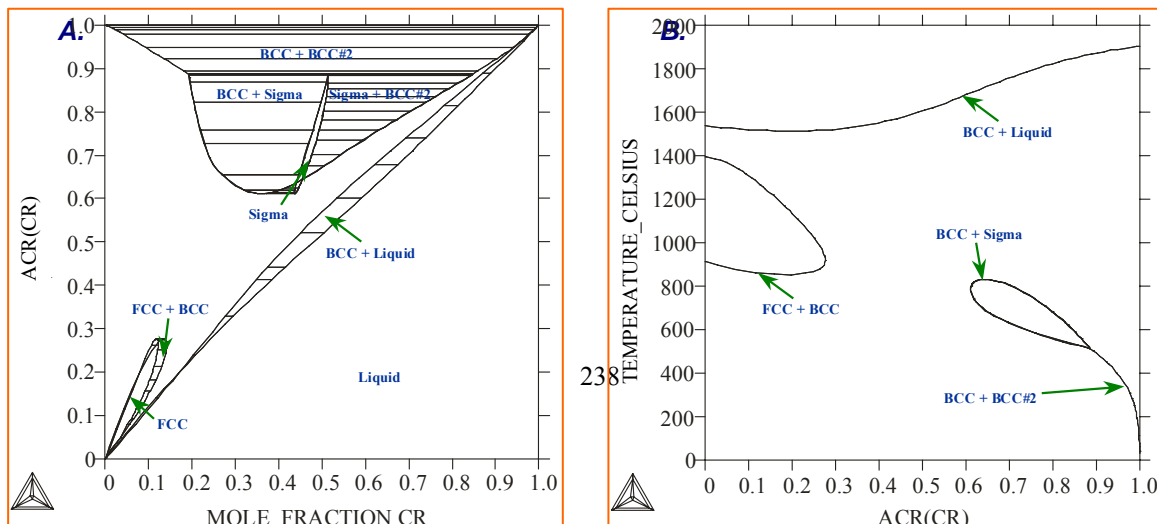
至于定义第二个坐标变量（Y-轴，或当 Y-轴采用在主选项 P 计算中的一个绘制变量作为独立坐标变量时的 X-轴，），用户可选择其它合适的平衡量。如果要在 POST 模块里绘制三角形图，或者如果要应用合适的图形软件生成一个三维图，用户甚至可以应用定义第二个变量类似的办法来定义第 3 个坐标变量（Z-轴）。

以上可总结如下:

- 对主选项 P: X/Y = C/A(E1)      结合处某一个元素的成分/活度  
或 T/T-C      温度 (K 或 °C)  
X/Y/Z = 体系或成分或相的任意平衡量; 对应它沿相界的变  
量 (共轭线和零变量点)
- 对主选项 G/A: X = C/A(E1)      结合处某一元素的成分/活度  
Y/Z = 体系或成分或相的任意平衡量
- 对主选项 F: X = T/T-C      温度 (K 或 °C)  
Y/Z = 体系或成分或相的任意平衡量

欲知详情，请参见第 9 部分 (后处理模块, *POST*).

图10-2 给出了几个这种非默认图形的例子，它们是用 Fe-Cr 二元系保存为 POLY3 文件的 BIN 模型处理而绘制的，分别由三个主选项 P（相图），G（吉布斯自由能曲线），A（活度曲线）和 F（相分数图）生成。



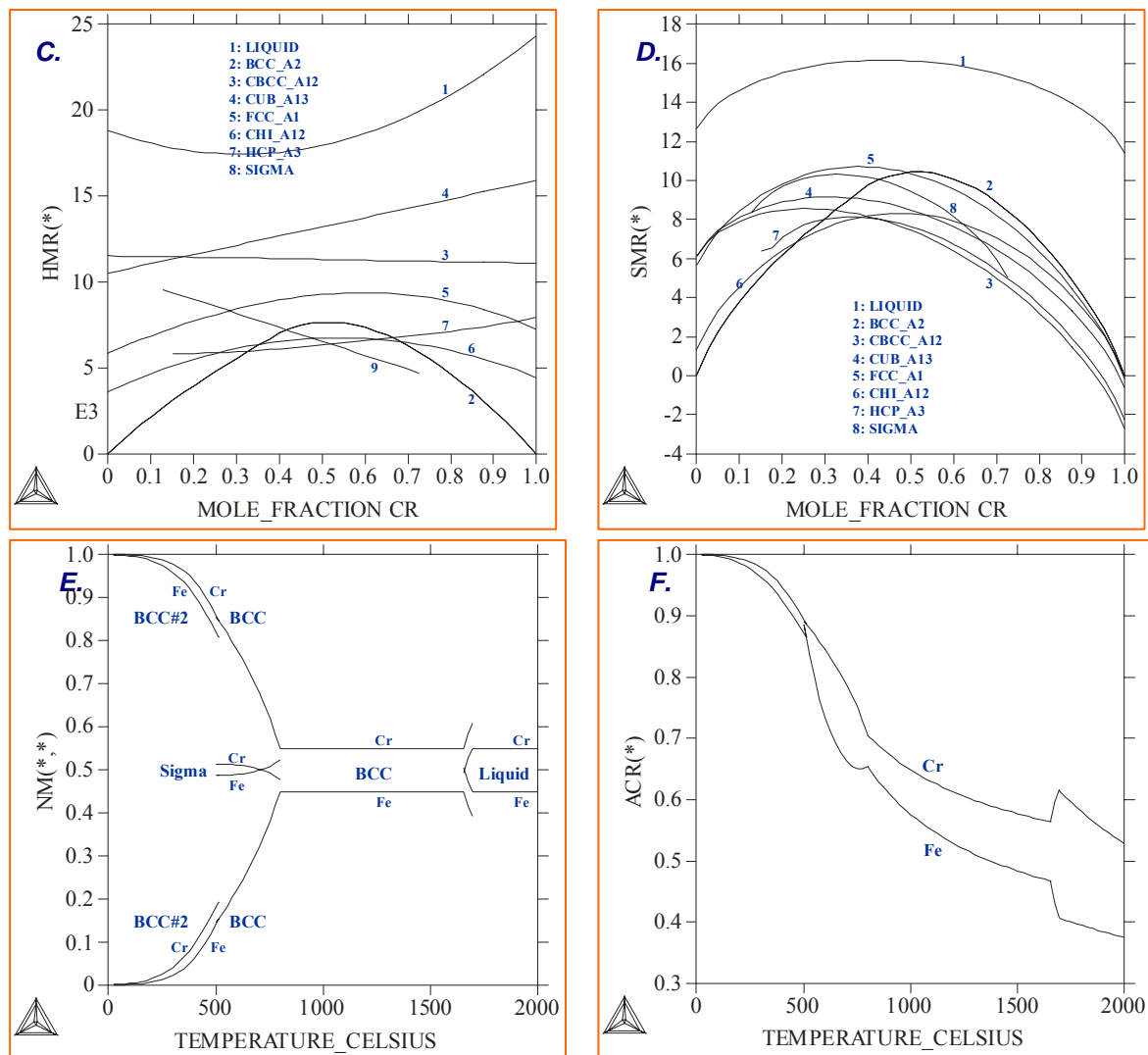


图 10-2. 基于主选项 (P, G 和 F) 的计算结果, 由 POST 模块生成的 Fe-Cr 二元系的其它类型的相图或性质图,

A 和 B 表示 Cr 组分 的活度 [ACR(Cr)] 随体系成分 [Cr 的摩尔分数] 或温度 [°C] 沿相界的变化; C 和 D 画出了 600°C 时在整个 Fe-Cr 二元结合处所有可能相的焓和熵 [HMR(\*), J/mol 和 SMR(\*), J/mol/K]; E 和 F 画出了当 Cr 在结合处的摩尔分数为 0.55 时, Cr 和 Fe 在稳定相中的摩尔分数 [NR(\*,\*)] 和组分 Cr 和 Fe 的活度 [ACR(\*)] 随温度 (°C) 的变化曲线。

注意: 由于主选项 P 计算(保存在默认 BINARY.POLY3 文件)是通过设置两个自由绘制变量 (二元熔体的温度和成分) 来进行的, 用户通常可以将计算结果以各种相图和性质图展示出来。一个二元体系的相图可用温度 (°C 或 K) 作为一个坐标变量, 另外一个可用体系成分 (其中一个元素即: 组分的摩尔分数 M-F, 或 摩尔百分数 M-P, 或 重量分数 W-F, 或 重量百分数 W-P) 或 依赖成分的状态变量 (比如某一组分的活度, AC or ACR)。如果仅有其中的一个坐标轴采用了这种



变量, 而另一个采用体系或组分的特殊平衡性质, 那么绘出的就是一个性质图。在这种性质图中, 曲线/直线/点只代表这种特殊平衡性质随相界 (以及共轭线和零变量平衡点) 的变化。

此外, 那些已经定义好的热力学性质和平衡量 (例如: 标准状态变量或表中的性质和变量) 可沿绘制变量 (主选项 P) 或步进变量 (主选项 G 或 A 或 F) 进行制表或绘图。

## 10.4.2 专用 BIN-模块数据库的结构

如上所述, TCC 软件中的 BIN 模块 (以及 TCW 软件中的二元相图模块) 会自动从所切换的合适的溶体数据库中获取所有的热力学数据。除了各相的标准热力学性质之外, 二元相互作用参数以及所有评估体系的信息 (至少对于将要计算和绘制的二元体系) 都必须从此数据库中得到。通常地, 这种溶体数据库是专为 BIN 模型设计的, 但它也可是一个普通的溶体数据库 (表明其中也可包括三元或更高组元的相互作用信息), 及一额外的 ASSESSED\_SYSTEM 信息块 (见下文)。用户也可切换到自定义、能满足 BIN 模块计算基本要求的溶体数据库中。

以前, 软件中有 2 个专门设计的二元合金溶体数据库, 用户可在 TCC 的 BIN 模块 (以及 TCW 软件中的二元相图模块) 中直接使用。从 TCCR/TCW4 开始, 一个新发行的数据库, TCBIN (TC 二元合金溶体数据库, 第一版), 包含在 TCCR/TCW4 软件, 可免费使用; 然而, 与其它发行的数据库不同, *TCBIN* 只能以加密数据库形式发行, 且只能在 *BIN* 模块 (在 *TCCR* 中) 或者二元相图模块 (在 *TCCW4* 中) 中使用。

这三个专用 BIN 模块数据库的详细描述可在它们对应的数据库描述窗口中找到 (在 *Thermo-Calc 数据库指导书*, 或者在我们的网站 [www.thermocalc.com/Products/Databases\\_TCC\\_TCW.html](http://www.thermocalc.com/Products/Databases_TCC_TCW.html)) 中找到。我们也在下面对它们作了简要的说明:

### ➤ **PBIN** *TC Public Binary Alloy Solutions Database* (之前称为 BIN97)

- 与 TCC 和 TCW, TCC\_Demo/TC4A, TCW-Demo/TC4U 一起免费发行
- 包含 21 种元素 (Ag-Al-C-Co-Cr-Cu-Fe-Mn-Mo-N-Nb-Ni-O-Pb-S-Si-Sn-Ti-V-W-Zn)
- 包含以下 35 个二元体系 (包含液相和固溶相, 以及一些化学计量相)

---

|       |       |       |       |       |       |      |       |       |      |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|------|-------|-------|------|
| Al-Cu | Al-Ni | Al-Zn | C-Co  | C-Cr  | C-Fe  | C-Mn | C-Mo  | C-Nb  | C-Ni |
| C-Si  | C-V   | C-W   | Co-Cr | Co-Fe | Co-Mn | Cr-N | Cr-Fe | Cr-Mo | Cr-W |
| Cu-Fe | Cu-Zn | Fe-Mn | Fe-Mo | Fe-N  | Fe-Nb | Fe-O | Fe-S  | Fe-V  | Fe-W |
| Mo-Nb | Mo-W  | N-Ti  | N-V   | Pb-Sn |       |      |       |       |      |

---

### ➤ **SBIN2** *SGTE Binary Alloy Solutions Database (SSOL2 的一个子数据库)* (之前称为 BIN)

- 只与原来的 SSOL2/SSOL4 授权数据库一起发行
- 包含 83 种元素 (与 *SGTE SSOL Solutions Database, version 2* 相同)
- 包含以下 106 个二元体系 (包括液相和固溶相, 以及一些化学计量相)

---

|       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Ag-Au | Ag-Cu | Ag-Ge | Ag-Pb | Ag-Si | Ag-Sn | Al-As | Al-Bi | Al-Ca | Al-Fe |
| Al-Ga | Al-Ge | Al-In | Al-Mg | Al-Mn | Al-Pb | Al-Si | Al-Sn | Al-Zn | As-Ga |
| As-Ge | As-In | Au-Bi | Au-Ge | Au-In | Au-Pb | Au-Sb | Au-Si | Au-Sn | Au-Tl |
| Bi-Cu | Bi-Ga | Bi-Ge | Bi-In | Bi-K  | Bi-Sn | Bi-Tl | Bi-Zn | C-Co  | C-Cr  |
| C-Cu  | C-Fe  | C-Mn  | C-Mo  | C-Nb  | C-Ni  | C-Pb  | C-Ti  | C-V   | C-W   |
| Ca-Fe | Co-Cr | Co-Fe | Co-Mn | Co-Ni | Cr-Cu | Cr-Fe | Cr-Mo | Cr-N  | Cr-Ni |
| Cr-V  | Cr-W  | Cs-K  | Cs-Na | Cs-Rb | Cu-Fe | Cu-Mg | Cu-Ni | Cu-P  | Cu-Pb |

---

|       |       |       |       |       |       |         |       |         |       |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|---------|-------|---------|-------|
| Cu-Si | Cu-Tl | Cu-Zn | Fe-Mn | Fe-Mo | Fe-N  | Fe-Nb   | Fe-Ni | Fe-Pb   | Fe-S  |
| Fe-Si | Fe-Ti | Fe-V  | Fe-W  | Ga-Ge | Ga-In | Ga-Pb   | Ga-Sn | Ga-Zn   | Ge-In |
| Ge-Pb | Ge-Sb | Ge-Sn | Ge-Tl | Ge-Zn | K-Rb  | (Mg-Sb) | Mg-Si | (Mg-Sn) | Mo-N  |
| Mo-Nb | Mo-Ni | Mo-W  | N-Ni  | N-Ti  | Na-Rb | Ni-W    | Pb-Si | Pb-Sn   | Sb-Sn |
| Si-Mo | Si-Sn | Si-Ta | Si-Ti | Si-W  | Si-Zn |         |       |         |       |

➤ **TCBIN** *TC Binary Alloy Solutions Database* (只有加密形式)

- 与 TCCR and TCW4 软件一起免费发行]
- *TCBIN* 通常且只能以加密数据库形式发行, 并且只能在 *BIN* 模块 (在 *TCCR* 中) 或者二元相图模块 (在 *TCW4* 中) 中使用。
- 包含 67 种元素
- 包含以下 360 个二元体系(包括液相和固溶相, 以及一些化学计量相)

|       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Ag-Al | Ag-Au | Ag-Bi | Ag-Cu | Ag-Ge | Ag-In | Ag-Ir | Ag-Mg | Ag-Os | Ag-Pb |
| Ag-Pd | Ag-Pt | Ag-Rh | Ag-Ru | Ag-Sb | Ag-Si | Ag-Sn | Ag-Ti | Ag-Tl | Ag-Zn |
| Ag-Zr | Al-As | Al-Au | Al-B  | Al-Bi | Al-C  | Al-Ca | Al-Ce | Al-Co | Al-Cr |
| Al-Cu | Al-Fe | Al-Ga | Al-Ge | Al-In | Al-Li | Al-Mg | Al-Mn | Al-Mo | Al-N  |
| Al-Nb | Al-Nd | Al-Ni | Al-O  | Al-P  | Al-Pb | Al-Sb | Al-Si | Al-Sn | Al-Ta |
| Al-Ti | Al-V  | Al-W  | Al-Y  | Al-Zn | Al-Zr | As-Au | As-Cu | As-Fe | As-Ga |
| As-Ge | As-In | As-P  | As-Sb | Au-Bi | Au-C  | Au-Cr | Au-Cu | Au-Ge | Au-In |
| Au-Pb | Au-Pd | Au-Rh | Au-Ru | Au-Sb | Au-Si | Au-Te | Au-Tl | B-C   | B-Co  |
| B-Cr  | B-Fe  | B-Hf  | B-Mg  | B-Mo  | B-N   | B-Nd  | B-Ni  | B-SC  | B-Si  |
| B-Ti  | B-V   | B-W   | Ba-Cu | Ba-Eu | Ba-Sr | Ba-Y  | Bi-Cu | Bi-Ga | Bi-Ge |
| Bi-In | Bi-K  | Bi-Mg | Bi-O  | Bi-Pb | Bi-Sb | Bi-Si | Bi-Sn | Bi-Tl | Bi-Zn |
| C-Co  | C-Cr  | C-Cu  | C-Fe  | C-Hf  | C-Mn  | C-Mo  | C-Nb  | C-Ni  | C-Pb  |
| C-Si  | C-Ta  | C-Ti  | C-V   | C-W   | C-Y   | C-Zr  | Ca-Cu | Ca-Mg | Ca-Pb |
| Ca-Si | Ca-Zn | Cd-Ga | Cd-Ge | Cd-Hg | Cd-In | Cd-Pb | Cd-Sb | Cd-Sn | Cd-Te |
| Cd-Zn | Ce-Mg | Co-Cr | Co-Cu | Co-Dy | Co-Fe | Co-In | Co-Mn | Co-Mo | Co-N  |
| Co-Nb | Co-Ni | Co-Pd | Co-Pt | Co-Si | Co-Ta | Co-Ti | Co-V  | Co-W  | Cr-Cu |
| Cr-Mg | Cr-Mn | Cr-Mo | Cr-N  | Cr-Nb | Cr-Ni | Cr-P  | Cr-Pd | Cr-Pt | Cr-Si |
| Cr-Sn | Cr-Ta | Cr-Ti | Cr-V  | Cr-W  | Cr-Zn | Cr-Zr | Cs-K  | Cs-Na | Cs-Rb |
| Cu-Fe | Cu-Ge | Cu-In | Cu-Li | Cu-Mg | Cu-Mn | Cu-N  | Cu-Nb | Cu-Ni | Cu-O  |
| Cu-P  | Cu-Pb | Cu-S  | Cu-Sb | Cu-Si | Cu-Sn | Cu-Sr | Cu-Ti | Cu-Tl | Cu-V  |
| Cu-Y  | Cu-Zn | Cu-Zr | Dy-Er | Dy-Ho | Er-Ho | Er-Tb | Fe-Mg | Fe-Mn | Fe-Mo |
| Fe-N  | Fe-Nb | Fe-Nd | Fe-Ni | Fe-O  | Fe-P  | Fe-Pb | Fe-Pd | Fe-Pr | Fe-Pt |
| Fe-S  | Fe-Si | Fe-Sn | Fe-Ti | Fe-V  | Fe-W  | Fe-Zn | Fe-Zr | Ga-Ge | Ga-Hg |
| Ga-In | Ga-P  | Ga-Pb | Ga-Sb | Ga-Sn | Ga-Te | Ga-Zn | Ge-In | Ge-Pb | Ge-Sb |
| Ge-Si | Ge-Sn | Ge-Te | Ge-Tl | Ge-Zn | H-Nb  | H-Zr  | Hf-Ta | Hf-Si | Hf-Ti |
| Ho-Tb | In-P  | In-Pb | In-Sb | In-Si | In-Sn | In-Zn | Ir-Pd | K-Rb  | La-Ni |
| Li-Mg | Li-Zr | Mg-Mn | Mg-Ni | Mg-O  | Mg-SC | Mg-Si | Mg-Y  | Mg-Zn | Mg-Zr |
| Mn-Mo | Mn-N  | Mn-O  | Mn-Pb | Mn-Si | Mn-Ti | Mn-V  | Mn-Y  | Mn-Zr | Mo-N  |
| Mo-Nb | Mo-Ni | Mo-Si | Mo-Ta | Mo-Ti | Mo-W  | N-Nb  | N-Ni  | N-Ta  | N-Ti  |
| N-V   | N-W   | Na-Rb | Nb-Ni | Nb-O  | Nb-Ti | Nb-V  | Nb-W  | Nb-Zr | Nd-Pr |
| Nd-Sb | Ni-P  | Ni-Pd | Ni-Si | Ni-Ta | Ni-Ti | Ni-V  | Ni-W  | Ni-Y  | Ni-Zr |

|       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| O-Pb  | O-Sn  | O-Sr  | O-Ti  | O-Y   | O-Zr  | P-Sb  | P-Si  | Pb-Pd | Pb-Sb |
| Pb-Si | Pb-Sn | Pb-Tl | Pb-Zn | Pd-Ru | Pd-Sn | Pr-Sb | Pt-Rh | Pt-Ru | Re-Ta |
| Re-W  | Sb-Si | Sb-Sn | Sb-Zn | Se-Sn | Se-Te | Se-Tl | Si-Sn | Si-Ta | Si-Te |
| Si-Ti | Si-U  | Si-V  | Si-W  | Si-Y  | Si-Zn | Si-Zr | Sn-Ti | Sn-Zn | Sn-Zr |
| Ta-Ti | Ta-V  | Ta-W  | Ta-Zr | Te-Zn | Ti-V  | Ti-W  | Ti-Zr | V-Zr  | Y-Zr  |

就像在标准的溶体数据库中，一个专门设计的 BIN-模块溶体数据库必须包含各种有关元素，物种和相，相描述，常量，元素、端元（化学计量相）和溶体相的二元相互作用的热力学方程和参数，类型定义，默认定义，参考态等的信息。

由于没有可以从已定义二元体系中拒绝和恢复相的选项，因此我们必须拒绝一些不必要的相（可以按顺序使用溶体数据库的 `setup` 文件中的关键字 `FAULT_COMMAND REJECT_PHASE`）或简单地从数据库中删除。

**极为重要的是：**可以直接在 TCC 软件的 BIN 模型中使用的专用合金溶体数据库（以及 TCCW 软件的二元相图模块中）必须包含数据库的整个化学体系中所有（或某些非常适合的体系的部分）二元体系（已被精密评估好的）的描述信息，以及计算每个二元体系的相图的方法。这种信息必须要用合法的 TDB 关键字 `ASSESSED_SYSTEMS` 编码，并且通常在数据库的 `setup` 文件结尾处给出。此外，BIN 模块只能够计算在 `ASSESSED_SYSTEM` 描述信息块中包含的二元结合处的各种类型的相图（以及热力学方程曲线和相分数图）。

关键字 `ASSESSED_SYSTEMS` 和顺序描述信息块的编码方式详见 [Thermo-Calc 数据库指导书的第 3.3.18 节](#)。

下面给出的一个例子是在 Fe-Cr-Ni-C 体系中已评估的二元系信息：

---

```

ASSESSED_SYSTEMS
C-FE(;P3 *) C-NI(;P3 *)
C-CR(;P3 TMM:273/6000 STP:.7/900/1/-1/2/-2 STP:.3/1500/2)
CR-FE(TDB -HCP ;G5 C_S:BCC/CR:VA ;P3 STP:.6/1200/1/-2/2) CR-NI(;P3 *)
FE-NI(;P3 STP:.2/500/1/-1 STP:.1/1500/1/2/-2) !

```

---

实际上，任何在 `ASSESSED_SYSTEM` 描述信息块中包含了我们需要的二元结合体的合理描述的溶液数据库都能用于 BIN 模块。因此，用户可以在已有的标准溶体数据库或用户自定义的数据库中编制 `ASSESSED_SYSTEM` 描述信息块，然后用于 BIN 模块来实现不同的目的。

这种溶体数据库和 BIN 模块一起，对已评估好的二元体系的多种类型相图和性质图（吉布斯自由能曲线、活度曲线和相分数图）的系统研究很有意义，且有助于教学。

### 10.4.3 BIN-模型计算的演示举例

在 \TCEx\ (TCEx1.TCM 和 TCEx13.TCM) 目录下和 **TCCR 实例集** 中有两个例子，阐述了各种 BIN-模块的计算和图象处理是如何进行的：

**例 1**            TCEx1.TCM            BIN 模块的主选项 `P` (相图) 计算 以及一些各种二元相图和性质图的进一步标准 TCC 命令行计算和图象处理的示范；具有获得多种在线帮助的特性。

**例 13**      TCEX13.TCM      二元体系中主选项 P (相图) 和 G (吉布斯自由能曲线) 计算和图象处理的演示。

## 10.5 TERN 模块

### 10.5.1 TERN 模块介绍

和二元相图一样, 三元相图广泛应用于各种材料设计和工程, 材料化学, 化学, 地球化学, 环境化学等方面。在上个世纪人们对三元合金体系进行了大量的实验研究, 并且这些所获得的三元相图对合金的发展显得尤为重要。由 ASM International 发行的, 基于实验数据和一些拓扑方法的“ASM Ternary Alloy Diagrams”的系列丛书已经被材料研究与发展界广泛应用。Thermo-Calc 软件/数据库/界面中所采用的先进计算热力学方法提供了一个更加精妙的方式来研究铁和合金的相图和一些其它的热力学性质, 以及许多工业和自然材料(陶瓷, 无机材料, 有机物质, 聚合体, 矿物, 原子能物质等等)。正如在 *Thermo-Calc Software System* 文档和最近的一些出版物中描述的那样, 通过应用一些完善的热力学模型和数据库, 强大的计算和模拟工具以及简单易用的模块, 我们就可以精确地计算和绘制所有类型的相图和性质图。

运用 TCC 中传统的命令程序, 我们可以非常容易地计算和绘制一个三元系(A-B-C)的各种类型的相图(等温截面, 单变量线或液相面投影图, 等值线, 垂直截面等)。这些在第 8.5.2 节的表 8-1 有过总结。这可通过它的命令行结构来实现, 即: 在 TDB 模块中定义三元体系并获得热力学数据(所有的端元性质及二元和三元的相互作用), (如有必要)在 GES 模块里处理相的描述和参数, 在 POLY 模块中设置计算条件和绘制变量, 在 POST 模块中确定图的外形。按照这种方式, 用户还可以计算和绘制一个伪三元体系的相图(或称为准三元体系, 例如:  $\text{CaO-MgO-SiO}_2$ )。当然, 在三元相图或性质图的计算和图象处理中, MACRO 文件的应用会使这种命令行结构的计算和图象处理大大简化 and 高效, 比如, 在 \TCEX\ 目录下和 *TCCQ 实例集* 中的例 TCEX3.TCM, TCEX14.TCM, TCEX19.TCM, 和 TCEX37.TCM)。

为使用户界面更加简单和直接, 从 TCCM 开始, 我们就建立了一个名为 TERN 模块的专用而简单易用的模块, 用来计算三元合金体系的等温截面和单变量线(对液相而言); 未来能直接/自动地计算和绘制三元合金体系的液相面投影图(单变量线, 等温截面, 以及零变量反应及其反应类型/温度; 这都与液相相关), 我们在 TCCR (和 TCW4)中对该模型进行了进一步的改进, 即: 增加了主选项 L (液相面) [除之前已存在的主选项 P (相图) 和 M (单变量线)外]。因此, 这个模型对三元体系的计算而言已经变得非常强大和高效。

该模块是由一种基于问题行的结构组成, 用户只需对这些问题提供一些合适的答案即可。对应于它的三个主选项(P, M 和 L), 模型可以直接、自动地计算和绘制出已定义的三元合金体系的三种特定类型的相图。

➤ **相图:**

应用主选项 P (Phase Diagram) 来计算整个三元体系在某一特定温度(°C)时的等温截面;  
自动将工作空间存储为默认文件 ISOTERN.POLY3;  
用该体系中的两个组成成分作为 X/Y-轴。

➤ **单变量线:**

应用主选项 M (Monovariants) 计算整个三元系与液相相关的单变量线;

自动将工作空间存储为默认文件 MONOVAR.POLY3;  
用液相的两个组成成分作为 X/Y-轴, 并用液相温度(°C) 作为 Z-投影轴。

➤ **液相面投影图:**

应用主选项 L (Liquidus Surface) 计算整个三元体系的液相面投影图(单变量线, 等温截面, 以及零变量反应和它们的反应类型/温度; 所有与液相相关的) ;

自动将工作空间存储为默认文件 MONOVAR.POLY3; 同时, 将那些用于计算与液相有关的等温截面的初始点存到另外一个 POLY3 文件 LIQUIDUS.POLY3 中;

自动将包括在零变量反应点的所有相(即, 液相混合物加其它三个相)的成分(以体系三个组分的摩尔分数的形式)保存到默认文件 ISOTHER.EXP 中;

用两液相中的两个组成成分作为 X/Y-轴, 且用液相温度(°C) 作为 Z-投影轴。

此外, 在接下来的 POST 模块(或在 TERN-模块的计算和默认图形绘制完成后, 或直接重新打开一个 TERN-模块的 POLY3 文件)的图象处理过程中, 利用 TERN-模块的计算结果, 可以生成许多其它类型的相图和性质图。但是, 一个三元体系的其它标准的 POLY 计算及相关的各种 POST 性质图的图象处理都可以通过保存的或重新打开的 TERN-模块 的 POLY3 工作空间 (ISOTERN.POLY3, LIQUIDUS.POLY3, MONOVAR.POLY3 或其它保存的 POLY3 文件) 来进行操作。

注意: TERN 模块不执行对于等值线和垂直截面的计算; 相反, 用户应使用普通的命令行结构模块来进行操作 (参见 第 8.5.2 节)。

TERN 模块的步骤非常简单, 只用几步就可以完成一个三元系的等温截面或单变量线 (与液相相关) 的计算和图形处理, 如下所述:

### 第一步: 选择合适的溶液数据库

该模块要求用户输入一个合适的溶体数据库以获得所有热力学数据。基本上, 端元性质, 二元和三元相互作用参数, 以及所有的评估体系信息 (至少应包括将要计算和绘制的三元体系) 必须可以从该数据库中获得。这种溶体数据库可基于一个普通的溶体数据库 (这表明也可有二元, 三元或更高组元的相互作用信息), 但一般专为 TERN 模块而设计 (即, 在 ASSESSED\_SYSTEM 部分中有对已评估三元系的合适的描述; 详见下面的 10.5.2 节)。用户也可切换到能满足 TERN 模型计算基本要求的自定义溶体数据库中。

从 TCCR/TCW4 版本开始, TERN 模块不再要求所选的溶体数据库在特殊的 ASSESSED\_SYSTEM 部分必须有对已定义三元系的描述 (用户要多加注意, 这种情况下, 屏幕上会出现警告)。这也意味着: 用户必须要保证当前所选溶体数据库包含了目标三元系的完全的、精密评估的、自恰的一套数据描述; 否则, 计算结果可能是完全错误的或是部分不合理的。

### 第二步: 指定三元系

用户须给出当前数据库中包含的三个元素的名字 (在一行中两个之间用空格隔开或分写在单独两或三行)。

### 第三步: 选择一个主选项并依次给出必要的子选项

程序将询问（两个主选项中）用户将要绘制何种图形：相图（**P**,默认方式；对于等温截面），单变量线（**M**；与液相相关的单变量线），液相面投影图（**L**；所有与液相相关的单变量线，等温截面，及零变量反应和反应类型）。

接下来，程序将依次询问一些关于子选项的答案：

- 对于主选项 **P**，程序将进一步要求用户输入一个特定温度[°C；计算三元系在该温度的等温截面]，例如

```
Temperature (C) /1000/: <temperature for the isotherm>
```

- 对于主选项 **M**，程序不需要任何的子选项来进行自动地绘制计算或图象生成（见下一步）。
- 对于主选项 **L**，程序进一步要求用户输入 4 个子选项[包括最低和最高(°C)，等温线的温度间隔，以及您是否希望采用全局最小技术来进行连续计算]，即：

```
Min temperature, C /25/: <lower temperature limit>
```

```
Max temperature, C /2500/: <upper temperature limit>
```

```
Temperature interval /100/: <temperature interval for isotherms>
```

```
Global minimization on: /N/: <Y or N>
```

#### 第四步：自动计算及绘制所需的图形

该模块将会自动执行以下任务：

- 从所选数据库中获得所有热力学描述和信息；
- 在计算液相面投影图时，当子选项“Global minimization on”开启时（通过回答 **Y**），如果全局最小程序找到相的可能的溶解度隙，那么用户须对溶体相增加额外的成分设置。
- 为所需的计算设定初始条件[注意：对于主选项 **P** 计算，指定的温度值总是作为条件，不能设定任何相为固定相状态；而对于主选项 **M** 计算，程序总是将默认的液相的状态设为固定状态，且为 1 摩尔，并让温度沿单变量线变化；但是对于主选项 **L** 计算，程序总是将默认的液相的状态设为固定状态，且为 1 摩尔，并在计算与液相相关的等温截面时将温度条件作为常量]
- 设立绘制变量
  - 对于主选项 **P**, **M** 和 **L**，第二个和第三个元素的摩尔分数总是分别作为第一个和第二个绘制变量，并且两个轴变量的范围都是从 0.0 到 1.0；对于主选项 **M** 和 **L**，总是将温度条件作为在液相面投影图上绘制单变量线时的第三个轴（用上述的最小/最大温度和温度间隔作为它的设置）。
- 计算初始点；
- 进行绘制计算；
  - 对于主选项 **P**: 绘制等温截面。
  - 对于主选项 **M**: 绘制与液相有关的等温线。
  - 对于主选项 **L**: 在绘制整个三元系的单变量线之前，绘制在所定义温度范围内所有可能涉及液相的等温截面（按所定义的温度步长计算）。在结束绘制时，液相面投影图上的所有可能的零变量反应点的有用信息（包含它们的反应温度，所包含的相以及反应类型）都会显示在屏幕上，例如：

零变量反应：



```

U 1: 1571.35 C: LIQUID + M3C2 -> GRAPHITE + M7C3
U 2: 1295.20 C: LIQUID + M23C6 -> BCC_A2 + M7C3
E 1: 1284.49 C: LIQUID -> BCC_A2 + FCC_A1 + M7C3
P 1: 1210.67 C: LIQUID + GRAPHITE + M7C3 -> CEMENTIT
U 3: 1177.98 C: LIQUID + M7C3 -> CEMENTIT + FCC_A1
E 2: 1150.67 C: LIQUID -> CEMENTIT + FCC_A1 + GRAPHITE

```

► 在屏幕上作出最初所需的三角图形。这是所选主选项(P 或 M 或 L)的默认输出, 其坐标变量设置通常如下:

- 对于主选项 P:

$X = X(2^{nd}E1)$                       第二个元素的摩尔分数  
 $Y = X(3^{rd}E1)$                       第三个元素的摩尔分数

- 对于主选项 M 或 L:

$X = X(LIQ, 2^{nd}E1)$                       第二个元素在液相中的摩尔分数  
 $Y = X(LIQ, 3^{rd}E1)$                       第三个元素在液相中的摩尔分数  
 $Z = T - C$                       温度 (°C), 但是以 z-轴刻度值和在整个三元成分空间的液相投影温度关系表示, 比如  $Z\text{-axis} = 400 + 50 * Z$

同样地, 默认的设置也强制在坐标轴类型, 坐标轴文本, 坐标轴缩放因子 (所有的三个轴总是从 0.0 到 1.0), 曲线标签选项(对于主选项 P 为 E 或 N, 对于主选项 M 为 F, 对于主选项 L 为 N), 颜色和粗细 (对于文字和轴, 零变量平衡点, 结线以及溶解度线等其它线条), 字体和大小 (对于标签和数字), 图表主标题和副标题, 刻度标志 (对于主选项 M 和 L) 等等上。在所计算三元系中所有包含液相的可能的零变量反应点的信息 (包括它们的反应温度, 所包含的相以及反应类型) 都将在液相面投影图的默认图形中给出。

主选项 P 计算的图标题由三元系的名称和计算温度值组成, 表示为 “A-B-C at T = t”, 这里 A, B, 和 C 是按字母排序的元素名, t 是温度(°C)。主选项 M 计算的图标题总是 “Monovariant lines in A-B-C”, 这里 A, B, 和 C 是按字母排序的元素名。主选项 L 计算的图标题通常是 “A-B-C (lt/ht/it) xx s”, 这里 A, B, 和 C 是按字母排序的元素名, lt/ht/it 是温度的下限和上限 (°C) 以及计算/绘制液相面投影图的等温线的温度步长, 而 xx 是当前计算所花的实际时间(second)。

主选项 M 或 L 计算的默认副标题设置为 “Z-axis = a + b \* Z”, 表示 Z 刻度标签和 Z-轴值的线性关系 (液相线温度 °C), 因此 a 和 b 的值分别是相关的常数和系数。

图 10-3 阐述了三个由 TERN-模块生成 Al-Mg-Si 三元系图形的例子。这三个图形分别对应于主选项 P (相图的等温截面), M (关于液相的单变量线), 和 L (液相面投影图)。

同时, 一个 POLY3 文件会自动存储在当前工作目录下, 对于主选项 P 默认名是 ISOTERN.POLY3, 对于主选项 M 或 L 是 MONOVAR.PLOY3。对于主选项 L, 另外一个 POLY3 文件 (LIQUIDUS.POLY3) 也被存储到同一个区域, 它只存储包含液相的等温截面的计算初始点的工作空间(但是这个文件不是很有用)。这些 POLY3 文件可在标准的 POLY 模块中重新打开, 以便在 POST 模块中进行进一步的其它类型的相图和性质图的图象处理, 或在 POLY 模块中直



接进行其它类型的绘制或步进计算。注意，这种文件必须在用同一个主选项进行另外一个 TERN 模块计算之前备份（如果这个 POLY3 工作空间仍在进行）或重命名（如果这个 POLY3 工作空间已经退出）。

此外，一个默认名为 ISOTHER.EXP 的 EXP 文件将会自动存储到当前工作目录下，其中列出了（以 DATAPLOT 的语言形式）有关液相面投影图上所有可能的零变量反应点的各种详细信息（包括它们的反应温度，反应类型，包含的相及成分）。

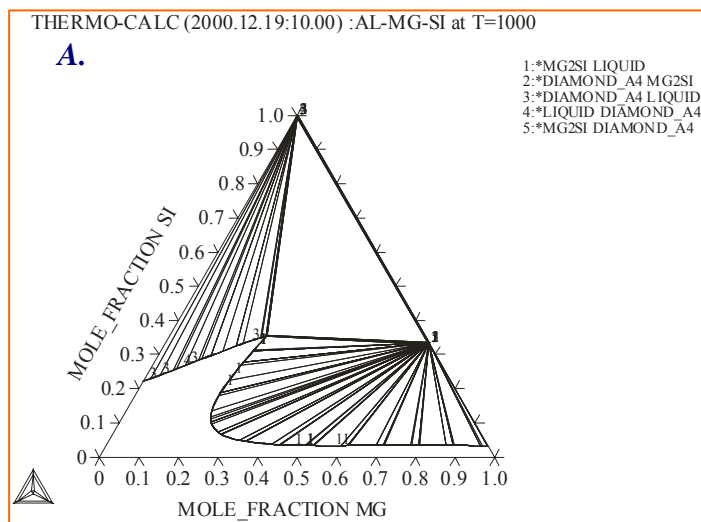
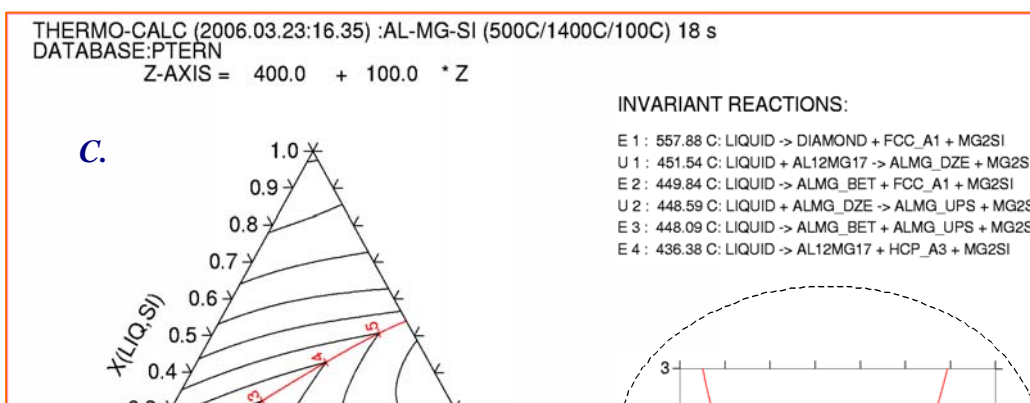
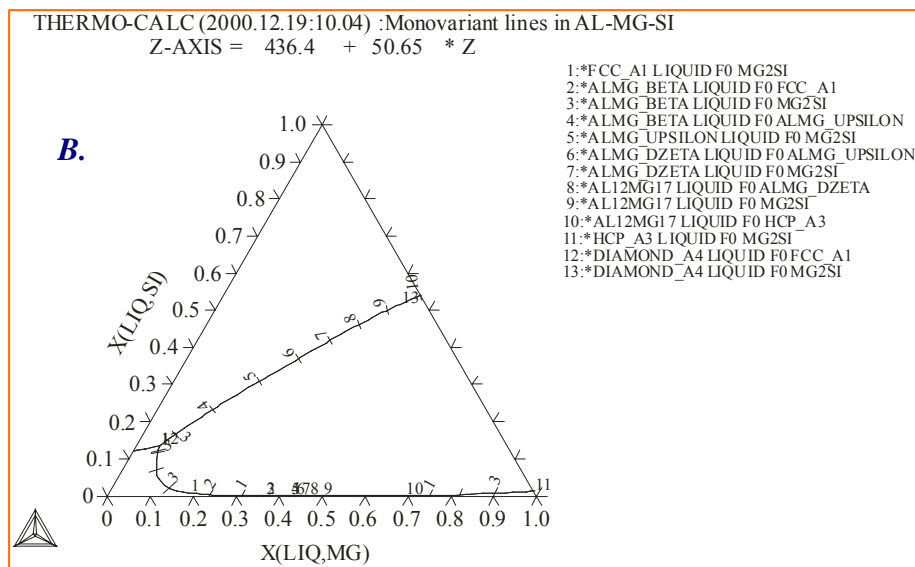


图 10-3. 由 TERN 模块的自动计算(输出分别对应于两个主选项, P, M 和 L)的 Al-Mg-Si 三元系的等温截面 (在  $T = 1000\text{ K}$  时), 液相面单变量线投影图, 液相面投影图,



**第五步：进一步对所生成的相图或吉布斯自由能曲线或相分数图进行精修**

最后，该模块总是在标准的 POST 模块中结束，以便用户可按自己的意愿进行进一步的图象处理和自动生成图形。

用户现在可以应用 POST 模块所有的命令来精修图形，变换图的类型（三角形或四方形），修改和/或增加坐标轴类型，坐标轴文本，坐标轴缩放系数和方式，坐标轴刻度线状态，共轭线状态，曲线标签选项，相区或性质标签文本，颜色和粗细，图的主标题和子标题，坐标轴长度，图形的大小，等等。

用户也可以重新设置组分的参考态，在已绘制的图形中去除或恢复相，在所计算的图上加实验数据点，改变绘制选项以及制定合适的绘图模式。

经过这种进一步的图象处理，用户可以选择将生成的图在与计算机相连的打印机上打印出来，将图形保存成图形文件（使用合适的字体和大小），将图形转存到图形设备上（同时保存为一个图形文件），或者将生成和修改的图形的整个的曲线、直线和点的  $x$ -/ $y$ -坐标以及一些图形设置输出到一个 \*.EXP 文件。可参见第 9 章关于各种 POST 命令的详细说明。

**第六步：进一步绘制其它类型的相图和性质图**

如果用户需要，他/她可采用相同的计算结果(保存在当前的运行的或重新打开的 BINARY.POLY3, GCURVE.PLOY3, PFCURVE.POLY3 文件，或其它 BIN-模块的 \*.POLY3 文件附件)，在 POST 模块监控器中生成一些其它类型的相图或性质图。如上一步所述的那样，用户可以为新的图形定义合适的坐标变量，并应用所有的 POST 模块命令来重新定义和精修图形，

用户可通过选择合适的平衡量来设置坐标变量，其中，这些平衡量可以是状态变量（强度变量、能量变量、成分和结构变量之一）或导出变量。用户还可以输入一些额外的符号（方程或变量或表）作为新的坐标变量或用于制表。

通常，在整个三元系中，我们可以将三个元素（组分）的体系成分变量（例如，摩尔  $N$ ，质量  $B$ ，摩尔分数  $M-F$ ，摩尔百分数  $M-P$ ，质量分数  $W-F$ ，质量百分数  $W-P$ ）或活度(AC 或 ACR)设为独立坐标变量 (图的  $x$ - 坐标轴或  $y$ -坐标轴)。一个稳定相(对于主选项  $M$ ，一般只指液相)中的三个元素（组分）的相成分变量（*e.g.*，摩尔  $N$ ，质量  $B$ ，摩尔分数  $X$ ，质量分数  $W$ ）或活度(AC 或 ACR)也可作为独立坐标变量。但是，如果在之前的计算中使用过主选项  $M$ ，那么温度条件， $T(K)$  或  $T-C(^{\circ}C)$ ，也可以被设为独立坐标变量。

至于定义第二个坐标变量，用户可选择其它合适的平衡量。如果要在 POST 模块里绘制带有  $z$  投影轴的三角形图，或者如果要应用合适的图形软件生成一个三维图，用户甚至可以采用与定义第二个变量类似的办法来定义第 3 个坐标变量（ $z$ -轴）。

这种额外图形的可能性可总结如下：

- 在主选项  $P$  之后：

$$X/Y = C/A(E1) \quad \text{体系中一个元素（组分）的成分/活度}$$

$or\ C(ph, El)$  在一个稳定相中一个元素（组分）的成分  
 $or\ AC(sp, ph)$  某元素（物种）在一稳定相中的活度  
 $X/Y/Z =$  体系或组分或相的任意平衡量；对应它沿相界（以及共轭线，单变量线和零变量点）的变化

- 在主选项 M 或 L 之后：

$X/Y =$   $C/A(El)$  体系中一个元素（组分）的成分/活度 *or*  
 $C(liq, El)$  在液相中一个元素（组分）的成分  
*or*  $AC(sp, liq)$  在液相中一个元素（物种）的活度  
 $or\ T/T-C$  温度 (K 或 °C)  
 $X/Y/Z =$  体系或组分或相的任意平衡量；对应其沿单变量线的变化(与液相相关的)

图 10-4 给出了几个这种 Al-Mg-Si 三元系非默认图形的例子，它们是通过 TERN 模型保存的 \*.POLY3 文件进行图象处理的，分别由三个主选项 P（相图），M（单变量线）和 L（液相面投影图）生成。

由于在主选项 P（保存为默认文件 ISOTERN.POLY3）和主选项 M 或 L（保存为默认文件 MONOVAR.POLY3）中，绘制计算把三元系中后两个组分的摩尔分数 [即，如果三元系已经按照 A-B-C 的顺序来定义，将会选择条件 X(B) 和 X(C)] 作为绘制变量（实际上，在主选项 M 或 L 中，温度条件又被选为第三个坐标绘制变量），用户通常可以把计算结果表现为各种类型的相图。三元系的相图可以绘成等温三角形或垂直截面的形式，其中 X-/Y-坐标轴表示体系成分（两个元素的摩尔分数 M-F，或摩尔百分数 M-P，或质量分数 W-F，或质量百分数 W-P，如组分）或依赖成分的状态变量（比如两个组分的活度，AC 或 ACR），对于主选项 P 在指定温度下沿相界（以及共轭线，单变量线和零变量点）的变化，或对于主选项 M 或 L 则沿不同温度（可作为 Z 轴）下液相面投影图的单变量线而变化（即，液相和两个固相稳定共存）。

如果仅有其中的一个坐标轴采用了这种变量，而另一个采用体系或组分的特殊平衡性质，那么绘出的就是一个性质图。在这种性质图中，对于主选项 P 而言，曲线/直线/点只代表这种特殊平衡性质在指定的温度下随相界（以及共轭线和零变量平衡点）而变化，而对于主选项 M 或 L 而言，则为沿不同温度下液相单变量线而变化，且在此单变量线上液相和其它两个固相稳定共存。

此外，一些已经定义的热力学性质和平衡量（如，标准状态变量或在表中的性质和平衡量）可以沿一个绘制变量（主选项 P 或 M 或 L）进行列表或绘图。

## 10.5.2 专用 TERN 模块数据库的结构

如上所述，TERN 模块自动从一个合适的溶体数据库中获取所有的热力学数据。这个溶体数据库必须包含完全一体的、精密评估的、自恰的一套数据描述（至少包括当前需要计算和绘制的三元相图；包含各种单元相/两元相/三元相的热力学性质数据和二元/三元相互作用参数）；否则，计算结果可能是完全错误或是部分不合理的。

在以前的版本中（TCCR/TCW4 之前的旧版本），这点通过强制应用在所选溶体数据库的 ASSESSED\_SYSTEM 部分编码的有关信息来保证。通常地，虽然这种溶体数据库是专为 TERN 模块设计的，但它也可以是一个具有额外 ASSESSED\_SYSTEM 信息块（见下）的普通溶体数据

库（这就表明存在二元、三元和更高组元的相互作用信息）。用户也可切换到满足 TERN 模块计算基本要求的自定义溶体数据库中。

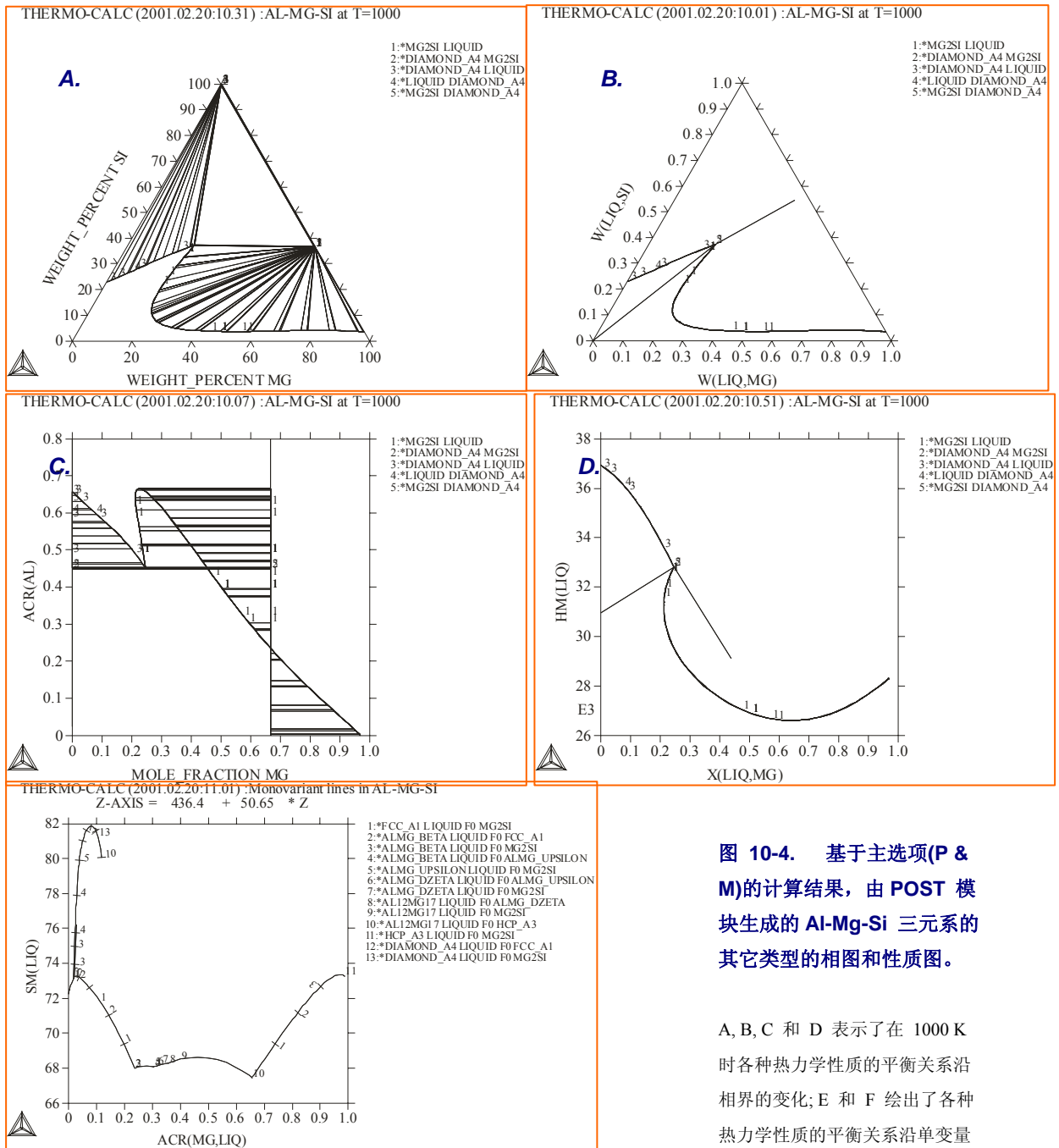


图 10-4. 基于主选项(P & M)的计算结果, 由 POST 模块生成的 Al-Mg-Si 三元系的其它类型的相图和性质图。

A, B, C 和 D 表示了 1000 K 时各种热力学性质的平衡关系沿相界的变化; E 和 F 绘出了各种热力学性质的平衡关系沿单变量线的变化。

目前，在软件里有一个可以在 TERN 模块中直接使用的专门设计的三元合金溶体数据库，如下所述：

➤ **PTERN** *TC Public Ternary Alloy Solutions Database* (之前称为 TER98)

- 和 TCC，TCW，以及 TCC\_Demo/TC4A 和 TCW-Demo/TC4U 一起免费发行
- 包含 7 种元素(Al-C-Cr-Fe-Mg-Si-V)
- 包含以下 3 个三元系 (包含液相和固溶体相，以及一些化学计量相)

---

|           |          |        |
|-----------|----------|--------|
| Al-Mg-Si, | C-Cr-Fe, | C-Fe-V |
|-----------|----------|--------|

---

与一个普通的溶体数据库一样，专门设计的 TERN 模块溶体数据库必须包含所有有关元素、物种和相、相描述、常量、元素的热力学方程和参数、端元（化学计量相）、溶液相的二元和三元相互作用连接点，类型定义，默认定义，参考态，等的信息。由于没有可以从已定义的三元系中拒绝和恢复相的选项，一些不必要的相必须拒绝(在溶体数据库的 `setup` 文件中依次使用关键字 `FAULT_COMMAND REJECT_PHASE`)或简单地从数据库中删除。

**重要的是，可以直接在 TERNARY 模块中使用的溶体数据库必须包含一些数据库的整个化学体系中所有三元体系（已被精密评估过的）的描述信息，以及计算每个三元系的三元相图的方法。这种信息必须要用合法的 TDB 关键字 ASSESSED\_SYSTEMS 编码，一般在数据库的 `setup` 文件后给出。此外，TERNARY 模块只能够计算在 ASSESSED\_SYSTEM 描述信息块中包含的三元体系的各种类型的相图（和单变量线）。**

关键字 `ASSESSED_SYSTEMS` 和顺序描述信息块的编码方式详见 *Thermo-Calc 数据库指导书* 第 3.3.18 节。下面给出的例子是 Al-C-Cr-Fe-Mg-Si 体系中所评估的三元系的信息：

---

```
ASSESSED_SYSTEM AL-MG-SI(;P3 *) C-CR-Fe(;P3 *) !
```

---

实际上，任何在 `ASSESSED_SYSTEM` 描述信息块中包含了我们需要的二元结合体合适描述的溶体数据库都能用于 TERN 模块。因此，用户可以在已有的标准溶体数据库或用户自定义数据库中编制 `ASSESSED_SYSTEM` 描述信息块，然后用于 TERN 模块来实现不同的目的。

这种溶体数据库和 TERN 模块一起，对已评估好的三元体系的多种类型相图（和液相面投影图、在液相面投影图中增加单变量线和零变量点）的系统研究很有意义，并且有助于教学。请注意：PTERN 数据库只是一个包含一些公开数据的示范数据库，旨在演示这个模型。我们极力推荐用户建立自己的数据库/数据集用于 TERN 模块计算。

但是，从 TCCR/TCW4 版本开始，TERN 模块不再要求所选溶体数据库必须在 `ASSESSED_SYSTEM` 中有对已定义三元系的描述（这种情况下，用户要加以注意出现在屏幕上的警告）。这也意味着：用户必须要清楚当前所选溶体数据库包含了目标三元系的完全的、精密评估的、自恰的一套数据描述；否则，计算结果可能是完全错误的或部分不合理的。



### 10.5.3 TERN -模块计算的演示举例

在\TCEX\ (TCEX3.TCM)目录下和 **TCCR 实例集** 中有一个例子,其中阐述了如何进行各种 TERN 模块的计算和图象处理:

**例 3**            TCEX3.TCM            C-Cr-Fe 三元系的 TERN-模块的主选项 P (phase diagram) 计算, 以及各种三元相图和性质图的一些进一步的标准 TCC 命令行计算和图象处理的演示。

## 10.6 POTENTIAL 模块

### 10.6.1 POTENTIAL 模块介绍

在金属-气体相互作用的体系中,在一定温度和压强条件下所谓的势能图(用两个主要气态物种的挥发性作为 X/Y 轴)对研究各种形式的金属的氧化物、硫化物、硫酸盐、碳酸盐、硅酸盐、氮化物、硝酸盐等的形成以及其与相互作用的气态混合相的之间的关系是很有用的。如第 8 章所述,采用 TCC 软件中传统的命令程序,用户可以非常容易地计算和绘制在一个金属-气体相互作用体系的各种势能图,。

自 TCCL 版本以来,一个专门且简单易用的、称之为 POTENTIAL 模块的模块可以自动计算和绘制这种在指定温度和压强为 1 bar 下的势能图。它是由一种简单的问题行的结构构建起来的,而且用户只需提供一些合适的答案。

它用气态混合相中的两个主要物种的化学势或活度作为绘制变量,然后用两个气态物种(即: 1 bar 下的挥发性)的活度(以自然对数的形式)作为 X/Y 轴来绘制势能图。气态混合物与各种金属形式:金属氧化物、金属硫化物或其它含金属的固体之间的相关关系是由这两种势能量控制的不同的区域表现出来。

此外,许多其它类型的势能图和性质图(适合于在特定温度和 1bar 下的条件下一个已定义的金属-气体相互作用体系)可以用 POT 模块的计算结果产生。这可以通过在接下来的 POST 模块中的图象处理过程来完成(或者在 POTENTIAL 模块计算和默认图形自动完成后,或直接重新打开一个 POTENTIAL 模块\*.POLY3 文件)。但是,势能图和性质图的其它标准的 POLY 计算及相关的 POST 图象处理可以通过已保存的或重新打开的 POT-模块 POLY3 工作空间 (POT.POLY3 或其它复制的\*.POLY3 文件)来执行。这在压强条件不是 1 bar 时的势能图的计算中显得尤为有用:用户可以到 POLY 模块中,设定压强条件(例如:用 s-c P=1e8 来代替 1 kbar),计算初始平衡,将它加到默认方向上,执行绘图计算,然后回到 POST 模块去绘制势能图和其它的性质图(参见第 6 步)。

如下所述, POTENTIAL 模块的步骤很简单,只要使用几步就可完成一个默认势能图和其它图形的计算和图象处理过程:

**第一步： 选择一个合适的物质或溶体数据库**

该模型要求一个合适的物质或溶体数据库以获得所有热力学数据。任何包含气态混合相、金属（或合金）、金属氧化物/硫化物/硫酸盐/碳酸盐/硅酸盐/氮化物/硝酸盐...固体（化学计量或溶液相）的物质或溶体数据库都可在 POTENTIAL 模块中选择，比如 SSUB, TCMP, 和 TCES 数据库。专门设计的 SPOT 数据库是 SSUB 物质数据库的一个子集，而另外一个专门数据库，PSUB (TC Public substance database)，是用来进行 POTENTIAL 模块的计算和图象处理的演示的（详见下一部分，10.6.2）。用户也可切换到能满足 POTENTIAL 模块计算基本要求的自定义的物质或溶体数据库中。

**第二步： 指定金属-气体相互作用体系**

用户必须给出当前所选物质或溶体数据库的基体元素（金属）和两个气态物种（在一行中用空格隔开或分为三行）的名字。所给出的两个气态物种的名字必须与在数据库中定义的这种物种和气态混合相的组成一模一样。

**第三步： 选择一个温度**

程序会要求用户输入一个指定的温度（K）以计算所定义的金属-气体相互作用体系在该温度和 1 bar 下的势能图。

**第四步： 自动计算和绘制所需的图形**

模型会自动执行以下任务：

- 从所选数据库中获得所有热力学描述和信息；
- 定义计算的初始平衡条件；
- 设置绘制变量[如  $\text{LNACR}(\text{SP1}, \text{GAS})$  和  $\text{LNACR}(\text{SP2}, \text{GAS})$ ];
- 计算初始点；
- 进行绘制计算；
- 在屏幕上绘出第一个所需的势能图， $\text{LNACR}(\text{SP1}, \text{GAS})$  vs  $\text{LNACR}(\text{SP2}, \text{GAS})$ 。

同样地，默认设置也应用在坐标轴类型，坐标轴文本，坐标轴缩放因子（对于两个轴而言，总是从 -100.0 到 0.0），曲线标签选项(通常为 B)，颜色和粗细（对于文本和轴，零变量平衡点，共轭线以及像溶解度线那样的其它线条），字体和大小（对于标签和数字），图表标题，刻度线等等。



主选项 P 计算默认的图形标题是由三元系的名称和计算的温度值组成, 如出现的标题为“Me SP1 SP2; Database: ABCD”, 那么其中 Me, SP1, 和 SP2 是所定义的金属和两个气态物种的名字, ABCD 是所选数据库的名字。

图 10-5 给出了由 POTENTIAL 模块产生的 Fe 和  $\text{SO}_2/\text{O}_2$  所含气态混合相在 1000 K 和 1 bar 条件下相互作用的图形。

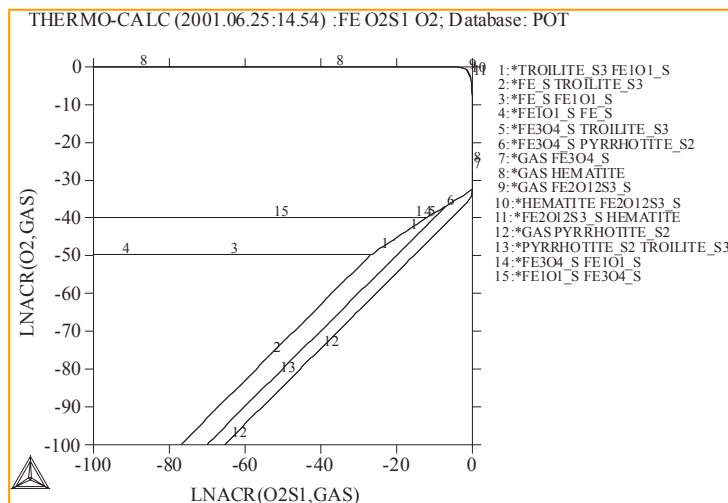


图 10-5. 由 POTENTIAL 模块产生的 Fe 和  $\text{SO}_2/\text{O}_2$  所含气态混合相在 1000 K 和 1 bar 条件下相互作用的势能图。

同时, 程序将会自动生成一个 \*.POLY3 文件并保存在当前工作目录下, 默认名为 POT.POLY3。这个文件可在标准的 POLY 模块中重新打开, 以便在 POST 模块中进行其它势能图和性质图的进一步的图象处理, 或者在 POLY 模块中直接进行其它类型的绘制计算 (例如, 改变压强和温度条件来绘制势能图; 参见第六步)。注意: 在进行另外一个 POTENTIAL 模块计算之前, 该文件必须要被复制(如果这个 POLY3 工作空间正在运行中)或重命名到另外一个文件 (如果这个 POLY3 工作空间已经退出)。

#### 第五步: 进一步精修所生成的势能图

最后, 模块总是要在标准的 POST 模块中结束, 以便使用户按其意愿进行进一步的图形处理及处理自动生成的 (第一个) 图形。

现在, 用户可以应用 POST 模块中的所有的命令, 通过变换图形的类型 (三角形或四方形), 修改和/或增加坐标轴类型, 坐标轴文本, 坐标轴缩放系数和方式, 坐标轴刻度线状态, 共轭线的状态, 曲线标签选项, 相区或性质标签文字, 颜色和粗细, 图形的主标题和子标题, 坐标轴长度, 图的大小, 等等来精修图形。

用户也可以重新设置组分的参考态, 从已绘制的图形中去除或恢复相, 在计算的图上加实验数据点, 改变绘制选项以及定义合适的绘图格式。

经过这种进一步的图象处理, 用户可以选择将生成的图在与计算机相连的打印机上打印出来, 将图形保存成图形文件 (使用合适的字体和大小), 将图形转存到图形设备上 (同时保存为一个图形文件), 或者将生成和修改的图形的整个的曲线、直线和点的 x-/y-坐标以及一些图形设置输出到一个 \*.EXP 文件。可参见第 9 章关于各种 POST 命令的详细说明。

#### 第六步: 进一步绘制一些其它类型的势能图或性质图

如果用户需要, 他/她可采用相同的计算结果(保存在当前的运行的或重新打开的 BINARY.POLY3, GCURVE.PLOY3, PFCURVE.POLY3 文件, 或其它 BIN-模块的 \*.POLY3 文件复件), 在 POST 模块监控器中生成一些其它类型的相图或性质图。如上一步所述的那样, 用户可以为新的图形定义合适的坐标变量, 并应用所有的 POST 模块命令来重新定义和精修图形,

用户可通过选择合适的平衡量来设置坐标变量，其中，这些平衡量可以是状态变量（强度变量、能量变量、成分和结构变量之一）或导出变量。用户还可以输入一些额外的符号（方程或变量或表）作为新的坐标变量或用于制表。

通常地，在相互作用体系中的两个主要气态物种中任一个(SP1 或 SP2)的化学势(即, MU 或 MUR, 或自然对数的形式)或活度(AC 或 ACR, 或自然对数的形式)都可作为独立坐标变量(图形的 x- 或 y-坐标轴)。至于定义第二个坐标变量，用户可选择任何其它合适的热力学性质或平衡量。

一个在不是 1 bar 的压强条件，以及/或者另一温度条件下的势能图，可在这步进行计算和绘制，如下所述：

POST: back (返回到 POLY 模块；如果不是，那么就用 GO POLY 命令)

POLY\_3: read POT.POLY3

(通过读入一个已存在的 POT 模块的 POLY3 文件, 可以保证

LNAC(SP1,GAS) and LNAC(SP2,GAS) 仍然是作为其中的两个条件，  
而且为两个绘制标量)

POLY\_3: s-c P=1e8

POLY\_3: s-c T=800

POLY\_3: c-e

POLY\_3: add default

POLY\_3: map

POLY\_3: post

POST: plot

图 10-6 给出了通过 POTENTIAL 模块保存的 Fe-S-O 体系的\*.POLY3 文件进行图象处理给出的一些非默认图形的例子。

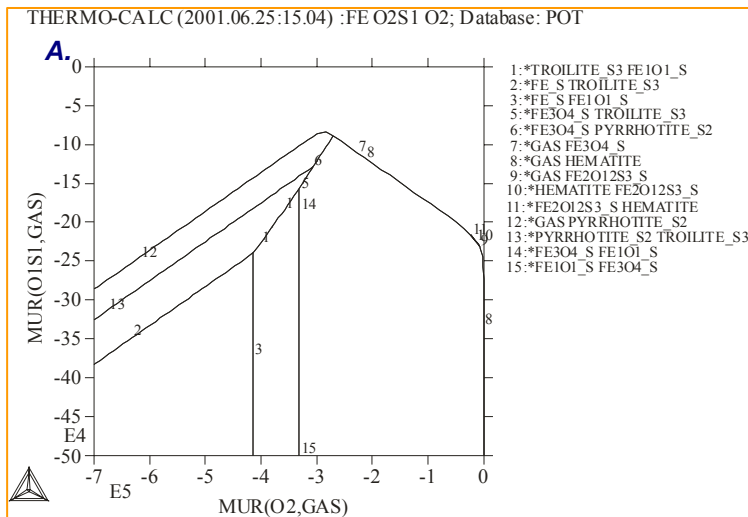
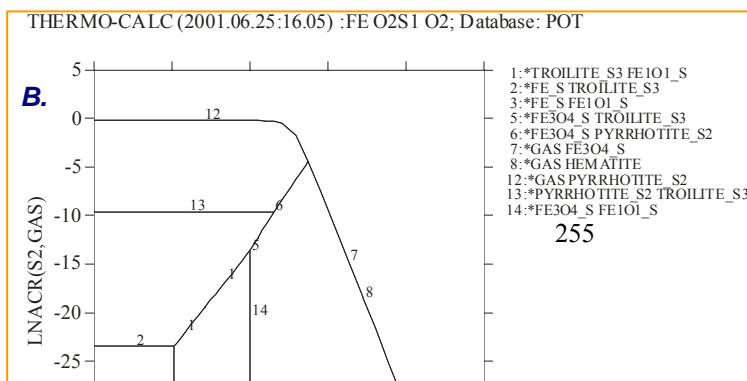
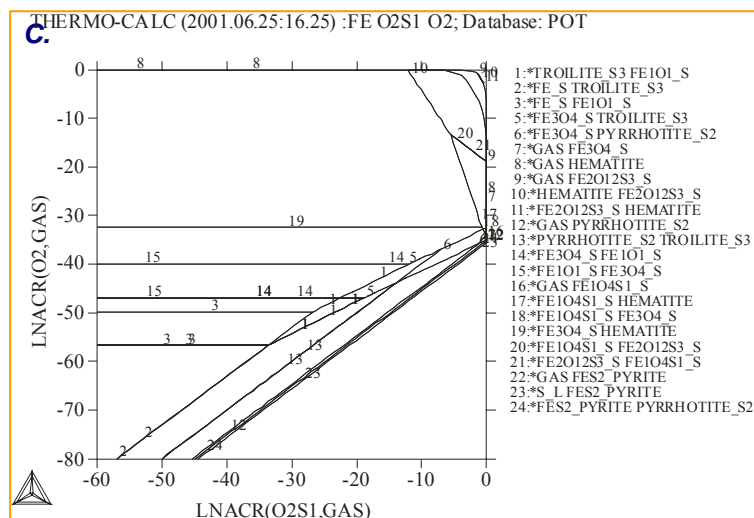


图 10-6. 由 POST 模块 (直接在 POT-模块计算之后), 或由 POLY 模块在不同的压强和/或温度下重新计算所得的 Fe-S-O 体系的其它类型的势能图和性质图,

A 和 D 表现了基于 POTENTIAL-模块在 1000 K 和 1 bar 下的计算结果，由 POST 模块生成的其它类型的势能图；C 绘出了一个由 POLY 模块计算的势能图 (基于一个已存在的 POT.POLY3 文件) 但温度和压强条件已做了修改 (800 K 和 1 kbar)。



J



## 10.6.2 POTENTIAL-模块所使用的数据库结构

如上所述, POTENTIAL 模块可使用任何能满足基本要求的物质或溶体数据库, 即要求: 必须有一个气态混合相, 金属 (或合金), 金属氧化物/硫化物/硫酸盐/碳酸盐/硅酸盐/氮化物/硝酸盐/... 固体 (化学计量相或溶液相)。在这点上, 它不同于 BIN, TERN 和 POURBAIX 模块。因此, 我们通常可选择 SSUB、TCMP 和 TCES 数据库用作势能图的计算。

专门设计的 SPOT 数据库是 SSUB 物质数据库的一个子集, 而另一个专门数据库, PSUB (TC Public Substances Database), 是为演示 POT 模块的计算和图象处理而设计的。有关它们的简要介绍如下所述:

### ➤ PSUB TC Public Substances Database

- 与 TCC 和 TCW, TCC\_Demo/TC4A 和 TCW-Demo/TC4U 一起免费发行
- 包含 6 个元素 (Fe-Cu-H-O-S-N)

### ➤ SPOT3 SGTE SSUB Substances Database v3 的子集 (以前称为 POT)

- 只与获得许可文件的 SSUB 数据库一起发行
- 包含 101 个元素 (与 SGTE SSUB Substance Database 的第三版相同)

用户也可以切换到能满足 POTENTIAL 模块计算要求的自定义物质或溶体数据库中。

### 10.6.3 POTENTIAL-模块计算的演示举例

在\TCEX\目录下 (TCEX35.TCM) 和 **TCCR 实例集** 中有一个例子，阐述了如何进行 POTENTIAL 模块的计算和图象处理：

**例 35**      TCEX35.TCM      Fe-O-S 体系在 1000 K 和 1 bar 条件下的 POTENTIAL 模块计算演示。

## 10.7 布拜 (POURBAIX) 模块

### 10.7.1 布拜 (Pourbaix) 图

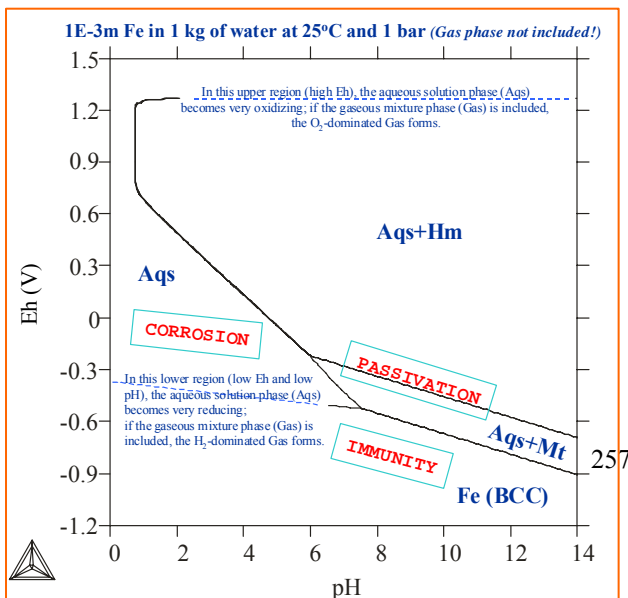
在一个包括水溶液的不同种类的交互作用系统里，在水溶液和多种的相互作用的相（气体混合物，化学计量固体，固体溶液）中的物种演变和分离，除了在这个体系中的其它的控制因素（主体成分，温度，压力和其他），依赖于酸度（pH）和电极电位（Eh）。将在一个平衡状态或动力学过程中的多种相的物种演变和分离过程表达为 pH 和/或 Eh 条件的函数，对在水溶液化学，电解溶液化学，材料腐蚀，化学工程学，地球化学，环境化学等的研究和发展都是很有意义的。

布拜 (Pourbaix) (1966) 企图应用热力学来预测材料的耐腐蚀性，通过测定一个在金属和纯水或稀溶液的相互作用体系在不同的 pH 和 Eh 值下的相的稳定性联系，从而得到在 pH-Eh 图中金属和第二相（金属氧化物）的稳定性区域，即所谓的布拜 (Pourbaix) 图。他将图标注为三个区域。

- **免腐蚀区**      - 无金属分解；
- **腐蚀区**        - 活跃的金属溶解；
- **钝化区**        - 形成金属氧化物膜防止进一步的金属分解。

所以一个 Pourbaix 图是一种相图，用标示 pH 和 Eh 函数的相界这种方法表示一个金属-水溶液体系的稳定边界。一个水溶液的相总是存在的；然而，在一个给定的 pH 和 Eh 条件下，一种金属或者与水溶液（不能溶解的/免腐蚀的）平衡，或与氧化物或硫化物，或与形成的其他可以产生钝化作用的第二固体相薄膜平衡。另一方面，一个优势图或物种形成百分数图是一个性质图，表示一个占优势的水成的物质或在多物种平衡系中的水成的物种形成的百分数。如果需要，这种图同样可以被投影到 Pourbaix 图上，以便观察水溶液相是如何沿相界和相稳定区演变的。

图 10-7 给出了一个含 0.001 摩尔铁的 1 千克纯水体系在 25°C 和 1 bar 的条件下，气体在计算中不加以考虑时铁的 Pourbaix 图的例子。与含铁的稀释水溶液共存的磁铁矿 (Mt, Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) 和赤铁矿 (Hm, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) 的形成，体现了铁在 pH-Eh 图左上方区域中的钝化。当 pH 值低并且 Eh 值相对高时，铁会完全的溶解在水溶液相中，意味着铁的腐蚀。在低 Eh 的情况下，铁仍保持它稳定的固体状态 (BCC 相)，并且它既不溶解在水中也不转化为铁的氧化物，表示铁的免腐蚀性。



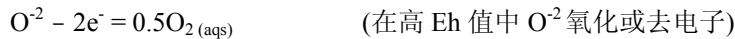
铁在 pH-Eh 图左上方区域中的钝化。当 pH 值低并且 Eh 值相对高时，铁会完全的溶解在水溶液相中，意味着铁的腐蚀。在低 Eh 的情况下，铁仍保持它稳定的固体状态 (BCC 相)，并且它既不溶解在水中也不转化为铁的氧化物，表示铁的免腐蚀性。

**图 10-7 铁的 Pourbaix 图(1 千克纯水含 0.001 摩铁，在 25°C 和 1 bar 条件下，气体在计算中不加以考虑)**

注意气体混合相不包括在计算的体系中。在靠上的区域(高 Eh) 和靠下的区域 (低 Eh 和低 pH), 水溶液相分别表示出非常易氧化和易还原。

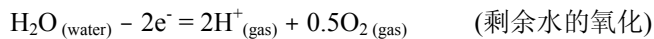
事实上, 从全局平衡的角度看, 一个 O<sub>2</sub>- 或 H<sub>2</sub>-占主要成分的气体混合相将会在这两个区域中形成。(见图 10-8 完整的 pH-Eh 图 )。

有一个非常重要的注意点就是一个现实的 Pourbaix 图是对一个真实的平衡体系来讲的, 正如图 10-7 中指出和下边描述的那样。事实上, 水这种化合物在所有的 pH 值范围内可被电解成 H<sup>+</sup> 和 O<sup>2-</sup>, 但是电解的程度取决于在水溶液相中的 pH 值。通过主要的电解和氧化还原反应, 随着 Eh 的升高并达到一定高度, O<sup>2-</sup> 离子将会被氧化为 O<sub>2(aqs)</sub>。相反, 随着 Eh 的降低并降到一定程度, H<sup>+</sup>离子将会被还原为 H<sub>2(aqs)</sub>。

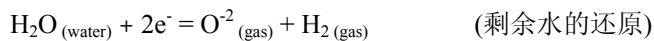


从而, 如果在计算用的 Pourbaix 图中不考虑气态混合相, 水溶液相会在高的 Eh 值情况下以极高的氧气浓度或在低的 Eh 值情况下以极高的氢气浓度结束, 这时“水溶液相”的概念不再是有意义的, 从而没有正确的水溶液的模型可以在实际中被应用。因此, 从严格的热力学角度来看, 在 Pourbaix 图的计算中, 必须在体系中包括一个气态相。

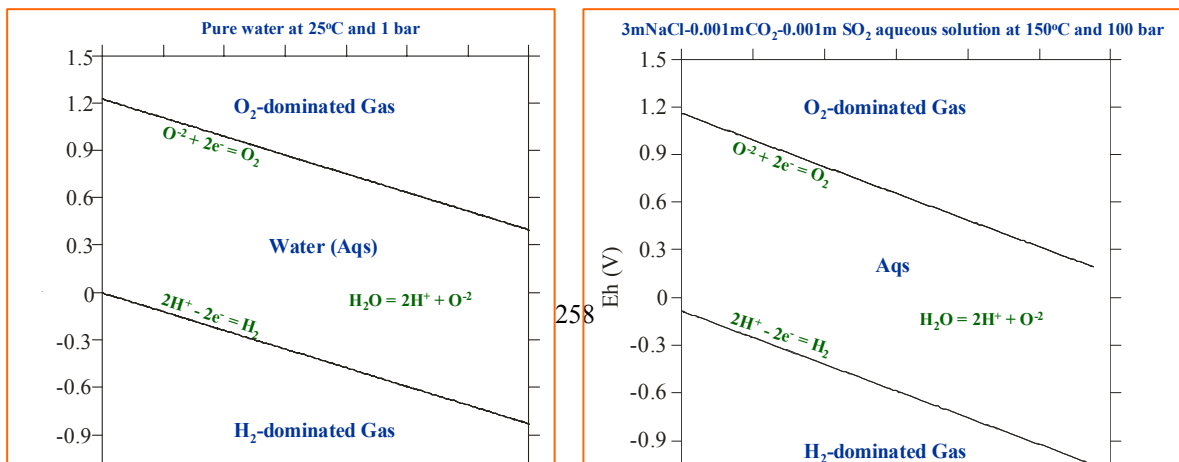
在一个精确的特定的高 pH 值情况下, 含足够高的氧气活性的水溶液相变得没有一个氧气占支配的气体混合相稳定, 因此通过下面主要物质的反应和所有其他涉及次要的被氧化和中性物质的反应, 体系中气体相代替了水溶液相。



同样, 在一个精确的特定的低 pH 值情况下, 含足够高的 H<sub>2</sub> 活性的水溶液相变得没有一个氢气占支配气体混合相稳定, 因此通过下面主要物质的反应和所有其他涉及次要的被还原和中性物质的反应, 体系中气体相代替了水溶液相。



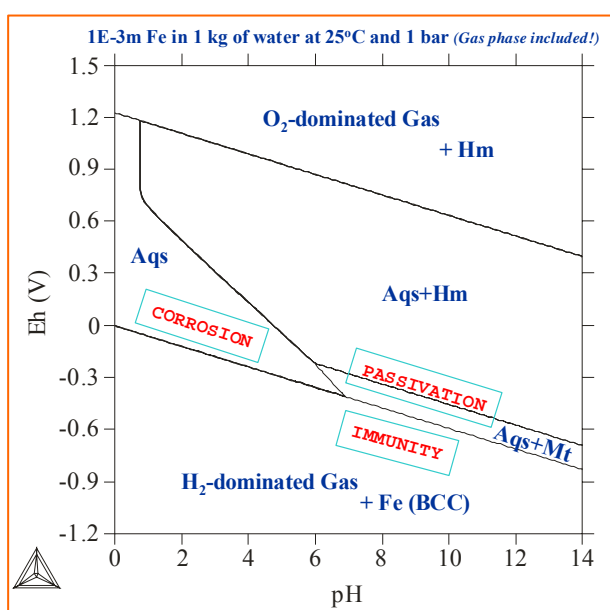
当然, 从一个水溶液相到一个 O<sub>2</sub>- 或 H<sub>2</sub>-占支配地位的气体混合相的转换取决于所有相的摩尔吉布斯自由能, 该摩尔吉布斯自由能是温度和压力的复杂函数。在 Thermo-Calc 软件中吉布斯自由能最小化的技术确保这种相转化的正确性



**图 10-8.** 纯水在 25°C 和 1 bar 下的 pH-Eh 图(图 8a); 3mNaCl-0.001mCO<sub>2</sub>-0.001mSO<sub>2</sub> 在 150°C 和 100 bar 下的 pH-Eh 图(图 8b)。注意在计算中气体被包括在内。

在图 10-8 中, 计算体系中包括了气态混合相。在上面的区域(高 Eh 值)和下面的区域(低 Eh 值), 溶液相(水)被分别氧化和还原成 O<sub>2</sub>- 和 H<sub>2</sub>-占支配地位的气相。比较两个图表, 当一些溶质溶解在水溶液中和当温度-压力情况变化时, 可以看到在上面和下面的在溶液相(水)和气相(被氢气控制或被氧气控制)之间的边界可以转换。

因此, 在平衡体系中考虑了这种氧化还原反应, 就是说, 气体混合相被包括在计算中, 1 千克的含 0.001 摩尔 Fe 的纯水体系在 25°C 和 1 bar (图 10-9)的条件下, 铁的 Pourbaix 图与气相不被包括 (图 10-7)的看起来不同。它体现了在严格的热力学平衡意义上的体系的完整的 Pourbaix 图。



**图 10-9 铁的 Pourbaix 图 (含 0.001 摩尔 Fe 的 1 千克的纯水体系在 25°C 和 1 bar 的条件下; 气体被包括在计算中)。**

注意气体混合相被包括在体系计算中。在上面部分 (高 Eh) 和下面部分 (低 Eh), 水溶液相被分别氧化和还原成 O<sub>2</sub>- 和 H<sub>2</sub>-控制的气体相。当 Fe-BCC 稳定的与 H<sub>2</sub>-控制的气体共存, 赤铁矿也与 O<sub>2</sub>-控制的气体相共存。磁铁矿的稳定区域可能稍微的向 H<sub>2</sub>-控制的气体区域延伸(在那里它与气体混合物共存, 而不是液体溶液), 但是由于不存在水溶液相, 它和 Fe (BCC) 的边界不能被画出。

注意在不存在水溶液相的 O<sub>2</sub>- 和 H<sub>2</sub>-所控制的气体相稳定区域中, 根据它的定义  $\text{pH} = -\log_{10}[\text{ACR}(\text{H}+1)]$  和成分 H+1(在水溶液相中始终作为 H<sup>+</sup>) 的参考状态计算 pH 值是不可能的。所以, 在一般的 Pourbaix 图上, 在气体相和金属或第二相(*i.e.*金属氧化物)之间对任何可能的相界来说没有线被画出。

此外, 依赖在不同种类的相互作用系统中的主要化学成分, 第二相 (它随着相互作用过程形成) 不仅可以是氧化物, 也可以是可以或不可以产生金属的氢氧化物, 硫化物, 硫酸盐, 碳酸盐, 卤化物, 等等。从这方面讲, 在不同的 pH-Eh 区域针对一个包含多组成物的合金(或其他材料)的相互作用的系统, 一个复杂的水溶液(像 H<sub>2</sub>O-NaCl-KF-CaSO<sub>4</sub>-MgCO<sub>3</sub>-...)和一个相关联的气态混合相, 和多种第二相的形成(*e.g.*那些可能在水解, 氧化, 还原或其他反应中形成的氧化物, 氢



氧化物, 硫化物, 硫酸盐, 硝酸盐, 硅酸盐, 碳酸盐, 卤化物, 等。), 计算 Pourbaix 图会对理解材料在腐蚀过程中的钝化行为提供有价值的信息。

另一个关于 Pourbaix 图的重要概念是: 一个 pH-Eh 图经常与一个交互作用系统相联系。在这个系统中, 一定量的初始合金 (或其他浓缩材料) 已经与一个通常由 1 kg 的水和指定溶质浓度初始组成的水溶液, 在被定义的温度和压力条件下活跃地反应。“活跃地”, 这里是指该量的浓缩材料与被指定的水溶液相完全的平衡。当相互作用体系的主体成分改变时, Pourbaix 图将会在一定程度上不同。例如, 在图 10-9 (和图 10-7), 在 25°C 和 1 bar 条件下, 在平衡计算中, 0.001 m Fe 被作为 Fe 的初始成分已经与 1 千克的纯水活跃地反应, 而在图 10-10 中采用了其他 Fe 的初始成分, 或相互作用的水溶液成分被改变, 或温度和/或压力被改变。

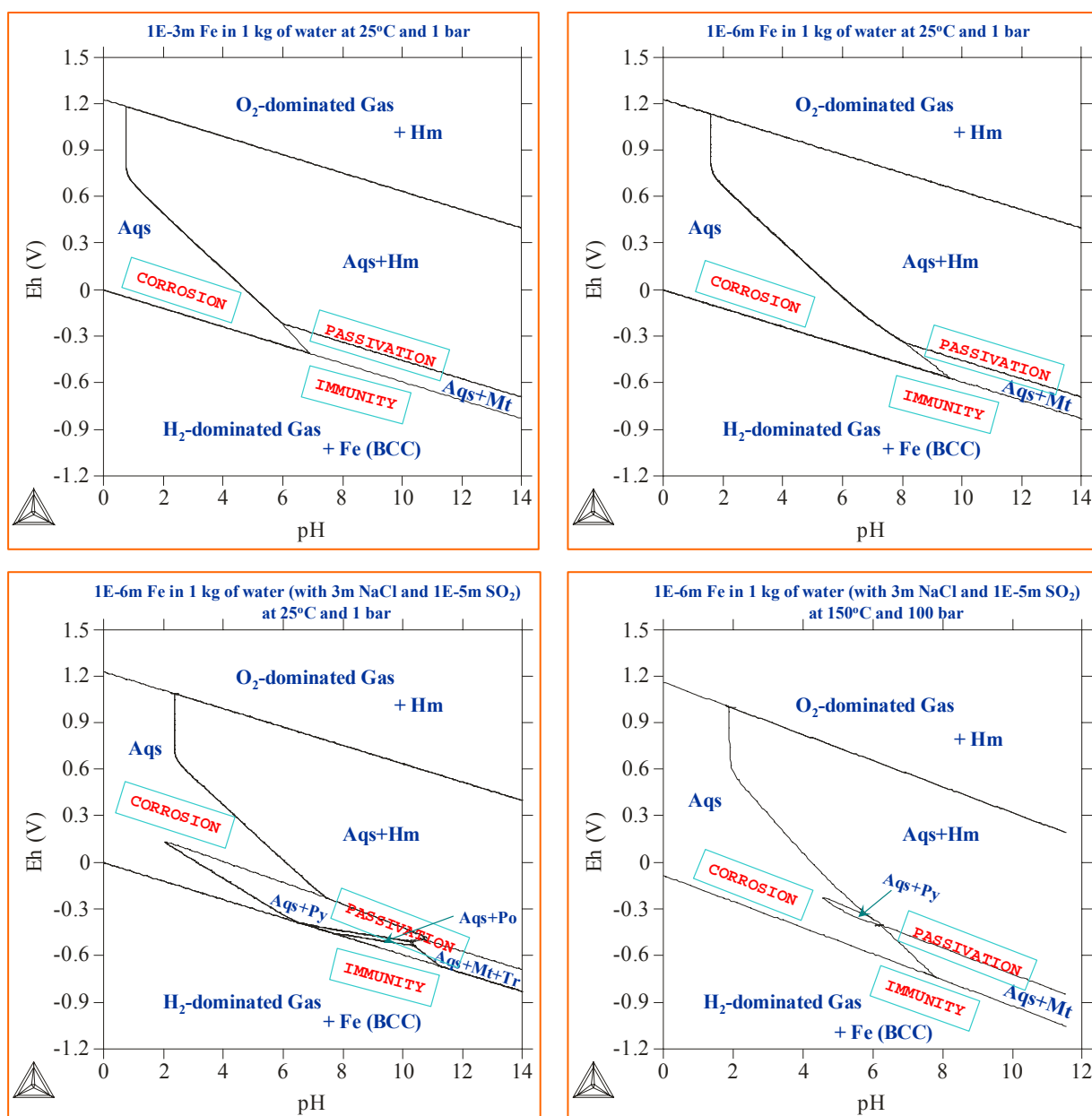


图 10-10. 铁的 Pourbaix 图(多种的在不同的温度和压力情况下铁与纯水或水溶液活跃地反应的图; 气体在计算中被包括。).

10a. 1E-3 m 的铁活跃地与 1 kg 的纯水反应, 在 25°C 和 1 bar 条件下 (与图 10-9 相同)

10b. 1E-6 m 的铁活跃地与 1 kg 的纯水反应, 在 25°C 和 1 bar 条件下



**10c. 1E-6 m 的铁活跃地与 1 kg 的纯水, 3m NaCl 和 1E-5 m SO<sub>2</sub> 反应, 在 25°C 和 1 bar 条件下**

**10d. 1E-6 m 的铁活跃地与 1 kg 的纯水, 3m NaCl 和 1E-5 m SO<sub>2</sub> 反应, 在 150°C 和 100 bar 条件下**

注意, 随着初始铁含量从 1E-3m (10a) 降低到 1E-6m, 活跃的金属腐蚀区域扩大了(10b)。在反应体系中引入二氧化硫会引起多种硫化物(黄铁矿, 磁黄铁矿, Tr-troilite)的形成, 并会增大钝化区域(比较 10c 和 10b)。改变体系的温度和/或压力情况会影响多种铁氧化物/硫化物的稳定区域(比较 10d 和 10c)。随着体系初始主要成分或者温度-压力情况改变, 水溶液和 O<sub>2</sub>- 或 H<sub>2</sub>-控制的气体混合之间的相界改变。

因此, 一种元素(或合金或浓缩材料)的 Pourbaix 图的形状和多种第二相(氧化物, 氢氧化物, 硫化物, 硫酸盐, 碳酸盐, 硝酸盐, 硅酸盐, 卤化物或其他形式)的稳定性关系取决于下面的在交互作用体系中的因素:

- a) 浓缩材料的初始数量和成分
- b) 相互作用水溶液相的初始数量和成分
- c) 温度和压力条件

## 10.7.2 POURBAIX 模块的描述

水溶液相的 pH 值和 Eh 值通常是主要成分、温度和压强的复杂函数。对上边提到的多种组织采用的传统的处理方法来说, 在 pH-Eh 的计算中一些热力学的近似经常被使用, 而且这些方法只能被应用于简单的体系中。尽管如此, 一个可以预测在一个特定的物理化学条件下的多组分合金的水溶液的耐蚀性的模型机制仍然是难以实现的。

然而, 通过 Thermo-Calc 软件中所实现的多种多样的非理想溶液相的全面的 thermodynamic 模型和数据库, 我们可以在一个宽广的温度-压力-成分条件下精确地计算包含了多种交互作用体系的溶液相的 pH 值和 Eh 值和完整的 Pourbaix 图, 以及许多其它种类的性质图。

这些计算可以在一个常规的方式下执行, 就是说, 通过利用多种的基础模型(TDB, GES, POLY 和 POST)。换句话说, 一个人可以通过传统的方式, 就是说, 使用多种的 TCC 命令, 来计算 Pourbaix 图。然而, 这样做需要高超的技术。由于定义不同相互作用体系, 一些成分的参考状态, 平衡条件, 水溶液性质, mapping 变量, plotting 变量, 等等的复杂性, 很好地掌握平衡计算和绘图的表达通常是非常困难的。因此, 在 TCC 软件中使用一些专门的和容易使用的模型是必要且方便的。

所谓的 **POURBAIX** 模型从 TCCL (1996)中最先被实行, 并且后来已经被连续的改良和更新。这个模型并发展为涉及到水溶液相的多种不同种类的相互作用系统自动地构建 Pourbaix 图和其他种类的特性图。一些其他的专门或容易使用的模型, 例如, 计算优势区图的 PREDOMIN 模型, 和计算用的物种形成百分率的 PRECSP 模型, 在将来的译本中将会被完成。

在这个版本中被给出的是一些 **POURBAIX** 模型的全面的描述, 包括模型的发展历史, 对定义不同的相互作用体系的基本要求, 和模型的主要特征 (分子结构, 问题行界面, 计算和绘制 Pourbaix 图和性质图的特殊的技术, 等等)。多种相的相关的热力学模型和数据库 (水溶液, 气体混合物, 固体溶液和化学计量 固体) 将会被简要地回顾, 对那些模型和数据库的细节作者可以参考书中的相关部分。此外, 给出了在定义一些水溶液的性质时的一些细节(保存在 Thermo-Calc 软件的存储空间, 或在 POLY 模型平衡计算结果中列出, 或在 **POURBAIX** 模型中展示出绘制图案)。最后, 展望了该模型潜在的应用和将来可能的发展, 并演示了一个模型计算过程的典型例子。

### 10.7.2.1 POURBAIX 模型的发展

**POURBAIX** 模型的发展与以下模型发展同时进行 (1) 在针对复杂水溶液相的 GES 模型的一些热力学模型的完成, 这种模型可有效应用在一广泛的温度-压力-成分范围; (2) 在 TDB 模型

中的水溶液数据库的发展,对于多种固体,液体和气体,这种模型与其它 Thermo-Calc 软件包的数据库有内在一致性和兼容性。(3) 在 POLY 模型中针对水溶液相的输出结果的修正。

该模型的 1.0 和 2.0 版本可以在以前发行的 TCC 软件 (L 和 M 版本)和 TC4A (1.0 和 2.0 版本)中找到。那些先前的版本只能使用专为该模型设计的包括一个水溶液相,一个气相和一些纯固体和固体溶液的单一数据库(就是说, PAQ,特别是 AQ 和 PAQ)。这限制了它的应用,因为这两个免费的小型数据库只包含了几个元素,且在模块中对多样的数据库使用的选择要求较高。在先前的版本中也有很多限制和缺点,正如下面所概括:

- 在计算一些复杂体系的所有稳定相界时,模型也许会失败;
- 模型产生的\*.POLY3 文件用作其他用途时非常困难,例如在 POLY 模型中的步进计算,这是由于在适当定义水溶液性质的多种函数/变量/表格和在定义水溶液和电子相/组成物/成分状态和参考状态时的复杂性。
- 模型与用户在绘制 Pourbaix 和性质图表中取得更好的外观和更简单的修改途径的互动困难;
- 对一些问题,模型没有完整的在线帮助描述;
- 模型没有考虑带电气相,因此所有带电的气体种类将会被忽略;
- 模型不能计算在特定的温度,压强,主体成分下,一个水溶液相可能存在的高 pH 极限,所以用户在选择一个 pH 轴的缩放比例时会有困难。

POURBAIX 3.0 和 4.0 版本可以分别在 TCC 的 N 和 P 版本中得到。为了更好地控制 POURBAIX-模型计算和绘画处理,许多选项和自动的程序已经被改善和添加。因此,在不同的温度,压力和成分下,模型可以有效地执行计算,并且可以很好地对复杂的不同种类的相互作用体系,进行多种类型的绘图处理。用户甚至可以直接与 POLY-模型计算或 POST-模型的后处理模型在 POURBAIX-模型构架内相互作用。主要的更正和提高已经在下边总结出来:

- 多种数据库选项的完成,它是一个水溶液数据库和为气体混合相,化学计量固体和固体溶液相增加的一个或多个附加数据库的结合。
- 与溶液系统的多种热力学模型和相关数据库的多样兼容性。
- 对 H<sub>2</sub>O EOS 和热力学特性的更精确的计算。
- 对计算一个复杂的 pH-Eh 图来说,更稳定的平衡计算方法和更高的安全性,通过两个简单的选项来完成:
  - 在更多方向上增加更多的起始点(按照与定义的温度和压强独立编码),
  - 使用较少的 mapping 步长(按照 pH 和 Eh 值),和其他可见的选项(如果有必要,则在一些计算点上,模型会自动的运行);
  - 设定更高的数字精度,
  - 与 POLY-3 模型相互作用,以便用户可以更好的设定条件并简单地得到初始平衡,通过输入指令“B”(BACK)能够回到 POURBAIX 模型。
- 对多样的计算和绘图过程来说,一些限制和参数的更多智能和自动的设置,比如:
  - 对在一定温度-压强-成分条件下一个化学系统最高的 pH 界限的计算;
  - 对一个合适的计算,当指定了体系成分和压强时,最高温度限制的寻找;
  - 当定义了温度-压强-成分时,对于 mapping 或 stepping 计算的适当起始点的安排;
  - 合适的 mapping 或 stepping 变量和他们的最小和最大值和步进因数的安排;
  - 一个特定的图表的坐标轴变量和它们的轴类型,轴说明和单位,缩放比例状态(最小-最大值和真实的/半手动的或自动的缩放形式),等等的定义;
  - 图表标题、副标题、曲线加标记的选项、区域加标记的说明和它们的坐标、字体和大小的定义;
  - 在计算和绘图处理期间的各种不同类型的默认文件名或用户自定义的文件名和扩展名。

- 较多的提示和与 POLY 或 POST 模块选择性的或强迫性的可靠的相互作用, 以便用户能方便地而且适当地修正一些体系成分和参考态的必要定义, 或调整一些初始平衡的计算条件, 或进一步改善一个绘制的图表。
- 通过提供更多的与 POST 模块的自动和间接的相互作用, 甚至允许一些和 POST 模块的可选择的和直接的互相作用, 产生 Pourbaix 图表和各种不同的性质图表以及充分修正和改进这些图表的外貌的较多的自由和较容易的程序,

所有这些主要和其他其次的改善和提高将会鼓励 Thermo-Calc 的用户连同为非常宽泛的工业研究和发展应用的更多可利用的水/钢/合金/炉渣/矿物/.....数据库一起使用该模块。 下面的描述以这个新的版本为基础。

### 10.7.2.2 计算 Pourbaix 图表的基本需求

在一个热化学计算程序中为了要建立一个 Pourbaix 图表满足下列要求很重要:

1) 一定要有包含一个水溶液相的数据库。(也就是说, 水为溶剂, 水的离子/络合物当做溶质) 这样的数据库可归纳到下列两类中:

- 包含一个水溶液相和一个气体相和一些固体相的数据库, 可以在 POURBAIX 模块中的 Single-Database 选项中使用。TC Public 水溶液数据库, PAQ(和 TCC 和 TCW, 和 TCC-Demo/TC4A 和 TCW-Demo/TC4W 中一起免费发行) 就属于这一类(见下面的详细描述)。用户可以使用满足数据库的特殊要求的自定义的数据库。
- 数据库只包含一个水溶液相, 但是 POURBAIX 模块也必须要从一些其他的数据库中添加气体混合相和固相。这些数据库能用于模块中的 Multiple-Database 选项。TCAQ 和 AQS 水溶液数据库属于这一类, 这些数据库能与 SGTE 物质/溶液数据库、TCAB 钢/合金和高温合金数据库, TGG 矿物/Geochemical/环境的数据库等以及用户的自定义数据库连接。

2) 由于在 Thermo-Calc 的软件中水溶液模型 (SIT, HKF, Pitzer) 的限制, 水溶液数据库的设置一定与 PAQ、TCAQ 或者 AQS 水溶液数据库中的设置格式相同(包括相-成份-物种, 默认成分, 相-成份-物种的状态, 0-H-ZE 的成分的参考态的定义)。此外, 尤其应该记住下列规则:

- 电子被定义为一个特殊元素 (ZE), 是参考电极相 (REFERENCE\_ELECTRODE) 的唯一成份, 以及水阳离子和阴离子, 而不是其他中性水溶液物种;
- 空位 (VA) 对水溶液相的定义是不必要的, 因此在数据库中的水溶液相的相成分定义时要避免;
- 包括溶剂和溶质的所有水溶液物种位于一个亚点阵位置, 并非二个或多个亚点阵。与溶液的二亚点阵模型相比, 这使计算、分界面和后处理更加简单、快速和方便。

3) 除了AQUEOUS (水溶液) 相, 通常存在一个GAS(气体混合) 相, 且对于多元体系通常存在一些固体相(化学计量相或固体溶液)。气体混合相至少包含  $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{O}_2$  和  $\text{H}_2$ , 而其他的中性和带电气体物种也可以是它的组份。就像在第 10.7.1 节中叙述的一样, 一个Pourbaix图表能为一个有或者没有气体混合相的交互作用体系而建立, 但是在严格的热力学平衡意义上的Pourbaix

图一定在体系中有气体混合相。气体混合相或固体溶液相的热力学模型通常是独立于水溶液相的模型;然而,对主要成分  $\text{H}_2\text{O}$  在溶液(纯水)、气态(纯蒸气)和固态(纯冰)状态的EOS (状态方程)和热力学性质一定是在内部一致的。

已经在第 10.7.1 节提到,Pourbaix 图通常显示在一个水溶液相,一个气体混合相和一些固相(化学计量相或溶液相;举例说明,合金体系中合金相和第二相)之间的异种交互作用。然而,在计算一个 Pourbaix 图时可以不考虑气体混合相;在这种情况下只计算了水溶液相和一些固相(合金和第二相)之间交互作用。在计算一个 Pourbaix 图时也可以不考虑第二相;在这种情况下,只有进入水溶液(和气体混合相)的分解的合金成分可以被计算。然而,这种的计算可能体现不出真正的异种交互作用。因此,一些第二相通常在计算是不可或缺的(这些相存在于 PAQ Public 水溶液数据库中或者能从 SSUB/SSOL 或其他的数据库中添加)。与 PAQ Public 水溶液数据库相似,用户也可以在一个合金数据库中附加一些必需的第二相(和一个气体混合相),以便用户可以马上将它增加到体系中,而水溶液相是从 TCAQ 或 AQS 水溶液数据库得到。

### 10.7.2.3 POURBAIX 模块的主要特征

在下面概述了一些主要的特征,如在子部分 10.7.8 节说明并演示的一个典型的 Pourbaix-图计算的细节。

#### 1) 清楚定义的模块结构和唯一的主选项:

模块以直接的方式运行一个新的 Pourbaix-图表的计算,在这种方式中数据的选择,体系的定义,温度,压力和成分的设定一步一步地被作出。它也提供了基于一个相同计算的(保存为一个 \*. POLY3 文件)绘制许多其他的性质图表,和执行在不同的温度-压力-成分条件下,但是使用保存在 \*. POLY3 文件中的相同的数据选择和体系定义的的其他计算的可能性。

一旦用户打开了模块这些将会被决定,通过回答问题 "Select option" 从下列四个选项中选择一一个:

- 1 开始一个新的 Pourbaix-图的计算;
- 2 打开旧文件并绘制其他的性质图;
- 3 打开旧文件并做另外的一个 Pourbaix-图的计算; 以及
- 4 打开旧文件并做一个stepping计算。

注意: 这四选项在下列的说明中分别被当做主选项 1, 2, 3 和 4 引用。为了方便,我们将主选项 1 和 3 叫做 Pourbaix-图计算选项,将主选项 4 叫做步进计算选项,将主选项 2 叫做性质图处理选项。

表 10-1 提供了每个主选项的简要描述。有关这些选项的较多的细节稍后将会给出。

**表 10-1. 在 POURBAIX 模块中的四个主选项。**

| 选项 | 描述 |
|----|----|
|----|----|



|   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
|---|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1 | <p><b>开始一个新的 Pourbaix-图表的计算</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>产生一个完新的 Pourbaix-图表的计算;</li> <li>定义体系主要成分、温度和压力;</li> <li>从一个单一的数据库或多个数据库得到所有的热力学的数据;</li> <li>自动地设立一些相(水溶液, 气体, REFERENCE_ELECTRODE) 的相状态, 一些成分 (O、H, ZE) 的参考态, 等等; <ul style="list-style-type: none"> <li>自动地为除状态变量外的物种/体系参数定义必需的符号;</li> <li>它自动地开始绘制整个的 Eh-pH 的区域, 而且保留结果在*.POLY3文件中(默认为 POURBAIX.POLY3或由用户指定);</li> <li>自动地做出Eh-pH的图作为第一个结果的绘图;</li> <li>用户可以决定是否在一个图表上作各种不同的修改, 绘制其他类型的图表, 在一个 EXP 文件上保留 X/Y 坐标 (默认为POURBAIX.EXP或由用户指定), 等等。</li> </ul> </li> </ul> |
| 2 | <p><b>打开一个旧文件并绘制其他的性质图表</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>打开一个现有的 POURBAIX-模块的计算文件 (例如, 由主选项第 1 或3或4 计算产生的 POURBAIX.POLY3文件), 读取所有的系统定义, 指定的计算条件, 和从先前的 POURBAIX-模块的运行得到的计算结果; <ul style="list-style-type: none"> <li>自动地显示可用于绘制新图表的作为X/Y 坐标的变量;</li> <li>仰赖于被打开的文件的类型(也就是, 用于先前运行中的主选项 1/3 或4), 可直接绘制一个 Eh-pH的图或者一个对应的性质图。也可绘制许多其他的性质图(以各种不同的水溶液特性作为 X/Y 轴)。和在主选项 1 相同, 用户可决定是否在一个图表上作各种不同的修改, 绘制其他类型的图表, 保留X/Y 坐标在*.EXP文件中(默认为 POURBAIX.EXP或由用户指定), 等等。</li> </ul> </li> </ul>                                                        |
| 3 | <p><b>打开一个旧文件并作另外的一个 Pourbaix-图的计算</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>打开一个现有 POURBAIX-模块的计算文件 (例如, 来源于主选项 1 或3计算的POURBAIX.POLY3文件), 从一个先前的POURBAIX-模块运行中读取所有的系统定义和指定的计算条件;</li> <li>使用与先前获得的 POURBAIX-模块计算 (如在主选项 1 或者主选项 3 的其他运行中执行的) 相同的系统定义 (以元素的形式), 但允许用户修改计算条件(如主要成分、温度和压力); <ul style="list-style-type: none"> <li>在*.POLY3文件中保存所有的设置和计算结果, 采用和主选项 1 或 2 中相同的方法生成 Eh-pH的图表和其他类型的图表。</li> </ul> </li> </ul>                                                                                                                        |
| 4 | <p><b>打开一个旧文件而且做步进计算</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>打开一个现有 POURBAIX-模块的计算文件 (例如, 来源于主选项 1 或3或4 计算的POURBAIX.POLY3文件), 从一个先前的POURBAIX-模块运行中读取所有的系统定义和指定的计算条件;</li> <li>使用与先前获得的 POURBAIX-模块计算 (如在主选项 1 或者主选项 3 的其他运行中执行的) 相同的系统定义 (以元素的形式), 但允许用户修改计算条件(如主要成分、温度和压力), 如果必需, 改变一些成分定义, 而且选择一个条件作为步进变量并指定步进范围;</li> </ul>                                                                                                                                                                                                                |

- |  |                                                                                                                                |
|--|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  | <ul style="list-style-type: none"> <li>在打开的*.POLY3文件中重写所有的设置和步进结果，而且以和主选项 1 或 2 或 3 中同样的方式，首先生产一个默认特性图表和接下来的其他类型图表。</li> </ul> |
|--|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

## 2) 简单易用和基于问题行的界面:

- 对特定的热力学计算，为使用户和软件之间的交互过程比一般的 Thermo-Calc 选项更加简单和方便，POURBAIX 模块是非常简单的而且容易的，POURBAIX 模块由如下方法建立：用户仅仅需要回答一些关于所选择使用的数据库的非常简单的问题，以及对感兴趣化学体系的定义，和对温度、压强和成分条件的设定，然后程序自动地设定 mapping 或 stepping 变量、开始或者重复计算，而且绘制一个 Eh-pH 的图或一个性质图；假使绘制另外的性质图表，或改善或输出一个绘制的图表，对一些简单问题给出清晰的回答就可以了。
- 所有的计算程序中发生的疑问都用一种非常简单的方式设计。通常，疑问可很好地自我解释，而且对一个特定的疑问，一个默认答案已被选择出来并显示在括号中(/.../)。
- 如果在疑问提出之后给出一个问号“？”，用户通常能得到一些有帮助的信息，以便模块能真正提供一些有用又适当的意见和提议给用户；在那之后程序通常重复用户将回答的疑问。在一些子选项（通常容易理解）之下，模块可能不提供专门的评论，但是这将不在进行模块计算和处理方面引起任何的中断。
- 在一些地方中，存在一些反复确定或者修该之前关于计算或图象处理的设定和定义的相应选项，以使用户可以依照自己的设计和偏爱进行修改。
- POURBAIX 模块有它完全的自我定义结构和基于问题行的界面，意味着所有它与各种 TCC 模块（TDB、GES、POLY 和 POST）的外延连接都在各种子程序中编码并不在用户界面上。通过这种结构和界面，用户确实需要考虑有关下面事务的命令和技术细节：关于如何获得热力学数据，定义系统成分和平衡条件，计算开始的平衡点，指定 mapping 或者 stepping 变量，为 mapping/stepping 程序产生出发点，为图表轴选择变量/类型/长度/文字说明，命名图表名称和副标题，加曲线-/区域标记的文字说明，修正并且改善图表外形，保存和组织各种类型的文件，等等。然而，模块在一些步骤中会为临时与 POLY 或 POST 模块交互作用提供一些选择性的或强迫性的选项，允许用户为平衡计算或图象处理适当地修改或改进一些设置和定义。与一般的 POLY 或 POST 模块不同，在这种选择性的或强迫性的交互作用中错误信息可能不会出现在屏幕上。此外，只有 B (BACK) 指令将会让用户离开当时的相互作用的 POLY 或 POST 模块并回到 POURBAIX 模块中之前开始 POLY 或 POST 模块计算时的地方。下面将会描述这种可选择性的或强迫性的和 POLY 或 POST 模块的交互作用。

## 3) 选择单一数据库或多数据库的方便选项:

POURBAIX 模块（在 TCCN 的 3.0 版, 在 TCCP/TCCQ 的 4.0 版, 在 TCCR 的 5.0 版）也可以解决热力学数据输入的单一数据库和多数据库的选项的问题，而且在多数据库的情况下没有必要使用那些专门为模块设计的数据库。

- 如果选择了单数据库选项，模块将会为自己要求一个专门设计的数据库(也就是，为 Pourbaix 模块计算设计的 PAQ Public 水溶液数据库, 包括 11 种元素)。这样的一个数据库包含计算完整的 Pourbaix 图表的所有的必需的相(水溶液相，一个气体的混合相和一些纯固体和固体溶液相), 但是通常被限定于一小部分元素和相。
- 如果多样-数据库选项被选择，模块将会首先要求一个水溶液数据库(例如，与在 SSUB/SSOL 数据库中相同的包含 83 个元素的 TCAQ 水溶液数据库，或与在 GCE 数据库中相同的包含 46 个元素的 AQS 水溶液数据库，或者一个用户自定义的水溶液数据库)。这种水溶液数据库将至少包含 AQUEOUS 和 REF\_ELECTRODE 相。然后用户可以从其他合适的数据库中增加一个或多个关于气体、纯固体和固体溶液或其他的相的数据库(例如，SSUB/SSOL、TCFE/[炉]渣/离子、TTNi/TTTi/TTAl/TTMg、TCMP、TCES、GCE，等等。 )。

#### 4) 化学体系，体系成分和主要成分的任意定义：

- 通常一个异类的交互作用体系的对于一个特定主要成分的体系的 Pourbaix 图和相关的平衡特性被计算，通常用 1 千克水和一定量的溶质物质。这意味着二个元素（氢和氧）默认地已经在体系中定义因此不需要重新定义了, 只要输入溶质以便定义完整的体系。在平衡的状态，溶质可能完全地进入水溶液（在 Pourbaix 图的腐蚀区域中）或部分地被溶解同时形成一些固体相(在钝化区域中)。
- 一个化学体系和它的物理化学性质（主要成分和温度/压力）通常在主选项 1 中被定义，而主要成分和温度/压力条件能在所有三个主选项(1, 3 和 4) 计算中修改。保存在现有的或重新打开的 POURBAIX-类型\*.POLY3 文件(通常代表早先计算的最后平衡点)中的化学体系、主要成分和温度/压力条件, 总是在主选项 2, 3 和 4 中被列出。如果用户希望改变化学体系(根据元素)，他/她必须从主选项 1 重新开始。
- Pourbaix-图的计算选项（主选项 1 和 3）通常使用唯一的和不变的设置作为系统成分和它们的参考态。对于基本元素 O 和 H, 以及电子，系统成分总是分别地被定义为 H<sub>2</sub>O、H+1 和 ZE。对于 H<sub>2</sub>O、H+1 和 ZE，他们的参考态和状态永久的和不变的被定义如下：

| 成分               | 状态      | 参考态                 | Ref-T(K) | Ref-P(Pa) |
|------------------|---------|---------------------|----------|-----------|
| H <sub>2</sub> O | ENTERED | AQUEOUS             | *        | 100000    |
| H+1              | ENTERED | SER                 |          |           |
| ZE               | ENTERED | REFERENCE_ELECTRODE | *        | 100000    |

注意成分H+1在AQUEOUS相中的参考态的设置和在SER(standard element reference)中相同。

对于其他的化学元素，体系成分通常和元素的定义相同。他们的参考态定义通常是标准元素参考(SER，如在水溶液数据库中所定义的（例如，PAQ、TCAQ 或者 AQS），但是当POLY模块



选择性地或强迫性地和 POURBAIX 模块交互作用时或所谓的在POURBAIX 模块之外时不能被用户改变。他们的状态在Pourbaix-图计算中总是被设定为ENTERED。

然而, stepping计算选项 (主选项 4) 允许用户转换一些溶解成分的定义(也就是, 除了  $H_2O$ 、 $H^{+1}$  和  $ZE$  以外), 通过从默认的和预先设定的元素到一些假想的盐的形式, 比如从  $Na$  或  $Cl$  到  $NaCl$ , 从  $K$  到  $KOH$ , 从  $Ca$  到  $CaSO_4$ 。这种对成分定义(和任何成分的参考态, 或任何相的状态, 或一些条件)可做的更改是使用户可以在内部-连接POLY模块中以进一步修改体系定义和条件时的可选择选项。结果, 用户可以更加方便和直接地用stepping变量对这个体系进行计算, 例如,  $m(NaCl)$ 。

此外, 在所有的计算选项(主选项 1, 3 或 4)中, AQUEOUS和 REFERENCE\_ELECTRODE相的状态被永久的和不变的设置成ENTERED和 SUSPEND。如果必需, 对于进入异种交互作用系统之内被定义的其他各种相的状态可以被改变为其他状态 (SUSPEND, FORCED 或DORMANT), 当 POLY模块选择性地或强迫性地与 POURBAIX 模块交互作用时或所谓的在POURBAIX 模块之外时。

- 化学体系和它的主要成分能根据元素 (如  $Fe$ 、 $Ni$ 、 $Na$ 、 $Cl$ ,  $C$  或者  $S$ ) 或任意的复杂物种 (如  $NaCl$ 、 $CO_2$ 、 $CoCl_3$ 、 $Fe_{0.93}S$ 、 $NaSO_4$  或  $H_2SO_4$ ) 以及它们各自的以摩尔表示的初始成分(即, 作为重量莫尔浓度因为互相作用的溶剂通常是 1 千克的水, 见上)。每次, 这个程序将要求一个溶质和对应的重量莫尔浓度, 它可在顺序的二行中或在一行中给定; (例如,  $NaCl$  2.5) 然后它将会自动地将他们分离进入元素和他们的摩尔分数中。注意, 输入主体成分时, 元素符号的第一个字母一定要是大写, 但第二个 (如果存在)要是小写(见上面的例子)。如果出现一些错误的输入(例如, 在数据库中缺少的元素, 或不正确的字母), 程序稍后将会检查数据库, 而且自动地从系统定义除去他们。

注意, 如果负号紧挨着在离子名字之后给出, 它可能有时在负离子的计数或者分离上会有困难, 至少对于第一个这种物种是这样的[例如,  $Cl^-$ ,  $F^-$ ,  $I^-$ ,  $Br^-$ ,  $HCOO^-$ , 由于现行版本中一些未知程序错误]。在这种情况下, 用户可以通过在负号前给出数字“1”来避免该问题[例如,  $Cl1^-$ ,  $F1^-$ ,  $I1^-$ ,  $Br1^-$ ,  $HCOO1^-$ , 等等]。对于名字中的最后一个元素的化学计量系数不是1的负离子/络合物[例如,  $HCO_2^-$ ,  $NaSO_4^-$ ,  $HSO_4^-$ ]和所有的正离子/络合物[例如,  $Cu^{+2}$ ,  $CuNO_3^+$ ,  $Cu(OH)^+$ ]来说没有这种问题。因此最好提供体系的主体成分, 如果可能, 以中性物种(假想的盐或酸或碱, 比如  $NaCl$ 、 $NaNO_3$ 、 $HCl$ 、 $Ca(OH)_2$ , 等等)的形式给出, 比如

---

```

Ni .7
Cr .21
Mo .09
NaCl 3.5
KF 0.5
NaNO3 .5
KNO3 .3
K2SO4 .1
Ca 1e-3

```

Mg 1e-3  
SiO2 0.1

---

代替 带电物种 (如 Na<sup>+</sup>, Cl<sup>-</sup>, F<sup>-</sup>, 等):

---

Ni .7  
Cr .21  
Mo .09  
Na<sup>+</sup> 4  
K<sup>+</sup> 1  
Ca<sup>+2</sup> 1e-3  
Mg<sup>+2</sup> 1e-3  
Cl<sup>-</sup> 3.5                   (代表 Cl<sup>-</sup> 3.5; 见上面描述)  
F<sup>-</sup> 0.5  
NO<sub>3</sub><sup>-</sup> 0.8  
SO<sub>4</sub><sup>-2</sup> .1  
SiO2 0.1

---

然后程序将会根据已定义的成分(NA, K, CA, MG, SI, NI, CR, MO, CL, F, N 和S) 将他们分离为各组分。就像上文提到, 对于成分 H<sub>2</sub>O, 模块总是设置它的初始成分为 B(H<sub>2</sub>O)=1000, 而对于成分 H<sup>+</sup> 和 ZE, 模块将会在pH和Eh条件的每一点评估他们的平衡成分。由于水的电解和氧化还原作用[H<sub>2</sub>O=2H<sup>+</sup>+O<sup>-2</sup>, H<sub>2</sub>O=H<sup>+</sup>+OH<sup>-</sup>, O<sup>-2</sup>-2e<sup>-</sup>=0.5 O<sub>2</sub>(aq), 2H<sup>+</sup>+2e<sup>-</sup>=H<sub>2</sub>(aq)] 以及电子的平衡, 两者都被pH和 Eh值和内在的置换反应所控制, 模块将会自动地计算有多少 O<sup>-2</sup> 将会被产生或消耗( 建立或者分解与 O<sup>-2</sup> 有关的物种, 如NO<sub>3</sub><sup>-</sup>, SO<sub>4</sub><sup>-2</sup>, CO<sub>2</sub>, HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>, 等等), 和有多少 H<sup>+</sup>和 ZE从体系中增加到或去除。

➤ 当程序从所选数据库中(单一或者多个的组合)获得热力学数据时, 像在其他简单易用模块中一样(例如, SCHEIL, BIN 和 TERN 模块), 一些选项可用来决定是否拒绝/恢复已经在早先的步骤被定义的体系中的任何相; 这个步骤重复执行直到用户满意为止。这种选项特别适用于下列的情形:

- 计算一个含有一个气体的混合相的不完全的 Pourbaix 图;
- 体系中的相太多;
- 在所考虑的P-T-X条件下一些相明显没有其他相稳定;
- 一些相在不同的数据库中是相同的。(如果附加数据库)

此外, 用户可以指定在所定义体系中有溶解度间隙的相。

## 5) 对初始平衡点计算条件的知识库定义:

在主选项 1 中定义了化学体系(和主体成分)之后, 或在主选项 2 或 3 或 4 中打开先前保存的的POURBAIX-模块\*.POLY3文件之后, 模块将会列出要计算的初始平衡点的默认的和预先定义的计算条件(根据温度、压力和成分)。

在程序执行Pourbaix 图的mapping计算或性质图的stepping计算之前，如果这种条件没被确认(在主选项 1 或3 或4 中)，用户可以一步一步地更改它们：

- 第一，体系的主体成分(重量摩尔浓度)一定要被指定。

当为 Pourbaix-图的计算(主选项 1 或 3) 指定体系的主体成分的时候，溶解成分（也就是，除了 O、H 和 ZE 的输入元素）的初始重量摩尔浓度将会被提示，将预先定义或先前定义的值作为默认值，以便确定(按 <回返>) 或修改(指定其他的值)。基体溶剂的主体成分和电子成分(即，H<sub>2</sub>O、H+1 和 ZE) 不能被改变，因此，将不会提示给出进一步的详述。

当为步进-图表的计算(主选项 4) 指定体系的主体成分的时候，图几乎完全相同，除非溶解成分被当作默认输入元素(排除 O、H 和 ZE)或用户指定的假想的盐(如 NaCl、KOH、CaSO<sub>4</sub>，等等)，如果用户已经选择在内部-连接的POLY模块中进一步修改体系定义和条件(见上面第4点)。

- 第二，一定要给出体系压强（以 bar 为单位）。

程序然后将会自动地计算通常在给定的成分和压力条件下所谓水溶液的“沸腾温度”，即最高的可适用温度限度，就是说，一个气体混合相以溶解全部或部分溶质的水溶液相为代价开始形成（一些固体相也可能是稳定的）。因此，当压强被给定，模块可对已定义好的多组分体系的POURBAIX-模块的计算中，告诉用户最高的可适用温度；否则用户可能因为选择水溶液相是不稳定的温度而导致 Pourbaix 图的计算失败。

注意：由于下列一些可能的计算困难，计算最高的可适用温度限度有时需要花一些时间：

- (a) 太多相参加计算；
- (b) 计算循环不够；
- (c) 坏的主体成分或压强条件；以及
- (d) 一些相的坏的状态设定。

结果，首先，程序会自动地改变一些计算方法(例如，在计算相平衡中改变数字的限制，或改变被定义的体系的一些相的状态)。然后，如果没有成功地找到解决方法，POURBAIX 模块将会暂时地与POLY模块连接，而且用户必须执行与在一般平衡计算中相同的一些交互式的POLY选项。所有的 POLY 模型的特点都可以用于这种目的，但要遵守以下原则（关于体系定义和正在计算的平衡的），例如

- 温度不能作为一个条件；
- AQUEOUS相的状态一定是ENTERED；
- 气体相的量为0时的状态一定是FIXED(自这里之后将计算沸腾温度)；
- B(H<sub>2</sub>O)=1000 不能被改变；
- N(H+1) 和 N(ZE) 作为零，可以稍做调整。

一旦获得了平衡(水溶液相和气相同时稳定)，只要键入BACK指令回到 POURBAIX 模块继续计算。

- 第三，需要输入设计体系的温度，必须在 0 °C 和最高限度之间。

## 6) 自动保存定义，条件和mapping/stepping计算结果：

在mapping或stepping计算之前, 涉及到体系定义、成分-相的状态, 温度-压强-成分条件, mapping/stepping变量以及其他的所有信息, 被保存在一个\*.POLY3文件, 在主选项 1中默认名是POURBAIX.POLY3, 或与主选项 3 或 4 的开始步骤的输入相同。在mapping或stepping计算成功之后, 这种文件将会立刻被重写。

对于四个主选项, 各种水溶液相和水溶液物种的各种性质的许多符号 (常数, 方程, 推出变量和表)被自动地定义在模块中。他们被临时地记录在POLY3和 GES5中工作空间中, 但是可选择性地被保存到 POURBAIX-模块\*.POLY3文件中。

此外, 重要的一点是: 在做进一步的主选项2 或3 或4 计算之前, 如果用户认为必要, 自动保存的 POURBAIX.POLY3文件(总是主选项 1 计算之后的默认名字)或打开并重写的POURBAIX-模块\*.POLY3文件已经被复制到另一个\*.POLY3文件, 以保存之前的计算结果或进行其他的POURBAIX-模块计算。

#### 7) 直接打开一个现有POURBAIX-模块文件进行另外的计算或图象处理:

当运行主选项 2 或 3 或 4时, 程序将会询问一个已保存的POURBAIX 模块计算文件的名字, 这个文件一定在当前目录下并且可以被POLY3 和 GES5 工作空间读取。如果该模型是第一次被打开, 默认的文件名以POURBAIX.POLY3出现; 如果模型已经用主选项1 或 3 或 4打开, 该文件名会是先前在Thermo-Calc中输入的文件名 (这表示用户没有离开主程序)。之后程序将会列出那些保存在\*.POLY3文件中的默认的且被预先定义的计算条件(即, 温度、压强和主体成分)。

在主选项 2 中, 这种条件不能被修改。用户只被允许打开包含所有定义和计算结果的 \*.POLY3 文件, 并进行各种图象设置, 精修和其他处理。

- 在主选项 3 中, 由于这选项的实际目的, 通常一些这样的条件需要按照需求修改 (见上述第 5 点关于如何修改条件的详细说明), 并且所有的 mapping 计算结果将会重写到打开的 \*.POLY3 文件中。之后用户将会执行与主选项 1 中几乎相同的程序。
- 在主选项 4 中, 如果需要, 用户可以为初始平衡点计算修改一些此种条件, 甚至可以改变一些体系成分定义和在内部-连接 POLY 模块中的体系条件。之后, 用户需确定 stepping 变量(温度、压强、pH、Eh 或一个成分的重量摩尔浓度) 和它的最小值/最大值限制。用户必须遵从 stepping 计算和绘图处理程序。

#### 8) Pourbaix 图计算中的自动绘图过程:

在主选项 1 或 3 的绘图过程之前, 程序在大多数情况下, 在整个 Eh-pH 区域中会设法寻找多达 8 个初始点。程序通常在考虑对由温度, 压强和主体成分的变化所引起的可能转变的智能安排的自动过程中完成这一目的。如果在这个过程中遇到了困难, 必须由程序自动地或者由用户交互作用 (通过在内部连接的 POLY 模块) 采取另外的选项。这和不能找出最高的可用温度限制的情形很类似 (如下面所描述)。考虑到同 POLY 模块的相互作用, 不应该去改变体系成分的定义和它们的参考态, 但是可以把一个与先前确定的值不同的温度作为平衡计算的条件, 并且新值也会被保存为平衡温度。

为在氧化/酸化状态下建立 Pourbaix 图和其他相关性质图，在程序内部，将绘图变量永久地被设置为  $MUR(ZE)$ （体系假想电极的化学势）和  $LNACR(H+1)$ （在一水溶液为参考态的氢离子的活度的自然对数）。程序会自动地为  $LNACR(H+1)$  和  $MUR(ZE)$  设定最小值，最大值和步进值。当在绘图中指定条件  $LNACR(H+1)$  的最大值时，程序将会自动计算真正水溶液的电离反应  $H_2O_{(水)} = H^+ + OH$  的对数形式( $\log_{10}K_a$ )的平衡常数，它是温度，压强，和水溶液组分的函数。因此，这个常数值可以看作作为当前温度-压强-组分条件下已经定义的化学体系的最高可用 PH 极限。

自动设定开始点可能需要一点时间，特别是对在高温高压或高水溶液浓度下的复杂多组分体系。之后，程序就开始自动绘图计算了。

### 9) 步进计算中的自动步进过程:

程序在主选项 4 开始步进计算之前，将会要求用户从已经定义的平衡条件中选取适当的参数作为步进变量。可选用的参数如下：

|         |          |
|---------|----------|
| T       | 温度 (°C)  |
| P       | 压强 (bar) |
| pH      | 酸度       |
| Eh      | 电极电势 (V) |
| N(Comp) | 组分的摩尔数   |

注意“N(Comp)”是一千克水中与溶液相互作用的组分的摩尔数（也即，溶解的组分，例如 Fe 或 Na 或 Cl 或 NaCl）。关键组分（即是：基本的溶剂和电子组分  $H_2O$ ,  $H+1$  和  $ZE$ ）的摩尔数不应该被用做步进变量，因为它们的成分定义和变化，在模块中已经被水溶液相自动确定了。用户也可以键入“N(Comp)”，例如，“N(Fe)”。如果用户仅仅键入了一个“N”作为步进变量，程序将会把所有能够被选择用于变量组分的组分（这些组分各自有一个索引）列出来，并且程序期待一个索引输入来完成“N(Comp)”输入。

由于程序通常把已经计算的初始平衡点作为开始点，因此，步进变量的最小值的赋值必须小于或等于已知的初始条件，而步进变量的最大值的赋值必须大于或等于已知的初始条件。如果 PH 被设置为步进变量，程序将会对处在当前温度-压强-成分状况下的实际水溶液的电离反应  $H_2O_{(水)} = H^+ + OH$  自动计算它的平衡常数的对数值( $\log_{10}K_a$ )，并且这个常数( $\log_{10}K_a$ )值在步进过程中确定最大值中被作为最高的 PH 值。随后，一个有着默认值的增量因子应该被确定或修改，对于压强和组分的摩尔数，用户可以对数形式( $\log_{10}P$  或  $\log_{10}N$ )确定步进值。

随后，程序就开始自动步进计算了。

### 10) 在完成 Pourbaix 图或步进计算之后，程序会自动产生第一张图表:

一个完整的 Pourbaix 图计算，无论是最新完成的（也就是通过主选项 1）或是经过修改的（也即通过主选项 3），将会自动产生一个 Pourbaix 图，这个 Pourbaix 图以 pH 为 X 轴，Eh 为 Y 轴。用户同样可以选择一个选项通过人工的方式去增加一个潜在的开始点（如果用户怀疑产生 Pourbaix 图有相边界的丢失或者不完整）和另一个选项通过人工的方式改变 pH

或 Eh 轴的绘图步长值使其更小（如果用户认为绘制的 pH-Eh 曲线不够光滑），然而，大多数情况下，这两个选项是没有必要的。

另一方面，一个完整的步进计算（也即，通过主选项 4）将会自动产生一个性质图，这个性质图把步进变量作为 X 轴，把稳定相的数量（在水中的以 mole/kg 为单位的）作为 Y 轴。

这样一个自动产生的图往往已经被精饰过，通过优化设置默认的缩放比例，长度，类型和 X-Y 轴文本，默认的图表名称和副标题，默认的曲线标注选项等等。

然而，这样一个 Eh-pH 图或性质图能在后续步骤中被进一步地修改(通过改变轴的类型, 进行缩放, 改变副标题或轴文本, 改变曲线标注选项, 增添和修改区域/性质属性文本等等), 或者也可以有选择地在内部连接的 POST 模块中进一步进行精饰。这些图表也能转变为一个硬拷贝（可以转换为 PostScript 形式或其他格式的图形文件或送往指定的打印机），也能把经修改或精饰过的图的 X-Y 坐标保存为一个文本 \*.EXP 文件。如需了解这些图表处理和修改的详细情况，请看下面第 12 点。

在主选项 1, 3 和/或 4 中，只要 Eh-pH 图产生了，并且有选择性地得到修改/转换/保存，程序将进一步询问用户是否有必要使用同样的计算结果去绘制其他类型的图表。随后，用户能定义，绘制，修改更多的图表。这些随后的选项实际上与主选项 2 中的一样（如需了解更多详细情况请看下面第 11 点）

#### 11) 根据一个单一计算直接绘制许多性质图：

一个保存在当前文件目录下的\*.POLY3 文件的 Pourbaix-模块计算（可以是一个 Pourbaix-图或一个步进计算）能被用于相同定义的体系和条件并绘制许多有用的性质图。

这些应用不仅仅限于主选项 2（这是为这些目的专门设计的），同样适用于其他三个主选项。在主选项 1 或 3 中，当产生一个 Pourbaix-图之后，将会绘制更多的性质图；同样在主选项 4 中，当产生一个默认性质图之后，也会绘制出更多的性质图。

对于主选项 1 和 3 和对经选项 1 或 3 计算后的主选项 2，下面把一些可充当 X/Y 轴变量的绘图参数设置为常用选择表设计如下：

|       |                               |                      |   |
|-------|-------------------------------|----------------------|---|
| ----- |                               |                      |   |
| I     |                               |                      | I |
| I     | 当在同一次计算中绘制其他图表时，下面这些属性可以充当轴变量 |                      | I |
| I     | pH                            | --- 酸度               | I |
| I     | Eh                            | --- 电极电势 (V)         | I |
| I     | Ah                            | --- 电亲和势 (kJ)        | I |
| I     | pe                            | --- 电子活度 (log10ACRe) | I |
| I     | IS                            | --- 离子强度             | I |
| I     | TM                            | --- 总 浓度             | I |



|   |          |     |              |   |
|---|----------|-----|--------------|---|
| I | Aw       | --- | 水的活度         | I |
| I | Oc       | --- | 渗透系数         | I |
| I | MF(AQsp) | --- | 水溶液物种的摩尔分数   | I |
| I | ML(AQsp) | --- | 水溶液物种的质量摩尔浓度 | I |
| I | AI(AQsp) | --- | 水溶液物种的活度     | I |
| I | RC(AQsp) | --- | 水溶液物种的活度系数   | I |
| I |          |     |              | I |

I 在这里 "AQsp" 是某个特定水溶液物种的名称, 并且 "\*" 是个能代表所有 "AQsp" 的通配符; 没有必要给出水溶液物种的全名, 但输入的 "AQsp" 名必须是单一的。如果既没给出 "AQsp" 也没给出通配符号 "\*", 程序将搜索所有的物种。

在已经定义的体系中列出所有的 "AQsp" (水溶液物种):

|        |          |        |        |           |
|--------|----------|--------|--------|-----------|
| CL-1   | CL2      | CLO-1  | CLO2   | CLO2-1    |
| CLO3-1 | CLO4-1   | FE+2   | FE+3   | FE2O2H2+4 |
| FECL+2 | FE03H3-1 | FE0H+1 | FE0H+2 | H+1       |
| H2     | H2O      | H2O2   | HCLO   | HCLO2     |
| HO2-1  | NA+1     | O2     | O3     | OH-1      |

同时, 对于主选项 4 或在经过主选项 4 计算之后的主选项 2, 通用 "选项表" 设计如下:

|   |                                |   |
|---|--------------------------------|---|
| I |                                | I |
| I | 当在同一次计算中绘制其他图表时, 下面这些属性可以充当轴变量 | I |
| I |                                | I |
| I | TC --- 温度 (C)                  | I |
| I | TK --- 温度 (K)                  | I |
| I | P --- 压强 (Pa)                  | I |
| I | NP --- 稳态相 (摩尔每千克水)            | I |
| I | BP --- 稳态相 (克每千克水)             | I |
| I | N(Comp) --- 所选组分的成分 (摩尔每千克)    | I |
| I | B(comp) --- 所选组分的成分 (克每千克)     | I |
| I | pH --- 酸度                      | I |
| I | Eh --- 电势 (V)                  | I |
| I | Ah --- 电亲和势 (kJ)               | I |
| I | pe --- 电活度 (log10ACRe)         | I |
| I | IS --- 离子强度                    | I |
| I | TM --- 总浓度                     | I |
| I | Aw --- 水的活度                    | I |
| I | Oc --- 渗透系数                    | I |
| I | MF(AQsp) --- 水溶液物种的摩尔分数        | I |
| I | ML(AQsp) --- 水溶液物种的质量摩尔浓度      | I |



|   |                         |   |
|---|-------------------------|---|
| I | AI(AQsp) --- 水溶液物种的活度   | I |
| I | RC(AQsp) --- 水溶液物种的活度系数 | I |
| I |                         | I |

I 在这里 "AQsp" 是某个特定水溶液物种的名称, 并且 "\*" 是个能代表所有 "AQsp" 的通配符; 没有必要给出水溶液物种的全名, 但输入的 "AQsp" 必须是唯一的。如果既没给出 "AQsp" 也没给出通配符号 "\*", 程序将搜索所有的物种。

在已经定义的体系中列出所有的 AQSP (水溶液物种):

|        |          |        |        |           |
|--------|----------|--------|--------|-----------|
| CL-1   | CL2      | CLO-1  | CLO2   | CLO2-1    |
| CLO3-1 | CLO4-1   | FE+2   | FE+3   | FE2O2H2+4 |
| FECL+2 | FEO3H3-1 | FEOH+1 | FEOH+2 | H+1       |
| H2     | H2O      | H2O2   | HCLO   | HCLO2     |
| HO2-1  | NA+1     | O2     | O3     | OH-1      |

在这两个表中, 上面的部分把所有能充当 X/Y 轴变量的参数都列了出来; 而在第二种类型的表中, 一些附载参数 (取决于在主选项 4 计算中所采取的步进变量的类型) 也被列在表中的前面部分。在表的下面部分, 列出了所有能被选择成为性质 (即: MF, ML, AI and RC) 定义并充当 X/Y 坐标轴变量的水溶液物种, 对于同一个体系, 所有四个选项是一样的。

在表的上面部分中, 也给出了可充当 X-Y 轴变量的某一特定性质的输入方法, 即, 这样一种性质可以在下面三种方法中得以确定: (对于每种方法在“ ”中给出了一个例子):

- 对单一水溶液物种而言, 只需以 "ML(Fe+2)" 的格式输入性质和水溶液物种的名称; 这个物种名称没必要是完整的, 但在同一个体系中, 它必须是唯一的。
- 对所有的水溶液物种而言, 只需输入通配符 "\*", 例如: "ML (\*)"。
- 对几个 (或单一) 水溶液物种而言, 首先只需输入属性名称, "ML"。随后, 程序将会列出体系中具有这样一个属性的所有水溶液物种 (对每个水溶液物种均有一个相应的索引)。然后, 在一行中输入这个物种的索引号, 如 "2 4 25 8 10 12 15"。

当选择 "N(Comp)", 即已被选作步进计算的组分的成分, 组分名称必须被清楚的确定下来, 例如: "N(Fe)"。

此外, 在选择 X-Y 轴变量时, 大写字母和小写字母对性质和物种名字来说都是允许的。例如: ML(Fe+2) 或 ml(Fe+2) 或 ml(fe+2) 就是一样的。

对于选项表中的各种参数的定义 请参阅 10.7.2.4: 部分。

## 12) 对已绘图形的简单的图象处理和和精饰:

只要在主选项 1 或 3 或 4 中完成了 Pourbaix 图或步进计算,或者在主选项 2 中 X 与 Y 轴已被指定了属性,程序将立即在屏幕上绘制一张图。通常,这样一个图需要通过一些方法去修改和精饰,例如:改变 X-Y 坐标轴类型,对图形进行缩放(即改变 X-Y 轴的缩放因子,改变曲线标注选项,增添和修改区域/性质标注的文本,改变副标题或轴文本等等),或有选择性地在内部连接的 POST 模块中去进一步精饰图表。修改后的图表连同几个适当选项将会显示在屏幕上。如果用户对图表感到满意,用户可以继续决定是否和如何产生图表的硬拷贝(转化为一个 PostScript 格式的或其他格式的图形文件,或发送到一个指定的打印设备)和是否和在哪里把一个经修改或精饰的图表的 X-Y 坐标保存为一个文本 EXP 文件。当完成这些操作之后,无论是不同的外观或不同的图形格式,用户依然有机会去精饰图表,并且如果用户想输出相同图表的几种版本,此时这一点就显得很有用。

- 当对一个图表进行修改时,程序将会询问是否有必要去改变坐标轴的类型和/或改变 X/Y 轴的缩放比例。然后程序将询问用户是否想使用其他任意曲线标注选项,是否想在相区域添加并随后修改任意 区域/属性 标注文本,是否想改变默认的或先前修改过的图表副标题,以及是否修改坐标轴文本。在每个这种修改选项之后,程序将进一步询问用户如何去完成相关选项操作。浏览所有的选项可能会花一段时间,因为程序要按照相关步骤把经修改过的图表绘制在屏幕上以便检查这些修改。最后,如果用户希望的话,在内部连接的 POST 模块中,程序会允许用户对图表进行进一步地精饰。
- 模块根据被选做轴变量的性质,会自动预定义轴的类型(LIN/LOG/INV)。这里有三种选择去改变 X-Y 轴类型并对轴进行重新设置,即线性(LIN)或对数(LOG)或倒数(REV)三种选择类型。一旦用户作出了这些修改,程序将会为下一张图表而把这些设置保存下来(如果用户想对不同的水溶液物种绘制有相同性质的 X-Y 轴的图表,这一点显得相当有用)。
- 程序根据轴的性质会自动预定义轴缩放参数(最小值/最大值),并把缩放方式预设置为自动方式。为了修改 X-Y 轴缩放因子,用户应该给出最小和最大值(程序通常会给出一些参考值),然后程序将自动确定一个缩放方式(全或半-人工方式)。如果某些修改不对或不恰当,用户可对这个选项和上述关于 X-Y 轴类型选项进行重复操作。当在产生一 PH-EH 或性质图时,pH 被选做 X/Y 轴变量时,模块通常会自动考虑最高 pH 极限。当对这样一个图进行坐标轴缩放操作时,模块将会提醒用户该限制。
- Pourbaix 图的默认选项是 B,而对于性质图这个默认选项是 D,并且标注的意义会被列在图表旁边。为了能修改曲线标注选项,应该输入下面选项中的一个:

- 
- |   |                          |
|---|--------------------------|
| A | 沿线列出稳态相                  |
| B | 和 A 一样,但有着相同固定相的曲线有相同的号码 |
| C | 列出轴的数量                   |
| D | 和 C 一样,但有着相同数量的曲线有相同的号码  |
| E | 和 B 一样,但可以改变颜色           |
| F | 和 D 一样,但可以改变颜色           |

当改变这个选项之后，图表就会被绘制在屏幕上，因此用户能根据自己的喜好重新设置曲线-标注。如果用户想在图上直接增添一些区域标注文本来标注相区或曲线属性（见下），曲线标注选项最好设置为 N。

- 模块允许用户在所有类型的图中增添或修改相区/属性标注文本。对于增添某些区域/属性-标注文本（通常是在曲线标注选项 N 下，见上），用户能对稳定相区域（Pourbaix 图上）或属性（在性质图上）编写自己所希望的标注文本。开始标注文本的 X/Y 坐标应该首先得以确定。随后“自动标注文本”选项可以使程序自动在指定点寻找稳定相。用户需注意的是在 pH-Eh 图中，由于 pH 和 Eh 是衍生变量而不是强度状态变量，这样一个操作往往会失败；然而，这些操作将会被保存在模块中，因为在一些性质图中，X 和 Y 轴被定义为强度变量，这个操作可能会成功。因此建议用户在这里选择“N”（否）来回答，随后用户给出相/组分/物种名称以组成标注文本，这些相/组分/物种名称可以全部输入，也可简写，也可以分开或一起输入，这完全取决于用户的喜好。通常，模块对确定坐标和标注文本时，会自动给出一些建议，但用户应该意识到，自己在绘制图表时，需要一个更加合适的输入。紧接着这个操作之后，另外一个选项也允许用户去进一步进行标注操作。

之后，用户可以确定是否某些增添的标注应该进行修改。如果这样的话，用户首先需要确定要修改哪一个标注，然后改变 X/Y 坐标和（如果要求）在上述选项操作中或在前一轮图表精饰当中已经被确定的标注文本。需注意的是，新文本的长度不能超过先前添加或修改的文本。

紧接着在增添或修改每一个标注文本之后，图表会再一次被绘制在屏幕上。如果用户认为必要的话，模块为了帮助用户纠正 相区/属性 标注文本，将会给用户一个向前或向后到修改曲线-标注选项操作当中的机会。因此，用户可轻易地通过一些曲线-标注选项（通常为“B”或“D”）来确定相的聚集态，并且最终重新设置曲线-标注选项为“N”。

在相区标注过程中，为了在 Pourbaix 图的各个不同区域中可以简单且合适地确定相的聚集状态，用户可把一个自动保存的 POURBAIX.POLY3 文件（或一个打开并且更新的文件）复制到另外一个\*.POLY3 文件。然后在另外一个 TCC 窗口中打开新的文件，并到 POLY 模块中去，通过下述关系关系式，在不同的 pH-Eh 条件下计算单一平衡，并最终分析每个区域中平衡相聚集态的详细情况：

$$\text{LNACR}(\text{H}+1) = -[\text{pH}] * 2.302585$$

$$\text{MUR}(\text{ZE}) = [\text{Eh}(\text{V})] * 96485.309$$

- 所有从相同的 POURBAIX- 模块产生的图表将会有相同默认副标题，这些副标题由温度，压力和体系主体成分组成，而不管这些图表是否是后来在单一或分开的计算中和处理程序中产生的（也就是，经过主选项 1 或 2 或 3 或 4）。然而，这个副标题在确定相关的选项时也能被改变。如果这样做的话，默认或先前修改的名字将会作为一个参考而出现，同时用户能在一行中输入新的自己喜欢的的副标题。用户应该尽量避免写非常长的

副标题,即使体系主体成分相当复杂;否则,在图表上可能就没有足够的空间去编写副标题。修改过的副标题将会被系统保存下来并在所有后续图表中保持不变,直到它再一次被修改或是相同的POURBAIX- 类型\*.POLY3 文件重新被打开或另外的\*.POLY3 文件被打开。

- 模型将自动地依照被选择作为轴变量的性质为X轴和Y轴预先定义轴文本。为修改某些轴文本,默认的或先前修改的名字将会作为参考而出现,并且用户可以在一行中输入自己喜欢的轴名或按回车键接受旧名字。用户应该尽量避免写非常长的轴名;否则,在图表的旁边可能会没有足够的空间去放置轴名。
- 当经过所有上面所说步骤中的修改和调整之后,通过一个附加选项(如果用户真正想进一步改善已经生成的图表外观),用户甚至能直接到内部连接的 POST 模块中在图形上进一步精饰图表。在这样一个互动的模式中,用户能操纵 POST 模块所有的命令。当用户想附载实验数据到一个图表上,或是中止和恢复某些相,或设置绘制图形的大小,设置轴刻度线的类型,设置结线的状态,轴的状态,轴的长度,图表的名称,或对另外一个以前绘制好的图表进行快速绘制,这一点就显得非常有用。即使用户喜欢用普通的 POST 模块命令去精饰图表,而不通过以上所说的 POURBAIX 模块中的询问栏,这个功能同样是很有必要的。然而,就象在上面第 2 点提到一样,在这些选择性地互动中,POURBAIX 模块中的错误信息不会像在一般的 POST 模块中一样显示在屏幕上。并且,当做完所有的精饰后,用户只能通过“B”(后退)命令才能离开当前互动 POST 模块返回到 POURBAIX 模块进行进一步的图象处理。
- 当复制一个图表时,模块将询问设置图形格式(也就是,打印单元,PostScript 或其他图表输出),设置字号和字体大小,设置图形的文件名或图形单位名。一旦复制好图表,程序将提供更多的机会去产生其他复制件(比如:同一个图能生成打印文件并以 PostScript 文件或其它图形格式存储)。除了通常的屏幕解释说明外,用户还能通过合适的图形编辑器或系统命令在另外一个窗口去打开它查看或打印或复制。
- 当在一个图表上转换 X-Y 曲线坐标时,用户仅仅只需输入文件名,这个文件名通常有一个默认的扩展名“EXP”。用户可以接受程序设定的默认文件名(通常是 POURBAIX.EXP 或一个打开的扩展名是 EXP 的 POURBAIX 类型\*.POLY3 文件名)或输入其他文件名(如果没有给出扩展名,已写文件有一个标准的 EXP 扩展名)。这种文本文件,采用 DATAPLOT 格式(见用户指南第 15 部分),包含了曲线所有的 X-Y 坐标,同样也包括一些在前面所说的 POURBAIX-/POST 模块处理程序中评估和改进的图形处理和精修信息。这类文件能够进一步被任何简单的文本编辑器进行编辑,通过随后使用 POST 模块或使用其他图形软件重新绘制图形,这类文件与一些实验或编辑信息结合能够用于进一步绘制图表。这也同样使得把两个或多个由不同计算得到的同种类型的图表融合在一起,或把实验数据加载在一个计算图表上变得可能。
- 通过选择“调整图表”选项,用户能重复地调整已经定义的图表,直到完全满意为止。模块会根据用户先前的操作步骤而提示一些必要的选项供用户去进一步修改图表。

对先前的操作步骤的调整将会被适当地保存到缓存当中，所以用户没有必要去重复这些操作。通常，用户希望能够对某一图表创建几个版本用于不同的表达目的，对此，用户能够打开这个选项而达到目的。

### 13) 提高计算精确性的早期机会

由于水溶液模块（特别是 HKF 和 PITZ 模块）的复杂性和包含水溶液的 POLY 模块及 GES 模块计算的异类平衡，同样由于水溶液浓度和活度的特殊处理要求（特别对于微量物质而言），在精确描述平衡状态时会遇到某些困难。另外，图表的质量（根据曲线的光滑，连续，完整性来评价）有时候也没有期望的那么好。由于这些原因，因此在刚进入一个 POURBAIX 模块的计算选项时（主选项 1, 3 或 4），用户可以设法通过人工的方式去改变对于 POLY（和 GES）模块计算的一些数字限制和计算精确性。用户也能在进入 POURBAIX 模块之前在 POLY 模块中，或在 POURBAIX 模块运行时在非强制性或强制性的内部连接的 POLY 模块中去设定这些数字限制。

现把可以把修补过的三种数字限制（也即是，对在多相反应体系中的平衡的一次搜索的最大迭代次数，对一个稳定的数学溶液的所要求的精确性和对组分计算的最小分数）和亚稳相驱动力的计算方法列在下面：

---

最大迭代次数 /500/: <一个单一平衡点的新的最高搜索次数>  
 要求的精确性 /1E-06/: <达到一个稳定的数学溶液的新的精确性限制>  
 最小分数 /1E-30/: <在一个相中计算组元分数的新的最低限度>  
 亚稳相的驱动力估算 /Y/: <是或不是>

---

这些限制是在 POLY (和 GES) 模块计算中收敛和计算速度的一些标准。具体的改进方法请参考第 8 章。

### 14) 水溶液模型和数据库的多元兼容性

POURBAIX 模块与各种嵌套在 Thermo-Calc 软件中的水溶液模型均兼容，比如 SIT（特殊离子相互作用理论），HKF（完整修改版的 **Helgeson-Kirkham-Flowers 模型**），和 PITZ（通用 Pitzer 公式）模块。关于这些水溶液模块的详细情况请参阅 10.7.2.5 部分和第 11 章。

此外，POURBAIX 模块也与各种不同的可以使用的水溶液模块 (PAQ, TCAQ 或 AQS) 兼容。PAQ 数据库包含了水溶液，气体混合物，化学计量相和固溶相，是专门为用户设计，针对 POURBAIX 模块中的单一数据库选项。TCAQ 和 AQS 仅仅只包括水溶液，能够在 POURBAIX 模块中用于多元数据库选项，这时其他各种必要的相（气态/ 流体混合物，钢铁，合金，金属，沉淀，盐，陶瓷，矿物，核物质等）应该从其他数据库中被加载过来（例如：SSUB, SSOL, TCFE, TCNI, SLAG, SLAT, ION, TTAI/Ti/Ni/Mg, TCPM, TCES, GCE 等）。如想了解这些水溶液数据的详细情况，请参阅 10.7.2.5 部分和热力学数据库指南手册。



**15) 在其他普通的 TCC 模块中可直接使用已经存在的 POURBAIX 模块文件用于各种目的。**

如前所说，一个 POURBAIX 模块产生的\*.POLY3 文件包含了关于体系定义，各种相的热力学数据，计算条件设置和沿着 mapping 或 stepping 步聚计算产生的多相平衡的各种信息。

POURBAIX 模块也会询问用户是否有必要存储所有 POURBAIX 模块定义的关于各种水溶液性质的符号（方程/变量/表）。这个选项将会产生一个\*.POLY3 文件，这个文件包含所有水溶液性质和在定义与水溶液和电子相关的相/组分/成分时的各种方程/变量/表的恰当的定义，这个文件比一个普通的未采用该选项的 POURBAIX.POLY3 文件大得多。

这种文件不仅能用于 POURBAIX 图和其他性质图表的各种计算，也能用于涉及水溶液的复杂多组分多相反应过程模拟。通常要求一个 Pourbaix 模块产生的\*.POLY 文件能被直接打开，并且可以轻松应用于其他普通的 TCC 模块的各种不同用途，比如：

- 在 POLY 模块中进行其他 mapping 和 stepping 计算处理
- 在 POLY 模块中执行其他图表的图形处理过程
- 在 TAB 模块中计算各种物质，相，反应的热力学性质
- 存储 GES5 或 TDB 或 DAT 文件，并在 GES 模块中调整体系和相定义以及热力学数据
- 创建 SETUP 或 PAR 或 POP 文件，和在 PARROT 模块中执行基于实验信息的数据评估

**16) 带电气体物质的默认处理**

当从单或多（附加）数据库获取数据时，通过在体系中的默认定义“/-”，模块能够处理带电气相。这个另外指定的“/-”对于气体混合物和某些液体混合物或固溶体相被认为是一个特殊元素，就像在 SSUB, SSOL 和 ION 数据库中定义的一样。然而，在 POLY, GES 和 POURBAIX 模块中，“/-”并不被认为是体系的一个组元；因此，GES 或 POLY 模块不能计算它的化学势，也不能计算它在达到平衡态的气体物质中的参与系数。

然而，用户应该注意到在水溶液相中，“ZE”也同样被定义为一个特殊组元，但对于这个特殊组元而言，它的化学势和平衡参与系数却在 GES/POLY 和 POURBAIX 模块得到了适当的计算。因此，在一个稳定的水溶液相中，电极电势和  $H^+$  势总是能被适当地计算，但这不包括气体混合相（或其他相）。这也就是为什么在 POURBAIX 模块中计算的 POURBAIX 图中的相边界不能延伸到没有水溶液的区域，此时没有稳定的水溶液存在，带电气体混合相可能与固相处于平衡态，或有其他可能带电的相存在（比如：在表面反应中的带电固相组元）

**10.7.2.4 对水溶液相不同性质的描述**

为了能计算水溶液方面多相的相互作用体系，对水溶液而言，需要许多附加衍生变量。在 8.13 部分，对各种可能的衍生变量和它们的定义给出了总结。

下面，对某些衍生变量的定义和内部关系再次进行简要描述。这些衍生变量是用于在 POURBAIX 模块中水溶液相或水溶液物种（溶剂，溶质）的用于坐标轴变量的不同性质的选择。

➤ 水溶液相中的水溶液物种或水溶液相的组分含量

- ❖  $NP(AQ)$  水溶液相的摩尔数 (摩尔)
- ❖  $NS(AQ, sp)$  水溶液物种的摩尔数 (摩尔)
- ❖  $MF(AQsp) = X(AQ, sp)$  水溶液物种的摩尔分数
- ❖  $Y(AQ, sp)$  水溶液物种的原子分数
- ❖  $ML(AQsp) = ML(AQ, sp)$  水溶液物种的质量摩尔浓度(摩尔每千克水)

$$NS(AQ, sp) = Y(AQ, sp) * NP(AQ)$$

$$Y(AQ, sp) = X(AQ, sp)$$

$$ML(AQ, sp) = Y(AQ, sp) * 55.5084 / Y(AQ, H_2O)$$

➤ 水溶液相中的水溶液物种的活度性质

➤  $AI(AQsp) = AI(sp, AQ)$  水溶液物种的活度性质

- ❖  $RC(AQsp) = RC(sp, AQ)$  水溶液物种的活度性质

- ❖  $\log_{10} Act(AQ, sp)$  水溶液物种的活度的常对数

$$AI(H_2O, AQ) = ACR(H_2O, AQ)$$

$$RC(H_2O, AQ) = ACR(H_2O, AQ) / Y(AQ, H_2O)$$

$$\log_{10} Act((H_2O, AQ)) = \log_{10}(AI(H_2O, AQ))$$

$$AI(sp, AQ) = ACR(sp, AQ) * 55.5084$$

$$RC(sp, AQ) = ACR(sp, AQ) / Y(AQ, sp) * Y(AQ, H_2O)$$

$$\log_{10} Act((sp, AQ)) = \log_{10}(AI(sp, AQ))$$

➤ 整个水溶液相的溶液性质

- ❖ pH 水溶液相的酸度
- ❖ Eh 水溶液相的理想电极电势
- ❖ Ah 氧化还原对相对于标准 H 电极的每个电子的热力学亲合势，即，理想电子的化学势
- ❖ pe 理想电子活度的对数
- ❖  $IS = I$  水溶液相的离子强度
- ❖  $TM = m^*$  水溶液相的所有溶质种类（包括自由离子和配合物）的总质量摩尔浓度（当量质量摩尔浓度）
- ❖ Aw 水溶液相中水的活度
- ❖  $OC = OS$  水溶液相的渗透系数
- ❖ AT 水溶液相的滴定碱度，通常被定义为碳酸盐和重碳酸盐（某些情况为正硫化物）在甲基橙滴定终点(即，pH=4.5) 的当量质量摩尔浓度

$$pH = -\log_{10}(AC(H^+, AQ))$$

$$Eh = u(ZE) / 96485.309$$

$$Ah = u(ZE)$$

$$pe = u(ZE) / (2.303RT)$$



$$\begin{aligned}
I &= 1/2 * \sum (ML(AQ, sp) * Z(AQ, sp) ** 2) \\
m^* &= \sum [ML(AQ, ions)] + \sum [ML(AQ, 配合物)] \\
Aw &= ACR(H_2O, AQ) \\
Os &= -55.5084 / m^* \ln Aw \\
At1 &= m(HCO_3^-) + m(CaHCO_3) + \dots + 2m(CO_3^{2-}) + 2m(CaCO_3) + \dots \\
At2 &= m(HCO_3^-) + m(CaHCO_3) + \dots + 2m(CO_3^{2-}) + 2m(CaCO_3) + \dots \\
&\quad + m(OH^-) + m(CaOH) + \dots + m(HS^-) + 2m(S^{2-}) + \dots
\end{aligned}$$

### 10.7.2.5 应用于 Pourbaix 模块计算的热力学模型和数据库

在 10.7.2.2 部分已经提到，在 Pourbaix 模块中用于计算 Pourbaix 或步进图的所有热力学数据应该来源于一个有水溶液，气体混合物和固相（化学计量和溶液）组成的单个数据库，或者来源几个分别包括不同相的独立数据库。在模块中，一些数据库已经被设置为默认数据库，比如在单个数据库中，PAQ（用于 Pourbaix 模块计算的公共水溶液数据库）就是默认数据库；在多重数据库中，TCAQ 或 AQS（分别使用 SIT 或者完整 HKF 模型的水溶液数据库）也被默认为主要数据库（对于水溶液而言）；SSUB（用于化学计量固相和气体混合物的 SGTE 物质数据库）和 SSOL（用于固溶相的 SGTE 溶液数据库）也分别被默认为第一和第二附加数据库。用户也能在不同情况下选择其他可用数据库或用户自己的特殊数据库。然而，用户也应该注意到，一个特定的水溶液方面的数据库必须有与之合适的热力学模型一起使用。

关于不同相或物质的热力学模型和数据库的详细描述，请参阅这本用户指南的相关部分。为方便用户，现对可用于水溶液的热力学模块和数据库简单的回顾如下：

#### 1) 用于水溶液的热力学模块

在以前发布的三个热力学计算版本中(即 TCC 版本 L, M 和 N)，通过使用 SIT（比离子相互作用理论）模型，水溶液已经被处理得相对简单。水本身的 EOS（状态方程）和热力学性质也能用于室温/室压到稍低于水的临界温度和压力的计算，在高浓度和水的临界区域，模块就不能很好地进行这样的计算。对一些水溶液溶质（阴阳离子和无机或有机配合物），能利用的数据也主要是针对在室温室压区域，但对许多物种而言，因为有  $C_p$  数据，应用范围可扩展到 0-350°C。这三个数据库通过与 SIT 模块配合使用，已经得到发展（更多详细情况见下）并且可以在热力学软件包中使用。

- TCAQ 84 种元素，仅仅包括水溶液相。（目前版本为 TCAQ2）  
与 SIT 模块相关联的普通 TC-AQ 水溶液数据库。
- PAQ 11 种元素，包括水，固，气相。（目前版本为 PAQ2）  
用于 TCC 和 TCW 版本中的 Pourbaix 模块计算而专门设计的公共数据库，作为演示的 TCC-Demo/TC4A 和 TCW-Demo/TC4U。

自从 TCCP 之后，完整的修正 HKF (Helgeson-Kirkham-Flowers) 模型常用于处理复杂的水溶液。同时，一个复杂的数据库：AQS（TGG 水溶液数据库，目前版本为 AQS2，更多详细情况见下）已经得到发展，与 SIT 模块相比，由于下面几个因素，AQS 模块更加复杂但同时应用也更加广泛。

- ❖ 纯水的 EOS（标准状态方程）和热力学及输送性质可以在一个包含整个亚临界，超临界和临界状态的非常广泛的温度-压强区域，即，0-1000°C 和 1-5000 bar，用 Johnson-Norton 模型精确计算。

- ❖ 完整的修正 HKF 模型及一些修改描述了水溶液中溶质物质（自由阴/阳离子，无机/有机配合物）的状态方程和标准热力学性质。各种水溶液物种总有一些  $C_p(T, p, x)$  的估计或评估数据，因此，对水溶液的计算可以和在纯水相同的温度-压强区域内进行，即，0–1000°C 和 1–5000 bar。
- ❖ 完整的修正 HKF 模型及一些修改描述了在水溶液中的混合行为的热力学性质，许多二元或三元相互作用数据也能用于一些复杂水溶液。因此，也能对浓缩水溶液进行计算，也即是，在室温室压下达达到 6 m(eq. NaCl)和高温高压下高达 10 m。

在将来发布的版本中，一般的 PITZ (Pitzer 公式) 模块同样也能用于处理高浓缩特殊水溶液（比如盐水）。由于 PITZ 公式在高温高压下处理纯水和溶液物质的标准状态方程和标准热力学性质时存在的弱点，因此，用于完整的修正 HKF 模型的一些处理也采用到 PITZ 模块中，包括 对于纯水的 Johnson-Norton 模块，溶剂和溶质的标准热力学性质，HKF 模块的 DHLT 项。通过这个联合与 AQS 数据库以及 Pitzer 模块要求的高有序相互作用参数的延伸的配合使用，该模块对溶质、溶液和整个水溶液相的状态方程和热力学性质相对以前修改的 Pitzer 模块有一个更好的描述。

## 2) 水溶液热力学数据库

就演示目的而言，PAQ (TC 公共水溶液数据库) 在 TCC 和 TCW 完整版本和它们的演示版本 (TCC-Demo/TC4A 和 TCW-Demo/TC4U) 中免费发行。PAQ 数据库是为在 POURBAIX 模块计算中的单数据库情况而专门设立的，并满足如上所述的 POURBAIX 图和各种性质图表中的各种计算需要。除了水溶液相，它们也包含一些相关的气体混合相，纯固相和固体溶液相。然而，这个小型数据库只包括少数几种元素：仅 11 种 (H-O-C-N-S-Cl-Na-Fe-Co-Ni-Cr)。因此，它们被认为是最基本的数据库和示范性数据库，并且只能用于某些有限化学或湿法冶金或合金腐蚀问题方面。对在 POURBAIX 模块中与单数据库选项一起使用的其它专门建立的数据库（包含有限的元素），用户可以与 Thermo-Calc Software 交流。

为了有更广泛的应用，两个包含非常大的化学框架的大规模水溶液数据库已经建立并逐步得到更新。第一个就是 TCAQ 水溶液数据库，另外一个就是 AQS 水溶液数据库。这两个水溶液数据库通过多数据库选项，从其他可使用的数据库（也即是，SSUB, SSOL, TCFE, TCNI, SLAG, SLAT, ION, TTNi/Ti/Al/Mg, TCMP, TCES, GCE, NUOX, 等等）附载各种不同相（气体/流体混合物，钢，合金，熔体，炉渣，盐，陶瓷，矿物，核材料，等），就能在 POURBAIX 模块中使用。此外，这两个数据库也能用于包含水溶液的多相相互作用体系的其他基本模块计算。因此，这两个数据库能广泛用于材料设计与工程，化学工程，化学，地球化学，环保等方面。

TCAQ 数据库 (目前版本为 TCAQ2) 是一个包括如下所列的 76 种元素的综合水溶液数据库（与 SSUB 和 SSOL 数据库的构架相似）

```
Ag Al Ar As Au B Ba Be Br C Ca Cd Ce Cl Co Cr Cs Cu Dy Er
Eu F Fe Ga Gd H He Hg Ho I In K Kr La Li Lu Mg Mn Mo N
Na Nd Ne Ni O Os P Pb Pd Pr Pt Ra Rb Re Ru S Sb Sc Se Si
Sm Sn Sr Tb Te Th Tl Tm U V W Xe Y Yb Zn Zr
```

TCAQ 数据库也与 SIT 模块相关联，自从 TCAQ 在 1998 年发布，在这 76 种元素框架中的不同水溶液物种（总共大约有 350 种，主要是复杂物种）已经被逐渐添加进去，并且得到更新。

AQS 数据库 (目前版本为 AQS2)包括 83 种元素和大约 1600 种无机/有机物种。

```

Ag Al Ar As Au B Ba Be Bi Br C Ca Cd Ce Cl Co
 Cr Cs Cu Dy
Er Eu F Fe Fr Ga Gd H He Hf Hg Ho I In K Kr
 La Li Lu Mg
Mn Mo N Na Nb Nd Ne Ni O P Pb Pd Pm Pr Pt Ra
 Rb Re Rh Rn
Ru S Sb Sc Se Si Sm Sn Sr Tb Tc Th Ti Tl Tm U V
W Xe Y
Yb Zn Zr

```

这个数据库与完整修订 HKF 模块相关联，在不久的将来，它将包含更多经过严格评估的数据（现存元素的更多的复杂物种以及更多的其他元素和它们的复杂物种）。

随着 Pitzer 模块广泛的使用，一个合适的水溶液数据库或某些小的用于 Pitzer 模块的水溶液数据库，在不久的将来即会得到发展。

### 10.7.3 POURBAIX 模块的应用

POURBAIX 模块具有独特的多功能性，并且有非常友好的用户界面。在不同级别的各种选项使得 POURBAIX 模块能够在一个非常宽的温度-压强-成分范围内，对各种不同成分体系非常简单地进行计算及对 POURBAIX 图表和许多性质图表的处理过程。就像在以上模块描述中提到（10.7.2 部分），一个 POURBAIX 模块产生的\*.POLY3 文件不仅能用于 POURBAIX 图表及许多性质图表的各种计算，也能用于涉及水溶液的复杂相互作用过程的任何模拟。

POURBAIX 模块及其相关模块和数据库能够广泛应用于水溶液化学，材料化学，材料腐蚀，材料工程与加工，化工，地球化学，土壤材料利用，环境工程，能量传输，核能生产，核废料掩埋回收等研究和发展中。

以下几个段落，将对现有一些应用进行评论，但主要侧重于材料腐蚀方面。

不锈钢的抗腐蚀归功于在其表面钝化膜的形成。早在 1836 年，法拉第就注意到铁在含镍的酸性溶液中的钝化，并且观察到在稀  $\text{HNO}_3$  溶液中，腐蚀速率在刚开始随着酸浓度的增加而增加，在临界浓度时，尽管热力学驱动力增大，但腐蚀速率却降低到可忽略的程度，这主要是因为亚结构金属氧化薄膜的形成。后来，进一步证实铬也能起钝化作用，但是，相对铁的电流密度（在 1 m  $\text{H}_2\text{SO}_4$  中为  $7 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ ）而言，铬的电流密度很低（在 1 m  $\text{H}_2\text{SO}_4$  中  $<1 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ ）。因此，在铁中加入大约 12% 的 Cr，会有利于钝化膜的形成。为得到由具有低强度和抗冲击性能的不锈钢合金提供的耐腐蚀能力，就必须保持钝化膜形成的稳定性，这也成为整个不锈钢工业的理论基础。

POURBAIX 模块既能被用于在一定温度和压强之下的与各种特殊水溶液的相互作用的单元系合金（比如，Fe, Cr, Ni, Al, ），也能用于相当复杂的合金当中（比如，Fe-Cr-Co-Ni-C-N-O-S-...）。

在 10.7.1 部分中的图 10-10 已经演示了纯铁 POURBAIX 图的外观和各种与 Fe 相关的第二相的稳定关系，这种稳定关系依赖于铁的最初含量，与其相互作用的水溶液相的最初含量和成分以及在多相作用体系中的温度，压强条件。图 10-11 进一步显示了两个同样依赖于原始合金成分的铁基合金的 POURBAIX 图。在图象上，POURBAIX 模块产生的其他性质绘图函数也被显示出来，比如，水溶液物种的质量摩尔浓度对于 pH 的作图和离子强度对于 pH 的作图。

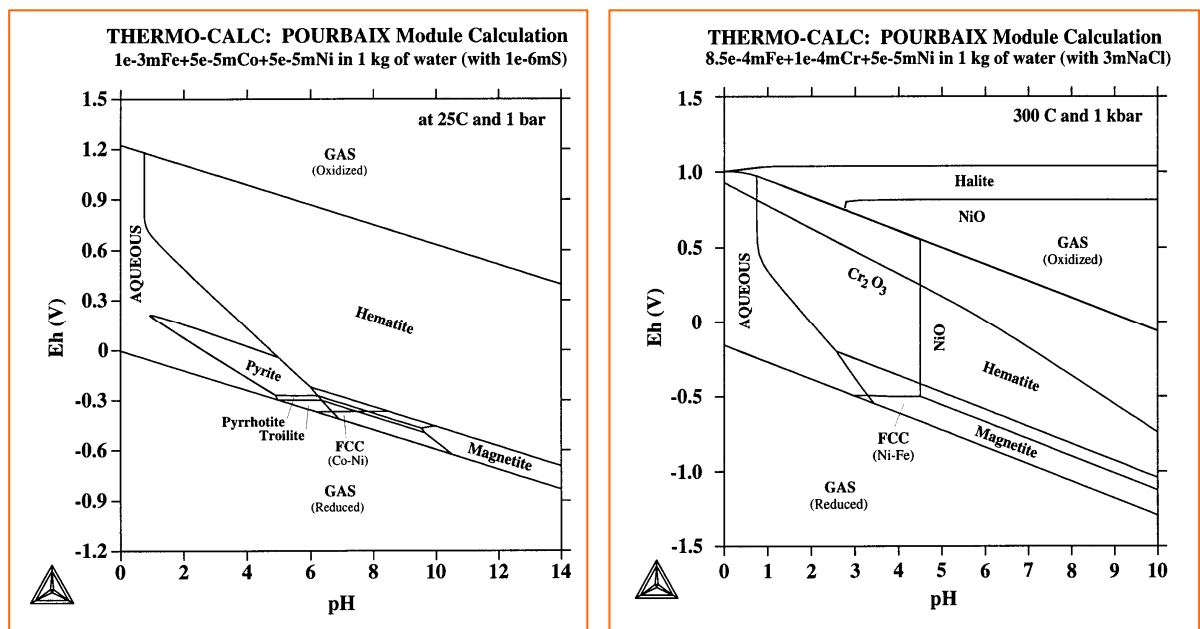
然而，对于一个复杂的多元合金体系而言，在图表上可能有高度加载的曲线，这些曲线看起来就如相似水溶液中相应的合金组元的图表中的曲线的重叠。因此，如果相互作用体系中的合金体系相对简单，这对计算曲线会更有意义，并且对绘制的 pH-电极电势图和性质图也更加容易理解。

当合金成分简单但水溶液成分相当复杂时，POURBAIX 图看起来也将会非常拥挤，因为体系中的元素很多；并且有时候对相互作用体系而言，很难去绘制整个 PH-Eh 范围内的图。因此，在每个点（有着确定的主体成分和压强，温度）进行简单的平衡计算或者采用主选项 4（随 T，合金中的 X(Fe) 或 X(Cr)，或 m(NaCl)，或 m(SO<sub>4</sub><sup>-2</sup>)，或其他条件而变化）进行步进计算，而不是绘制整个范围内 pH-Eh 图，将会更加有意义。

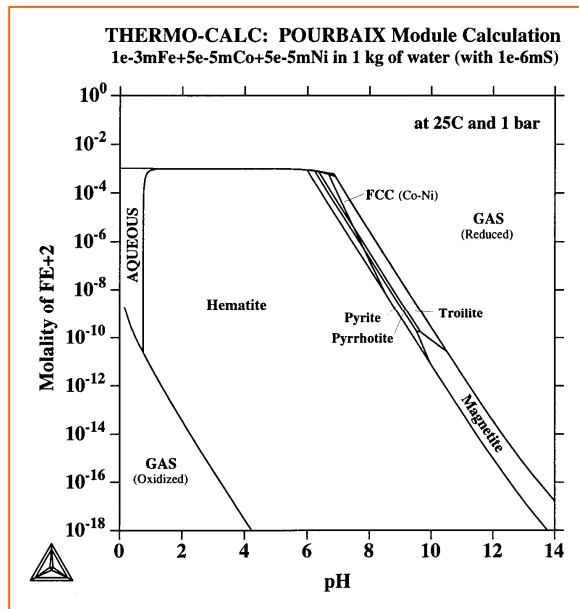
在 POLY 模块中可以对一个包含水溶液的多相反应体系的一个平衡点进行计算，并且如果读取 POURBAIX 模块的\*.POLY3 文件（保存着各种对象定义，见 10.7.2.3 部分第 15 点）就会显得更容易。用户可以改变包括温度，压强，主体成分（合金或水溶液），pH 和 Eh 在内的各种条件，就能计算多相平衡。通过 POLY 命令“LIST\_EQUILIBRIUM”可以把所得结果列出来。

通过使用普通 POLY 模块或 POURBAIX 模块中的主选项 4，就能打开一个已有的 POURBAIX 模块的\*.POLY 文件，从而进行步进计算。然后，就能在 POURBAIX 模块或 POST 模块中绘制许多不同的性质图。

图 10-12 列出了一些性质图，在这些图中，对磁铁矿+硫钴矿+(镍-钴-铁) 面心立方结构+水溶液和磁铁矿+赤铁矿+黄铁矿+硫钴矿+针镍矿+水溶液在 1000 bar 的压强下，一铁基合金（含 1E-3 摩尔 铁, 5E-5 摩尔 钴 和 5E-5 摩尔 镍）和 一水溶液(1 千克水, 含 1E-6 摩尔 S<sub>2</sub> 或对 S<sub>2</sub> 饱和)的多相反应中的稳定相集合采取步进计算（把温度作为步进变量）。因此就能绘制各种平衡量（比如，水溶液物种的质量摩尔浓度，pH, Eh, S<sub>2</sub> 的输入量）与温度之间的关系图。

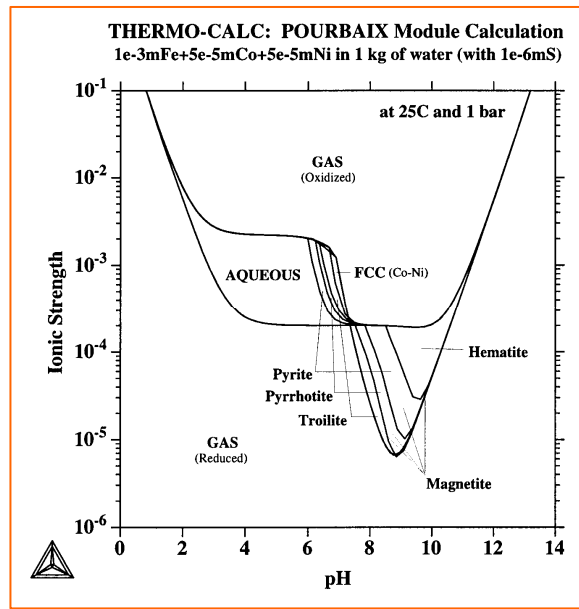


11a



11c

11b



11d

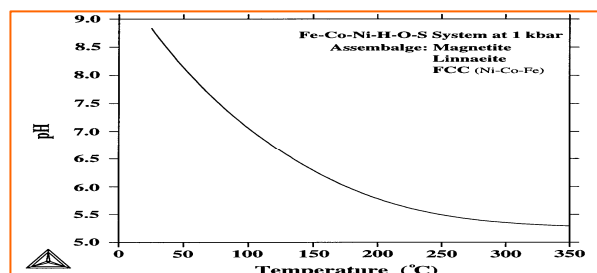
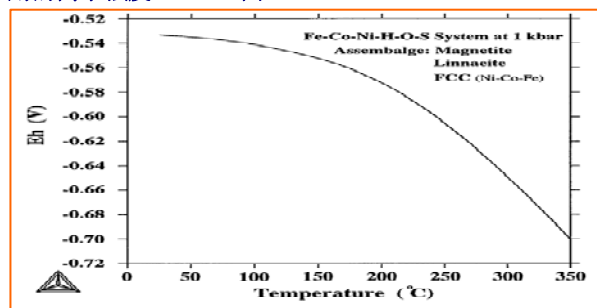
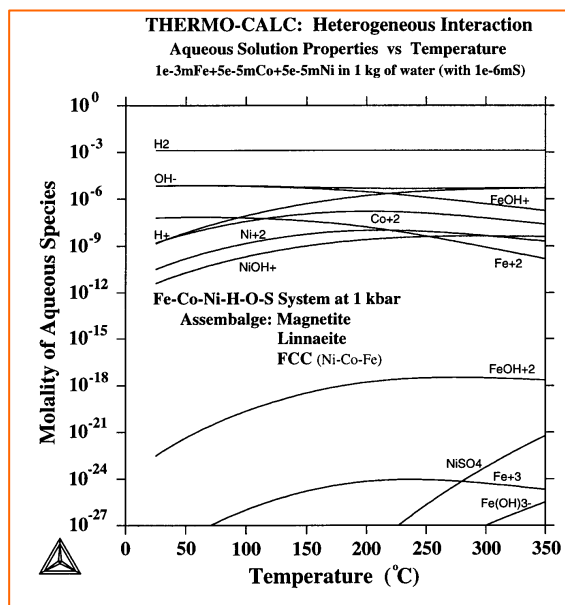
图 10-11. 在常温常压条件下两个铁基合金与水溶液(1 千克水含 3 摩尔 NaCl 或者  $1\text{E}-5$  摩尔  $\text{S}_2$ )充分相互作用的 Pourbaix 图和性质图

11a. 在  $25^\circ\text{C}$  和 1 bar 下, 铁基合金(含  $1\text{E}-3$  摩尔 Fe,  $5\text{E}-5$  摩尔 Co,  $5\text{E}-5$  摩尔 Ni),与水溶液(1 千克水含  $1\text{E}-5$  摩尔  $\text{S}_2$ )充分相互作用的 Pourbaix 图

11b. 在  $300^\circ\text{C}$  和 1000 bar 下, 铁基合金(含  $8.5\text{E}-4$  m Fe,  $1\text{E}-4$  摩尔 Cr,  $5\text{E}-5$  摩尔 Ni), 与水溶液(1 千克含  $1\text{E}-5$  摩尔  $\text{S}_2$ )充分相互作用的 Pourbaix 图

11c. 在  $25^\circ\text{C}$  和 1 bar 下, 铁基合金(含  $1\text{E}-3$  摩尔 Fe,  $5\text{E}-5$  摩尔 Co,  $5\text{E}-5$  摩尔 Ni),与水溶液(1 千克水含  $1\text{E}-5$  摩尔  $\text{S}_2$ )充分相互作用的  $\text{Fe}^{+2}$  的质量摩尔浓度—PH 图

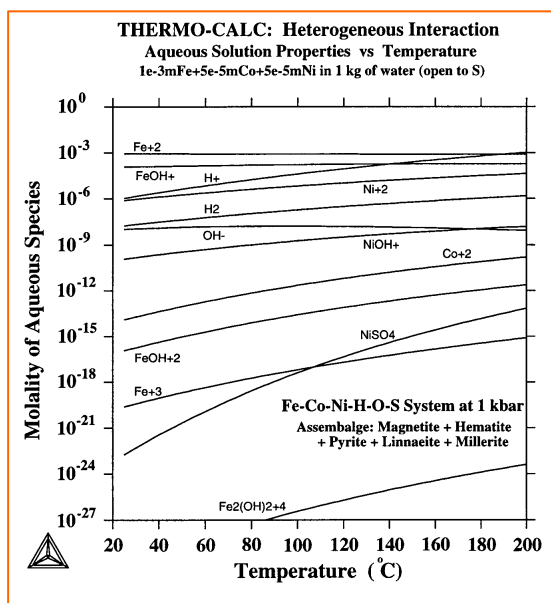
11d. 在  $25^\circ\text{C}$  和 1 bar 下, 铁基合金(含  $1\text{E}-3$  摩尔 Fe,  $5\text{E}-5$  摩尔 Co,  $5\text{E}-5$  摩尔 Ni),与水溶液(1 千克水含  $1\text{E}-5$  摩尔  $\text{S}_2$ )充分相互作用的离子强度—PH 图





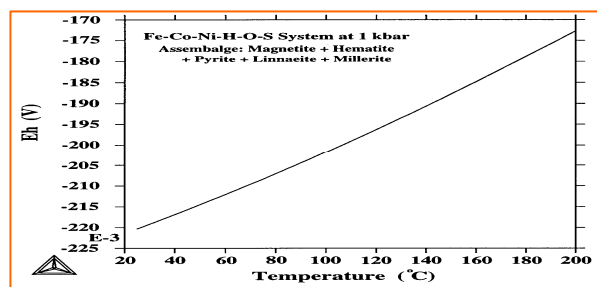
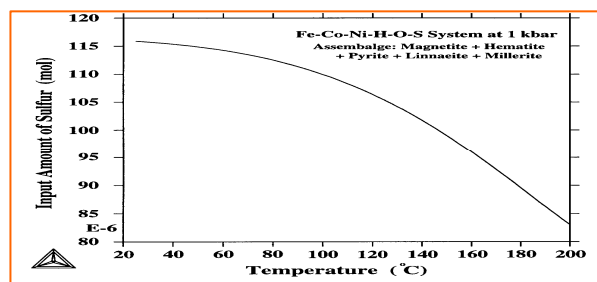
12a

12a



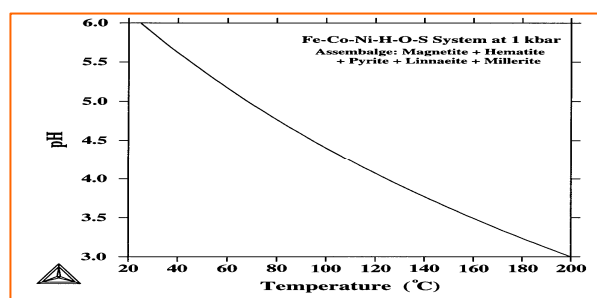
12b, 12c

12b 12c



12d

图 10-12. 磁铁矿+硫钴矿+(Ni-Co-Fe) 面心立方结构和磁铁矿+赤铁矿+黄铁矿+硫钴矿+针镍矿在 1000 bar 的压力下, 一铁基合金 (含 1E-3 摩尔 Fe, 5E-5 摩尔 Co 和 5E-5 摩尔 Ni) 和一水溶液 (1 千克水, 含 1E-6 摩尔  $S_2$  或对  $S_2$  饱和) 的多相反应中的稳定相集合 (含水溶液) 的性质图。



12e, 12f, 12g

12a,b 磁铁矿+硫钴矿+(Ni-Co-Fe) 面心立方结构+水溶液在一铁基合金 (含 1E-3 摩尔 Fe, 5E-5 摩尔 Co 和 5E-5 摩尔 Ni) 和一水溶液 (1 千克水, 含 1E-6 摩尔  $S_2$ ) 的多相反应中的稳定相集合 中的水溶液物种的质量摩尔浓度, pH 和电极电势随温度的变化。

12d,e,f,g. 磁铁矿+赤铁矿+黄铁矿+硫钴矿+针镍矿+水溶液在一铁基合金 (含 1E-3 摩尔 Fe, 5E-5 摩尔 Co 和 5E-5 摩尔 Ni) 和一水溶液 (1 千克水, 对  $S_2$  饱和) 的多相反应中的稳定相集合中的水溶液物种的质量摩尔浓度, pH, Eh 和  $S_2$  的输入量随温度的变化。

## 10.7.4 POURBAIX 模块计算示例

在/TCEx/ 部分(TCEx40.TCM) 和 *TCCR Examples Book* 中的例 40 就如何进行各种

POURBAIX 模块计算和图形处理给出了全面的演示, 这个例子由五个部分组成:

例 40a TCEx40a.TCM 主选项 1 计算(选择单一数据库) 和一个 Pourbaix 图表图形处理的一个简单应用的演示; 使用了各种在线帮助特征。

- 例 40b** TCEX40b.TCM 主选项 2 图形处理的演示 (通过绘制更多的图表和用各种选项去精修一个已经确定了图表 (包括直接与 POST 模块相互作用))。
- 例 40c** TCEX40c.TCM 主选项 3 计算 (通过调整 T-P-X 条件) 和一个 Pourbaix 图的图形处理的演示。
- 例 40d** TCEX40d.TCM 主选项 4 计算 (通过使用各种步进变量) 和图形处理的演示
- 例 40e** TCEX40e.TCM 主选项 1 计算 (选择多元数据库) 和一个 Pourbaix 图的图形处理的一个复杂应用的演示

## 10.7.5 POUBAIX 模块计算参考文献:

- Bard A.J., Parsons R., and Jordan J. (Eds.) (1985) *Standard Potentials in Aqueous Solutions*, IUPAC.
- Campbell C.E. (1997) *Systems Design of High Performance Stainless Steels*. Ph.D. Dissertation, Northwestern Univ., 243 p.
- Craig B.D. (1991) *Fundamental Aspects of Corrosion Films in Corrosion Science*, Plenum Press, NY.
- Kirchheim R., *et al.* (1989) The passivity of iron-chromium alloys. *Corr. Soc.*, **29**, 899-917.
- Pourbaix M. (1966) *Atlas of Electrochemical Equilibria in Aqueous Solution*. Pergamon, NY.
- Shi P., and Sundman B. (1997) Aqueous solution models, databases and modules implemented in Thermo-Calc. *CALPHAD XXVI Technical Program & Abstract* (Palm Coast, FL, May 11-16, 1997), 5e.
- Shi P. (1998) Heterogeneous equilibrium calculations involving aqueous solutions using Thermo-Calc. *CALPHAD XXVII Technical Program & Abstracts* (Beijing, May 17-22, 1998), 65.
- Shi P. (1999) Applications of Thermo-Calc aqueous solution databases. *CALPHAD XXVIII Programme & Abstracts* (Grenoble, May 2-7, 1999), 134.
- Shi P., and Sundman B. (2000) New aqueous solutions model and database implemented in the Thermo-Calc package. *TOFA-2000 Technical Program & Abstracts* (Stockholm, May 8-11, 2000).
- Sundman B., and Shi P. (1997) Applications of Thermo-Calc in high temperature materials chemistry. In: Spear K.E. (Ed.) *High Temperature Materials Chemistry IX* (State College, PA, May 19-23, 1997), *Electrochemical Society Proceedings Volume* 97-39: 52-59.
- Yokokawa H., *et al.* (1990) Generalized electrochemical potential diagrams for complex aqueous (M-X-H-O-e<sup>-</sup>) system. *J. Electrochem. Soc.*, **137**, 388-398.

## 10.8 SCHEIL 模块

### 10.8.1 凝固过程

在多组分的钢铁和合金在凝固过程中, 系统经常涉及到各种各样的非平衡效应, 线性或非线性的动力学过程以及随机涨落等 (扩散, 铸造充型, 共晶和包晶析出, 偏析, 溶质缓慢转变分离, 形核, 晶粒长大或溶解, 离子交换作用, 表面反应, 流体流动, 对流, 传导, 渗透, 热流动, 速率受限相变, 机械增强相变, 化学成分振荡, 自组装等)。



一个完整的凝固过程模拟应考虑到各种过程中涉及到的物质传输，能量传送和动量的传递等。然而，在一个模拟软件中同时处理这些效应是非常复杂的，因此我们总是需要使用各种假设和简化而使模拟成为可能。通常有两种不同的处理方法，一种主要是侧重于几何学方面，而另一种则主要侧重于热力学和动力学方面。两种方法都已在一些实际情况中得到了成功的应用。近年来，得益于一些功能强大的模拟软件的编程接口的应用和现代计算的使用，已经有越来越多的软件使得同时结合使用两种不同方法成为可能。

在几何学的模拟中，我们使用的是近似的热力学数据（如相变潜热，热容，溶解度等）和动力学数据（如扩散系数，反应常数，流体流量，热流量等）。这种模型一般并不能够保证其热力学数据能够精确的重复系统平衡态时的所有性质（如相图），及动力学数据能够与所有的反应量（如成分点）相符。该模型经常将热力学和动力学数据处理为可调参数，以使结果能够拟合实验值。该模拟过程一般将模型划分成至少 1000 个格点的网格，并且每个格点的物质传输，能量传送等都将在一定的初始条件和边界条件下通过有限元方法来求解。

另一个方面，在热力学模拟过程中（如 Thermo-Calc 软件），我们使用系统的精确的热力学描述，因为这对寻找系统的最终稳定态是非常重要的。一组好的热力学模型和数据可以用来直接外推非平衡状态（将局部或部分平衡处理为亚稳状态），而且能够为化学反应提供驱动力（析出或溶解）和扩散的热力学因子。这将大大的简化动力学及其它的因子。

此外，在动力学模拟中（如 DICTRA 软件），我们可以在有限和简单的几何条件（如：平面——具有一定厚度的无限宽的平面；圆柱——具有一定半径的无限长圆柱；管状——具有一定半径的无限长管子；和球形——具有一定半径的球形）下，使用精确的热力学描述和一些动力学模型及数据来描述凝固过程中的物质和热通量的变化。

现在，随着一些编程接口（如 Thermo-Calc 引擎的 TQ 和 TCAPI 接口等，有时它们也用与 DICTRA 的扩展应用）的应用，结合全面的热力学和动力学方法来处理更一般的二维或三维几何模型已经成为可能。虽然在某种程度上来说要在网格的每个格点上完全综合解决好热力学和动力学模拟计算的效率和可靠性仍然是一项困难的任务，但是有些模拟程序在这方面已经取得了进展（比如在 ACCESS e.V. 中使用的 AMSS 方法，请查阅接下来的内容可以获得更详细的介绍）。

在接下来的部分，我们将介绍几个用 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件进行凝固过程中的热力学和动力学模拟的实例，同时，我们也将采用一个例子来教读者如何使用 TQ 和 TCAPI 应用编程接口编写自己的应用程序来调用 Thermo-Calc（和 DICTRA）引擎。

### 10.8.2 Scheil-Gulliver 凝固模型 (在热力学近似的条件下)

如图 10-13 所示，通过假设液相中各组分的扩散速率无穷大，而在固相中为 0，使用 Scheil-Gulliver 模型 (Scheil, 1942; Gulliver, 1913) 定性的近似来模拟如此复杂的凝固过程。在凝固过程中，局部平衡建立在凝固界面处，而且此处的合金的成分明显的不同于体系总体的成分，并且界面处的液相和固相的成分有由该体系的相图决定。固相的成分将保持着其在形成时的状态而液相始终处于均匀状态。

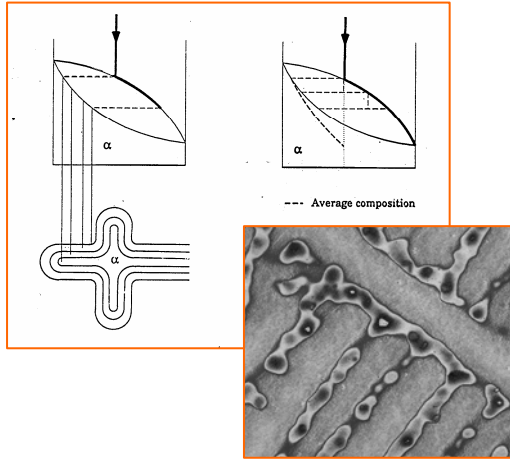


图 10-13: 用 Scheil-Gulliver 模块模拟合金的凝固过程

几年前，我们已经将 Scheil-Gulliver 模型添加在 Thermo-Calc (TCC 和 TCW) 软件中的称为 **SCHEIL 模块**中。该模型可以用于模拟任意多组元的体系。请参考接下来的 [第 10.8.4 节](#) 了解 TCC 软件中 SCHEIL 模块更详细的内容，或者参考 [TCW 用户手册和例子集](#) 了解其在 TCW 中的使用。

### 10.8.3 移动边界模型（在动力学近似的条件下）

通过应用 DICTRA 软件包中已整合了精确的原子移动性数据的移动边界模型，用户就可以考虑复杂的扩散机制，从而更为精确地预测凝固通道。

图 10-14 举例说明了使用 DICTRA 软件和 TCC 软件中的 SCHEIL 模块模拟合金的凝固通道，请参考 [DICTRA 资料包和用户手册](#) 了解更详细的信息。

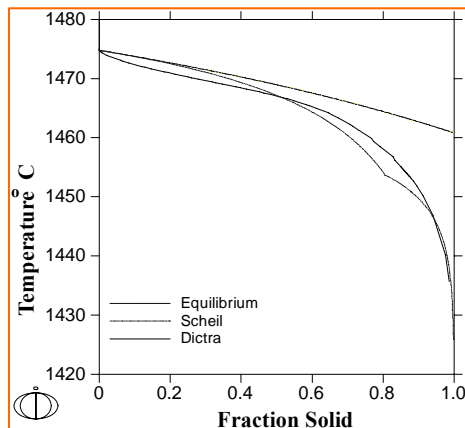


图 10-14: 用 TCC (SCHEIL 模块) 和 DICTRA 模拟 Fe-18%Cr-8%Ni 合金的凝固通道。在 DICTRA 模拟中使用的系统大小为 100  $\mu\text{m}$ ，冷却速率为 1 K/s。在 TCC 的 Scheil-Gulliver 模拟中我们假设固相没有扩散，而液相的扩散速率无穷大。

### 10.8.4 SCHEIL 模块的介绍

基于广泛使用的 Scheil-Gulliver 模型，Thermo-Calc (TCC 和 TCW) 软件中集成了一个称为 **SCHEIL 模块**的专用且易用的模块。该模型可以应用于模拟任意高组元的体系。我们随着体系

冷却的进程（如降温或放热方向）一步一步地进行模拟，而且每一步模拟后新的液相将作为下一步模拟时局部整体的成分。

图 10-15 阐述的是传统的 Scheil-Gulliver 模型模拟的一般过程，如下简述：

- 1) 模拟从系统中温度和总体成分分别为  $T_1$  和  $x_1$  的液相线开始；
- 2) 温度降低为  $T_2$ ，程序计算平衡并得到一定量的固相及一个新的液相成分  $x_2$ 。而且，在此温度下总体成分为  $x_2$  系统全部为液相；
- 3) 将总体成分设为  $x_2$ 。这意味着程序将不再考虑之前已形成的固相，且固相将一直保持着其刚形成时的成分。
- 4) 模拟过程将重复步骤 2) – 3) 直到液相能够稳定存在的最低温度（液相消失或者保持一定量的）为止。

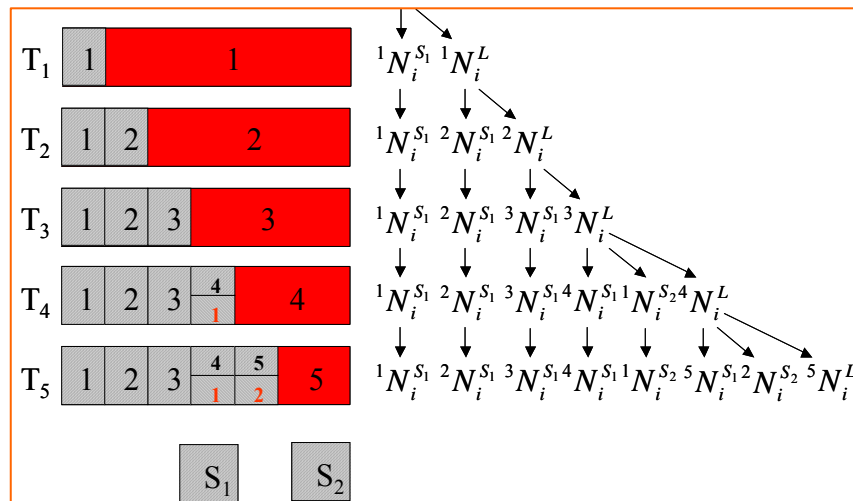


图 10-15: 传统的 Scheil-Gulliver 模型模拟合金凝固过程的算法

该模拟可以很容易地处理两个或多个固相同时析出的情况。如果是共晶析出，所有的相都将在每一步析出，并且液相的成分沿着“共晶谷”的变化。如果是包晶转变，不再稳定的相将在液相界面的局部平衡处消失。已经生成的固相的量将不会改变，因为我们不考虑先前已经生成的固相。

Thermo-Calc 允许用户采用变量和其它方程来定义方程。甚至允许一个函数调用它自己本身，而在这种情况下，当计算一个新值的时候，程序将调用其上一次计算得到的值。这个独一无二的特性在跟踪记录液相的剩余量时是非常有用的。在第一步开始前，液相的初始量为 1。在每一步及平衡计算后，液相的分数可以通过“杠杆定律”计算出来，而且还可以通过状态变量  $NP_k(LIQUID)$  来获得。假设在这一步之前液相的总量为  $NL$ ，那么这一步完成后其总量变为  $NL =$

$NL * NP_k(LIQUID)$ 。如果用户用  $f_k^L$  来表示在第  $k$  步时的  $NP_k(LIQUID)$ ，那么第  $n$  步的液相的剩余量是下面式子的结果：

$$f_n^L = \prod_{k=1}^n f_k^L$$

每一步之后，体系中的总体成分  $x(A)$  的条件也将随之变化。这可以简单的通过将它设为在新液相的成分  $x(\text{LIQUID}, A)$ 。但是，由于在 Thermo-Calc 中  $x(A) = x(\text{LIQUID}, A)$  是不符合语法规则的缘故，因此，我们必须采用一个象  $XA$  那样的中间变量来进行，具体的方法如下所示：

```
ENTER_SYMBOL VARIABLE XA=X(LIQUID,A)
SET_CONDITION X(A)=XA
```

通过使用 Thermo-Calc 中的这些功能，我们可以使用 STEP EVALUATE 命令来进行 Scheil-Gulliver 凝固模拟。有趣的是，用户不但可以使用温度，同样还可以使用焓值，即：放热量，作为凝固时的步进变量。如果凝固过程中潜热量的变化很明显，而且焓值取决于冷却的速率的话，那么而使用焓值的变量作为步进变量会得到更具实际意义的结果。

有时候，采用 Scheil-Gulliver 模型在 TCC 或 TCW 软件中用这种方法来模拟钢铁或合金的多组元非平衡凝固过程是可以的（Sundman *et al.*, 1993），而且我们会发现模拟预测的结果与实验结果吻合得很好（Saunders, 1996; Jansson and Sundman, 1997）。

但是，由于在模拟中涉及到一些高级命令和专业技术，初学者和临时的用户会发现很难跟上步骤并获得正确的结果。因此，用户可以利用 TQ 编程接口写一个简单的应用程序来处理这类模拟。在 ***TQ 热力学计算接口：程序员手册和实例*** 中有一些利用 TQ 编程接口调用 Thermo-Calc 内核引擎来进行 Scheil-Gulliver 凝固模拟的实例。

此外，已添加到 TCC 和 TCW 软件中的，称为 SCHEIL 或 SCHEIL\_SIMULATION 模块的易于使用的专业模块可以直接用于凝固模拟。开发此模块的目的就是为了简化进行 Scheil-Gulliver 凝固模拟和绘制凝固过程中的各种图形的用户界面。该模块界面友好，且仅仅要求用户回答一些简单的问题，比如数据库名，主要元素，合金元素以及其相应的量等等。该模块会自动找到准确的液相点，开始模拟凝固过程（将温度作为步进的变量），并最终绘出“温度-固相百分数”的图形。然后，用户可以根据自己的兴趣不断地选择不同的变量（如：剩余液相-温度，各固相分数或总固相分数-温度，各固相的显微偏析和潜热随温度变化的情况等）来绘图。使用 SCHEIL 模块，用户可以进行一个新的模拟；或打开一个旧的文件而重新画图；或者打开一个旧的文件而模拟同一个体系但不同的体积成分的凝固过程或在 POLY3 模块中一个平衡步进后模拟一个非平衡凝固。

图 10-16 表示的是用 TCC 软件中称为传统 SCHEIL 模块（不考虑反向扩散）模拟 Al 基合金（4 wt.% Mg 和 2 wt.% Si）在冷却温度步长为  $1^{\circ}\text{C}$  的条件下的凝固过程结果（用各种性质图表示）。

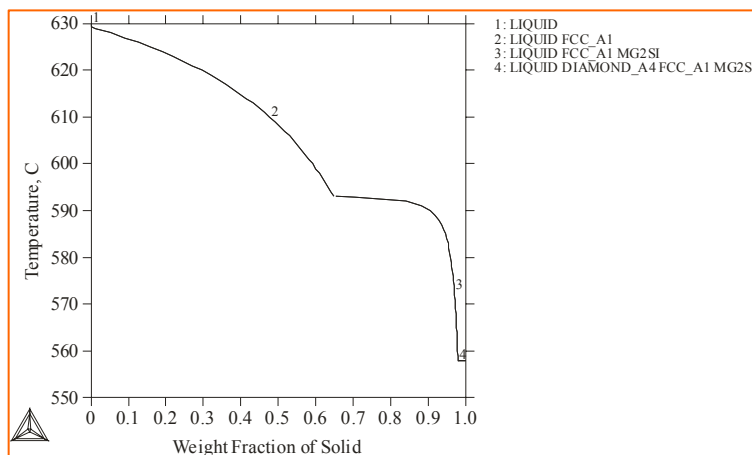
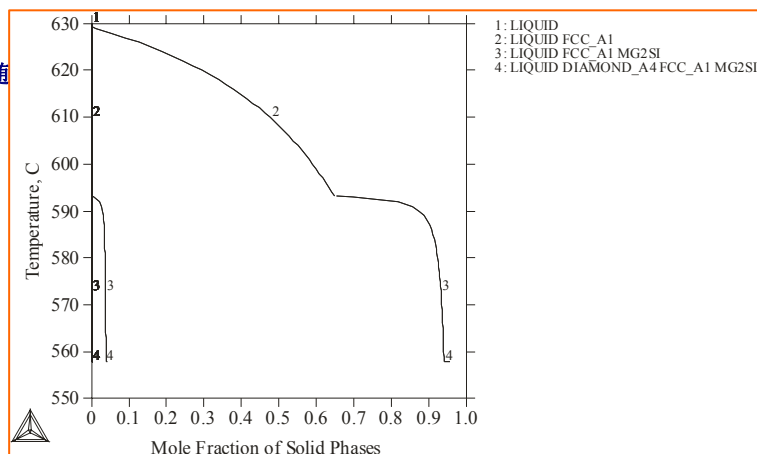


图 10-16: 用 SCHEIL 模块模拟 Al-4Mg-2Si 合金凝固过程的结果

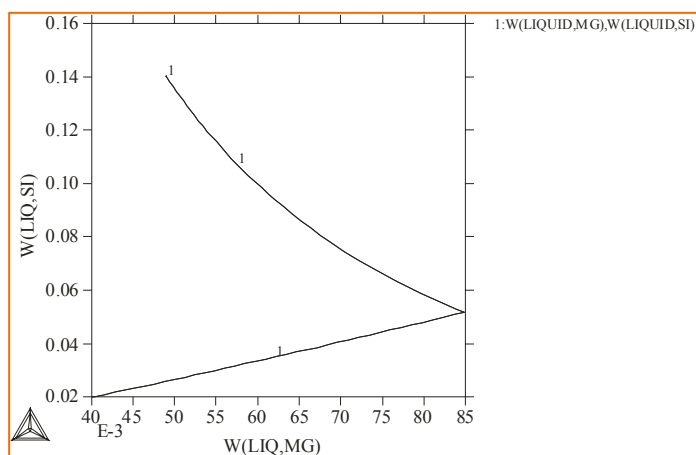
随



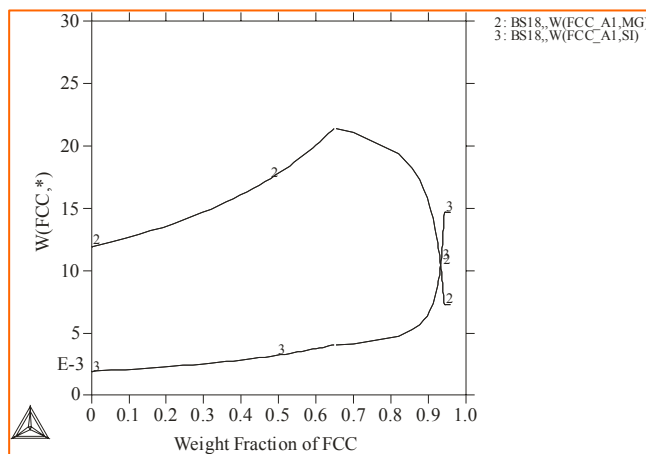
16a. 所有固相的摩尔分  
数随温度的变化图

16b 各个固相的摩尔分数

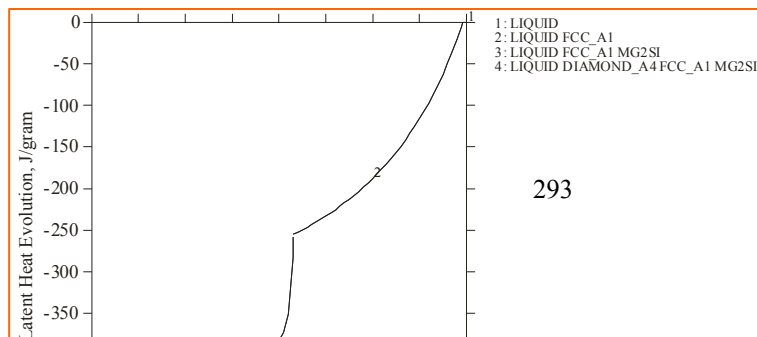
随温度的变化图



16c.  $W(\text{Liq}, \text{Si})$  与  $W(\text{liq}, \text{Mg})$  的关  
系曲线 (即: 剩余液相中  
Si 和 Mg 含量的成分关系  
图)



16d.  $W(\text{Fcc}, *)$  与  $bs(\text{fcc})$  的关系曲线  
(FCC 相中各元素的质量百分数  
随 FCC 相质量百分数变化的关系图。

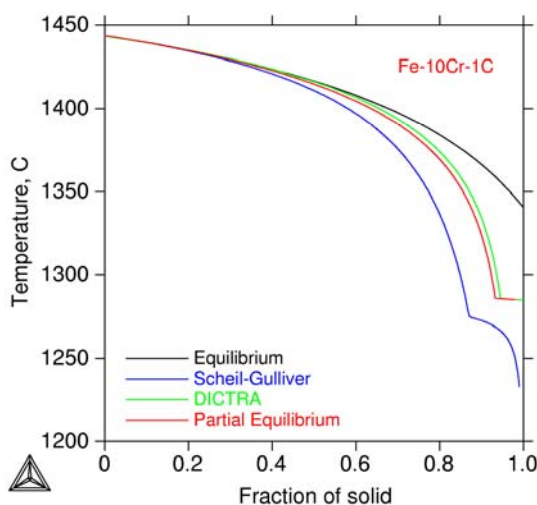


### 16e. 释放潜热随温度的变化关系图

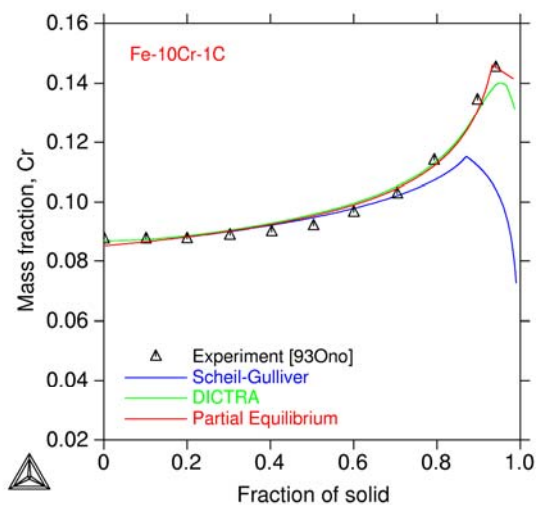
从 TCCQ 和 TCW3 开始, SCHEIL 模块中增加了一个新的选项以便用户定义一个或者多个快速扩散组元(一般为间隙原子,如 C, N, O, S 等),因此程序会在 Scheil-Gulliver 模拟中自动考虑它们在固相中的反向扩散(在钢/铁合金, Ni 基超合金等中很重要,有时候可能不怎么重要,如在 Al-/Mg- 合金中)。对于含有纯铁的钢来说,增加了一个选项(BCC $\rightarrow$ FCC)来考虑其发生奥氏体转变的可能。因此,使用改进的 SCHEIL 模块,我们可以用原始的 Scheil-Gulliver 模型来模拟各种合金的凝固或者使用改进的模型从而允许杂质原子在固相中发生反向扩散。

现在使用 TCCQ 和 TCW3 软件中改进的 Scheil-Gulliver 模型可以给出更好的预测(Chen & Sundman, Materials Transaction, JIM, vol. 43, pp. 551-559, 2002), 因为此模型假设间隙原子在固相和液相中具有足够快的扩散速率, 并且在整个模拟的体系中间隙原子的化学势始终是一致的。如图 10-17 所示的例子。欲了解更详细的信息请参考 **TCCR 例48**。

A. 凝固区间



B. Cr 的显微偏析





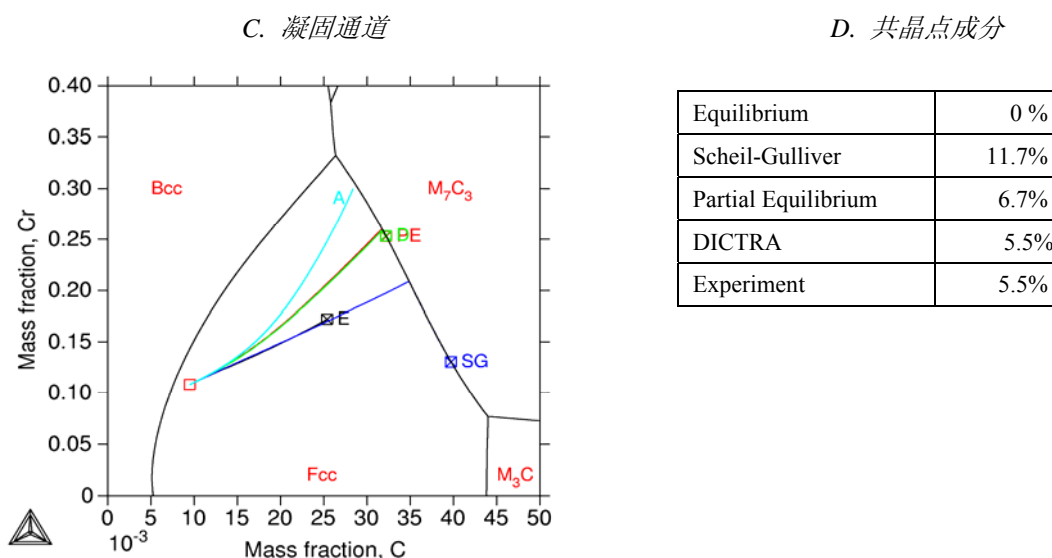


图 10-17. 使用各种方法计算 Fe-10Cr-C 合金凝固通道的计算结果比较: 红线代表改进的 Scheil-Gulliver 模拟并允许 C 原子的反向扩散 (部分平衡); 蓝线代表普通的 Scheil-Gulliver 模拟; 绿线代表 DICTRA 模拟 (移动相界模型); 黑线代表平衡计算; 三角形符号表示显微偏析测定的实验数据。

改进的 SCHEIL 模块将通过一系列连续的提示性问题引导用户进行凝固模拟和绘制结果。首先, 要求用户选择数据库并定义物质, 即: 选择主要元素, 输入合金元素及其组分。然后, 由用户提供一高于液相线的初始温度并选择合金体系中想要的相。在实际的液相线计算出来后, 程序将要求用户输入凝固模拟条件 (如降温的步长, 终止判据, 扩散速率最快的组分等)。

程序将根据给定的合金和模拟条件自动地运行并绘制出一典型的温度-固相分数凝固图形。用户还可以选择不同的条件来绘制自己感兴趣的不同的性质图。用户可以选择该模块中的一些选项, 或选择是否打开之前保存的 SCHEIL 类型的 POLY 文件进行另一次 SCHEIL 模块的模拟 (但是具有不同的成分设置), 或者使用这类文件来绘制更多的性质图。

固体中的间隙元素通常比替换元素扩散要快得多, 而且, 由于这个原因缘故, Scheil-Gulliver 凝固模拟对钢铁和其它含有间隙原子的体系的用处不大。

当打开 BCC→FCC 这个特殊选项后, 原来为惰性的初始的铁素体可以在凝固过程中转变为奥氏体。这样的转变将改变间隙原子的化学势, 从而影响它们在固相中的反向扩散。希望这样能够或多或少的估计包晶反应的影响。需要指出的是, 这种考虑了凝固过程中初始的铁素体的平衡计算的模型比 Scheil-Gulliver 模型以及考虑了间隙原子反向扩散效应的改进 Scheil-Gulliver 模型给出更好的结果。

任何含有液相混合相 (除了含有离子的液相), 固溶相和固态化学计量相的数据库都能在该模块中使用, 如 SSOL, TCFE, TCNI, TCMP, TTNi/Ti/Al/Mg/Zr, NSLD, USLD, SMEC, SNOB 等数据库。如果有必要合并从两个或两个以上相容的数据库中获得的热力学数据库 (如 TCFE3+SSOL2), 用户可以先进行标准的 TCC 模块计算 (如 TDB/GES5→POLY3), 保存在一个 PLOY3 文件中 (包括已定义的平衡条件及已计算的初始平衡点), 之后在 SCHEIL (即: SCHEIL 模块中选择主选项 3, 详细内容见下文) 模块中打开刚保存的 PLOY3 文件来进行模拟。



如下所述，TCC 软件中的 SCHEIL 模块的步骤非常简单，只需几个步骤来完成一个二元系的相图计算和图形处理，或者吉布斯自由能曲线，或相分数图的绘制：

### 第一步：选择 SCHEIL 模块的主选项

打开 SCHEIL 模块（输入 GO SCHEIL 命令）时，模块首先显示下面的信息：

```

 SCHEIL_GULLIVER SIMULATION MODULE VERSION 3.0
.....
.
. 1. Start new simulation .
. 2. Open old file and plot diagram .
. 3. Open old file and make another simulation .
.
.....

```

然后，程序要求用户回答下面的问题：

```
Select option /1/: <a Main Option>
```

其中，用户可输入所需的 SCHEIL 主选项以继续当前的 SCHEIL 模块模拟及/或图形处理：

- 1 开始新的 SCHEIL 模块模拟；
- 2 打开一个已有的 POLY3 文件（由 SCHEIL 模块保存）并绘制其它的图形；  
而且
- 3 打开一个已有的 POLY3 文件（由 SCHEIL 模块或另外一个模块保存）并进行另外一个 SCHEIL 模块模拟。

注意：这三个选项在下文分别称为主选项 1，2 和 3。选择主选项 1，程序将首先从单一的数据库中读取所有必须相的热力学数据，定义体成分和确定进行 SCHEIL 模块模拟的方法，然后开始模拟，最后在屏幕上绘出默认的冷却过程中温度（℃）与凝固固相的摩尔分数的图形。

选择主选项 3，程序将首先打开一个 POLY3 文件（该文件要么是由 SCHEIL 模块之前已保存的，要么是通过标准 TCC 模块保存（即：TDB/GES→POLY）的文件；后者允许使用来自两个或两个以上兼容的数据库中的热力学数据（如 TCFE3+SSOL2 等）的 GES5/POLY3 的工作区，修改之前定义的合金体成分和进行模拟的方式，之后进行模拟并在屏幕上绘出默认的图形。

主选项 1 和 3 都可以提供机会采用 SCHEIL 模块模拟来绘制其它类型的图形（与主选项 2 相似），同时也可以修正所绘制的图形及打印/保存所绘制的图。

### 第二步：选择数据库或打开已有的 POLY3 文件

主选项 1 要求用户回答下面的问题：

Database /TCFE3/: <a database name>

用来选择一个已有的且适合于所考虑的合金体系的 SCHEIL 模块模拟 Thermo-Calc 数据库（如 SSOL, TCFE, TCNI, TCMP, TTNi/Ti/Al/Mg/Zr, NSLD, USLD, SMEC, SNOB 等），这些数据库可以是安装 TCC 时自带的数据库或是用户自定义的数据库。

主选项 2 和 3 均要求用户指定一个 POLY3 文件的名称，这个文件或由先前的 SCHEIL 模块保存的或由普通的 TCC 模块保存（即：TDB/GES→POLY）。后者允许使用来自两个或两个以上兼容的数据库中的热力学数据（如 TCFE3+SSOL2 等）的 GES5/POLY3 的工作区。

在 Linux 和 UNIX 系统环境下，系统提示以下的问题：

File name /scheil/: <a POLY3 file name>

其中，用户须指定一个位于当前工作目录下的 POLY3 文件。

在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 系统环境下，将会弹出一个如图 10-18 所示的**打开文件**的对话框，以便用户可以指定路径（在**查找范围内**的窗口内）和文件名（在**文件名**的窗口内）。注意：文件格式必须是 POLY3 格式，且其它的格式都是不合法的。点击**打开**按钮，程序就可从先前指定、保存的 POLY3 文件转到打开的 POLY3/GES 工作空间。用户也可以取消点击**打开**按钮以便不打开之前保存的 POLY3/GES 工作空间。请注意：如果我们在之前的那步（第一步）输入主选项后 2 或 3 后立即指定已存在的 POLY3 的名称（如果不在当前工作目录下，选择正确的路径）的话（如 3 MyScheil.POLY3），就可以避免这样的**打开**按钮的弹出了。

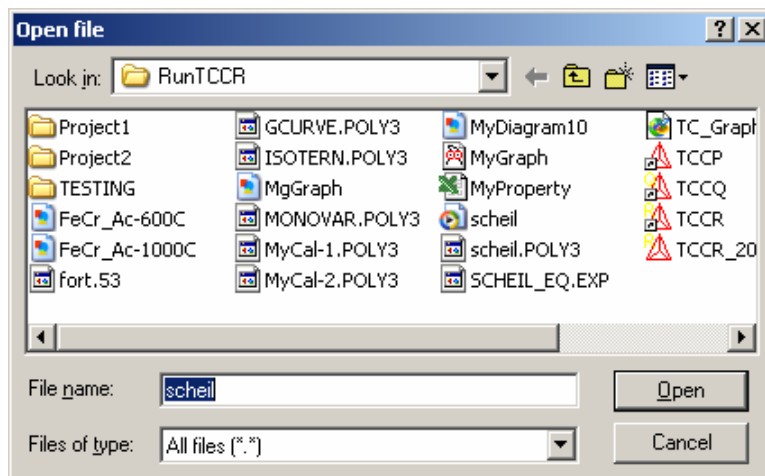


图 10-18 打开文件对话框：从一个\*.POLY3 文件中读取 POLY3/GES5 工作空间

### 第三步：定义合金及其体成分

主选项 1 要求用户回答下面的问题：

Major element of alloy: <major element name>

指定将要模拟体系中的主要组元（如：在钢铁或铁合金中为 Fe，Al 基合金中为 Al，Ni 基超合金中为 Ni）。

Composition input in mass (weight) percent? /Y/: <Y or N>

决定以何种形式输入（合金元素的）体成分：输入 Y（Yes）为质量百分数，输入 N（No）为摩尔百分数。

1st alloying element: <element name>

给定第一个合金元素的名称（如：“Cr”）。该名称后的同一行还可跟上其相应的成分（如：“Cr 5”）。

Mass (weight) percent /1/: <weight-percentage of alloying element>  
or  
Mole percent /1/: <mole-percentage of alloying element>

指定上面给出的合金元素的成分（要么以质量百分数要么以摩尔百分数的形式，这取决于前面对成分单位的回答）。

2nd alloying element: <element name or RETURN>  
Next alloying element: <element name or RETURN>

给出第 2、3、4...合金元素的名称，其后可以跟上相应的成分。直接输入~~回车~~，该模块将立即结束合金体系得成分定义。实际上，所有的合金元素（从第一个到最后一个）及其相应的成分（单位相同，如上所述）都可以定义在同一行。如：“Cr 5 Ni 1 Mo 0.5 C 0.01 N 0.02”。

Temperature (C) /2000/: <a temperature point in the liquid field>

指定一个足够高的温度保证该初始点落在所定义的合金体系的液相单相区以便开始此次凝固模拟。

主选项 3 要求用户通过回答下面的问题来进一步修改所有合金元素的合金体成分及 SCHEIL 模块模拟的初始温度条件：

Mass (weight) percent of EL1 /3/: <new composition of element EL1>  
Mass (weight) percent of EL2 /1/: <new composition of element EL2>  
.....

Mole percent of EL1 /3/: <new composition of element EL1>  
Mole percent of EL2 /1/: <new composition of element EL2>  
.....

给定先前已经定义了合金元素指定新的成分（要么以质量百分数要么以摩尔百分数的形式，这取决于所保存的之前打开的 POLY3 文件中输入的成分单位。如果该 POLY3 文件中涵括了来自两个或多个数据库的数据，那么主要组元不能定义为一个条件，而是与系统尺寸条件的定义）。

```
Temperature (C) /1850/: <a new temperature point in the liquid field>
```

指定一个足够高的温度保证该初始点落在所定义的合金体系的液相单相区以便开始此次凝固模拟。

#### 第四步：决定怎样包含所必需的相（及可能没有定义的溶解度隙）

主选项 1 要求用户通过回答下面的问题来决定如何涵括一已定义合金体系的凝固模拟中的各种必需的相的细节：

```
Reject phase(s) /NONE/: <phase name(s) or RETURN>
```

从模拟中将一些在当前所定义的合金体系中不需要的相丢弃。

```
Restore phase(s) /NONE/: <phase name(s) or RETURN>
```

将一些在当前已定义合金体系中已经丢弃的相（包括通过上面的设置丢弃的，或者是在数据库中默认就丢弃的相）重新加入模拟中。

```
OK? /Y/: <Y or N>
```

回答 N (No)，该模块将允许用户重新考虑所包含的相。

回答 Y (Yes)，该模块将从所用的数据库中获取当前定义的合金体系的热力学数据（之后，程序将列出储存在所用的数据库中所有关于当前体系的参考文献）。

```
Should any phase have a miscibility gap check? /N/: <N or Y>
```

回答 N (No)，该模块将进入下一步（第五步）；

回答 Y (Yes)，该模块将允许用户考虑一个或多个可能具有溶解度隙（如果在所用的数据库的默认定义中没有考虑这种可能性）的溶体相。然后，如下面的提示所示，程序将会进一步要求用户指定溶体相的名称及其在各亚点阵的主要组元：

```
Phase with miscibility gap: <phase name>
```

```
Major constituent(s) for sublattice 1: /CR FE/: <major constituent(s)>
```

```
Major constituent(s) for sublattice 2: /VA/: <major
constituent(s)>
```

```
Phase with miscibility gap: <phase name or RETURN>
```

#### 第五步：决定 SCHEIL 模拟的设置

在进入这步之前，模块会先计算出已定义合金体系的实际液相线温度，并在屏幕上显示一条与下面相似的信息：

```
Calculated liquidus temperature is 1530.00(C)
Please enter simulation conditions !
```

主选项 1 和 3 均会要求用户通过回答下面的问题来确定如何对已定义的体系进行凝固模拟：

```
Temperature step (C) /1/:
```

按照降低温度的步长来指定 *相对冷却速率*。通常来说，1°C 的默认值对于大多数模拟来说是比较现实的，但是，用户也可以根据自己有关凝固过程动力学及实际试验中的设定等相关知识来使用他/她认为的一个更好的值。

```
Default stop point? /Y/:
```

回答 Y (Yes)，模块将使用默认设置来终止使用 SCHEIL 模块模拟凝固过程（当所剩余液相的摩尔分数约为 0.01 时），并启动真实的 Scheil-Gulliver 模型模拟已定义的合金体系。

回答 N (No)，程序将允许用户自己改变终止 SCHEIL 模块模拟的方式。为此，程序会进一步询问用户下面的问题：

```
Fraction of liquid or Temperature? /F/: <F or T>
```

回答 F（液相的分数），用户应在下面的问题中确定在 Scheil-Gulliver 模型（传统的或改进的）模拟终止时在所考虑体系中剩余液相的近似的摩尔分数：

```
Fraction of liquid /.01/: <a preferred liquid fraction to end>
```

给定用户终止 Scheil-Gulliver 模型模拟时想要的剩余液相近似的摩尔分数（如：0.5）。

回答 T（温度），用户应在下面的问题中确定在 Scheil-Gulliver 模型（传统的或改进的）模拟终止时近似的终止温度：

```
End temperature (C): <a preferred temperature to end>
```

给定用户终止 Scheil-Gulliver 模型模拟时想要的近似温度（如：0.5）。

## 第六步：确定 SCHEIL 模拟的方法

自 TCC 的 Q 版以来，为了考虑在凝固过程中的一些快速扩散组元的反向扩散及可能的 BCC→FCC 转变现象，我们对 SCHEIL 模块进行了很大的修正和改进。这一点在各种钢铁/铁合金，Ni 基超合金及其它类型合金（对 Al-/Mg- 基合金可能就没那么重要了）的凝固过程显得尤其重要。在具体处理这种模拟方法时，用户须回答问题为：

Fast diffusing components: /NONE/:

自 TCCQ 以来，改进版的 SCHEIL 模块允许用户指定快速扩散组元的名称（通常但不总是间隙元素，如 C 和 N 等）。对于这些特殊的组元，程序将会考虑其反向扩散现象（即：这些间隙元素在已经凝固的固相中通过扩散进行重新分布）。注意：如果在体系中不止一个快速扩散组元，那么它们的名称应在同一行给出（如 C、N 等）。

如果用户简单地“回车”选择默认的 NONE[意味着在该提示下用户认为没有反向扩散元素的存在]，程序将在当前模拟中应用传统的 SCHEIL 模块，而且接下来有关是否可能存在 BCC→FCC 相转变的选项也将被跳过。

Allow BCC -> FCC ? : /N/:

自 TCCQ 以来，改进版的 SCHEIL 模块允许用户考虑在已凝固的固相中否可能存在 BCC→FCC 相转变（这对各种钢铁或铁合金的凝固过程非常重要）。

## 第七步：进行 Scheil-Gulliver 模型模拟并绘制默认的图形

在主选项 2 和 3 中，在进入这一步之前，模块会要求用户指定将一个当前 SCHEIL 模块模拟结果保存的一个 POLY3 文件的名称。

在 PC-LINUX 和 UNIX 环境下，程序会提示以下的问题：

Buffer-saving file name /scheil/: <a preferred POLY3 file name>

其中，用户应当在当前目录下指定一个想要的 POLY3 文件来保存模拟结果。

在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 系统环境下，将会弹出一个如图 10-19 所示的**另存为**的对话框，以便用户可以指定路径（在**查找范围内**的窗口内）和文件名（在**文件名**的窗口内）。注意：文件格式必须是 POLY3 格式，且其它的格式都是不合法的。点击**保存**按钮，程序就可将 POLY3/GES 工作空间保存到指定的 POLY3 文件中。用户也可以取消这种**另存为**的对话框，这样的话程序就不会保存的 POLY3/GES 工作空间。然而，如果在目录下已经有一个同名的文件存在时（在**保存于**对话框有提示），将有一个如图 10-20 的警告窗口弹出。如果点击 No 按钮，程序将返回到**另存为**窗口，以便用户选择另外的**保存于**路径或一个不同的文件名；如果选择 Yes 按钮，程序将询问用户这样的问题：“覆盖当前文件内容 /N/：”或者“继续保存？/N/：”，以便用户可以决定是否要将当前的 POLY3/GES5 工作空间覆盖在已有的

POLY3 文件上。提醒：仅当在运行一个批处理命令文件(MACRO 文件)，并且一个 POLY3 文件已经紧跟着上一步给定时，才能够避免弹出另存为的窗口。请注意：仅当运行一个宏文件，且在该宏文件中用户已经在上一步之后专门给出了一个 POLY3 的文件名时才可避免这样的一个另存为对话框的弹出了。

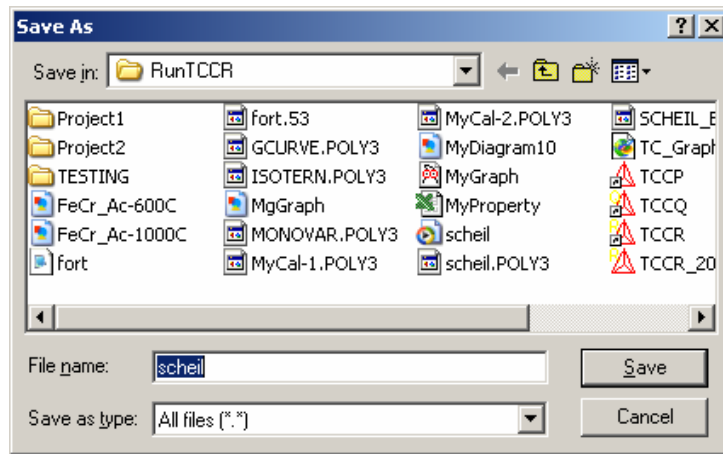


图 10-19. “另存为”窗口：将 SCHEIL 模拟的结果保存在一个 POLY3 文件中

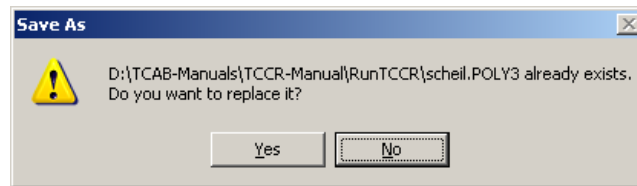


图 10-20. 警告信息：是否要将 POLY3 工作空间保存在一个已经存在的 POLY3 文件中？

之后，程序会先用全平衡方法进行一个简单的步进计算（注意：自 TCCR 开始就已经增加了这种自动计算部分），然后再对已定义的体系凝固过程进行 Scheil-Gulliver（传统的或改进的）模拟的高级步进计算。无论是简单的全平衡计算还是高级的 Scheil-Gulliver（传统的或改进的）模拟，其步进过程都将如下所示那样逐步地显示在屏幕上：

---

```

..... 全平衡计算部分:
Phase Region from 1797.15 for:
 LIQUID
Calculated 4 equilibria

Phase Region from 1796.55 for:
 LIQUID
 BCC_A2#1
Calculated 12 equilibria

```



## Thermo-Calc 用户指导书

Phase Region from 1787.70 for:  
BCC\_A2#1

\*\*\* Buffer saved on file: D:\TCAB-Manuals\TCCR-Manual\RunTCCR\Steel1-SCH.POLY3

..... 传统的SCHEIL 模拟部分:

Phase Region from 1797.15 for:  
LIQUID  
Calculated 4 equilibria

Phase Region from 1796.55 for:  
LIQUID  
BCC\_A2#1  
Calculated 39 equilibria

Phase Region from 1760.39 for:  
LIQUID  
BCC\_A2#1  
FCC\_A1#1  
Calculated 3 equilibria

Phase Region from 1760.39 for:  
LIQUID  
FCC\_A1#1

\*\*\* Buffer saved on file: D:\TCAB-Manuals\TCCR-Manual\RunTCCR\Steel1-SCHT.POLY3

Calculated 21 equilibria

\*\*\* Buffer saved on file: D:\TCAB-Manuals\TCCR-Manual\RunTCCR\Steel1-SCHT.POLY3

..... 改进的SCHEIL 模拟部分:

Solidification starts at 1797.15 K

Phase Region from 1798.15 for:  
LIQUID

Phase Region from 1796.53 for:  
LIQUID  
BCC\_A2#1

|           |        |        |           |
|-----------|--------|--------|-----------|
| 1796.5250 | 0.9905 | 0.0095 | 0.0000    |
| 1796.4625 | 0.9690 | 0.0310 | -267.6193 |
| 1796.4000 | 0.9481 | 0.0519 | -526.5327 |

.....

.....

```

.

1779.8375 0.0100 0.9900 -12059.9772
1779.7750 0.0098 0.9902 -12062.0671

*** Buffer saved on file D:\TCAB-Manuals\TCCR-Manual\RunTCCR\Steel1-SCHM.POLY3

```

当在主选项 1 和/或 3 整个模拟过程刚完成时或是在主选项 2 中已切换到一个之前产生的 SCHEIL 模块的 POLY3 文件后，在屏幕上弹出的 *Thermo-Calc* 图形窗口中最先绘制的是默认图形（即：温度与固相摩尔分数的曲线）。如图 10-21a 所示的是传统的 SCHEIL 模块模拟的结果（黑线为全平衡的凝固路径；彩色曲线为部分平衡凝固路径）；而在图 10-21b 所示的是改进的 SCHEIL 模块模拟结果（黑线为全平衡的凝固路径；彩色曲线为部分平衡凝固路径）。

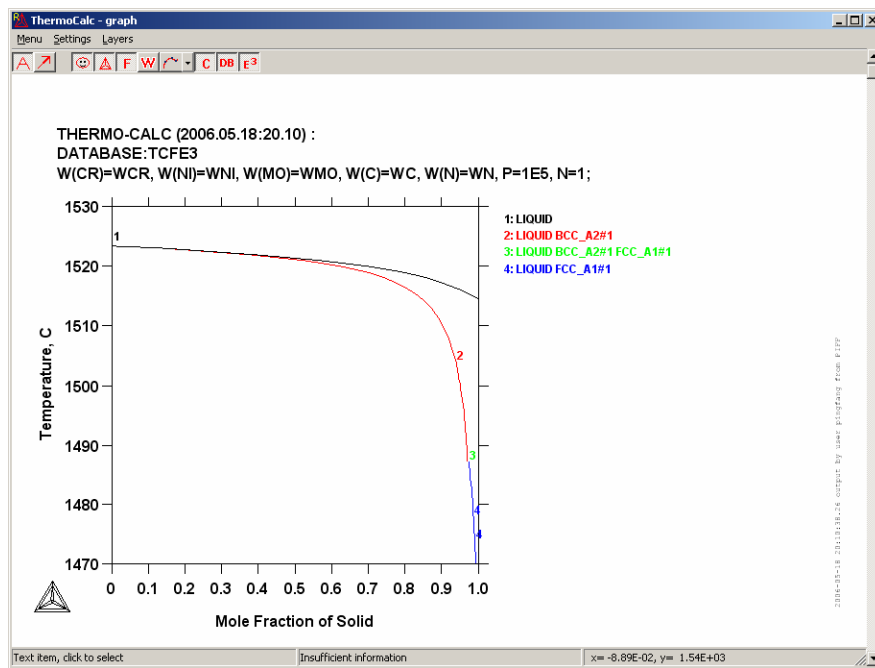


图10-21a: 传统的 SCHEIL 模块模拟结果绘制的默认图形

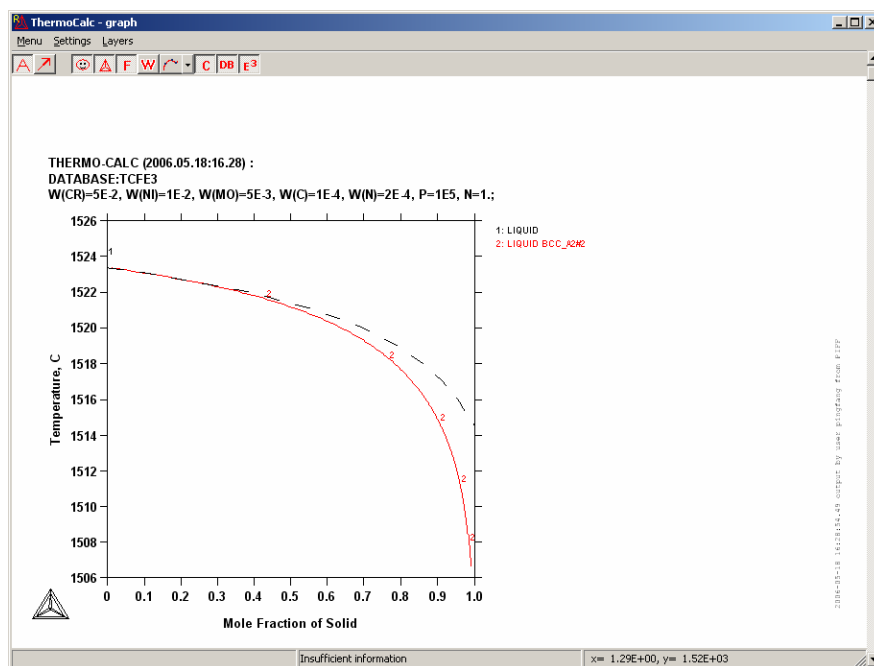


图10-21a: 改进的 SCHEIL 模块模拟结果绘制的默认图形

#### 第八步: 编辑/导出/保存所绘制的图

当 SCHEIL 模块模拟的图形在屏幕上绘制出来后, 用户可以立即在 *Thermo-Calc* 图形窗口编辑/导出/保存/打印所绘制的图 (有关详细的 *Thermo-Calc* 绘图窗口的描述请见第 9.3.8 节)。

用户同样也可以选择 (见下面的子选项) 将所绘制的图形导出为硬拷贝 (有多种格式可供选择, 详见 9.3.6 节的 SET\_PLOT\_FORMAT 命令), 将所绘制图形的 X-/Y-轴的内容保存为简单的文本文件 (如 EXP 实验数据文件, 详见 9.4.2 节的 MAKE\_EXPERIMENTAL\_DATAFILE 命令), 以及决定用 SCHEIL 模块模拟的同一结果绘制更多的图形。

Hard copy of the diagram? /N/: <N or Y>

回答 N (No): 当前绘制的图将不会导出/保存为硬拷贝;

回答 Y (Yes): 当前绘制的图将会导出/保存为硬拷贝 (任何图形文件), 这样程序将进一步询问用户以下的问题:

Plot format /6/: <a graphical format such as 5>

指定所需图形文件的格式。之后, 绘图设备的转变情况将会在屏幕上显示出来。

CURRENT DEVICE: MS-Windows

NEW DEVICE: Postscript portrait mode

USE POSTSCRIPT FONTS /YES/: <Y or N>

回答 N (No): 没必要指定 PS 文件的字体;

回答 Y (Yes): 应当进一步制定一个特殊的 PS 文件的字体。这种情况下, 用户需进一步回答一些相关的问题:

```
SELECT FONTNUMBER /9/: <a PostScript font number, e.g. 27>
NEW FONT: Times-Bold
FONT SIZE /.3583299909/: <a desired font number, e.g..32>
TITLE : <a desired title such as Steell-SCHT-a>
OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/: <a desired file name, e.g. Steell-SCHT-a>
CURRENT DEVICE: Postscript portrait mode
NEW DEVICE: MS-Windows
```

USE HARD COPY FONTS /YES/: <Y or N>

回答 N (No): 没必要指定硬拷贝文件的字体;

回答 Y (Yes): 应当进一步制定一个特殊的硬拷贝文的字体。这种情况下, 用户需进一步回答一些相关的问题:

```
SELECT FONTNUMBER /1/: <1 for Windows; 9 for Linux/UNIX>
NEW FONT: Arial Bold
FONT SIZE /.3409499914/: <the default size is normally OK>
```

Save coordinates of curve on text file? /N/: y

回答 N (No): 当前绘制的图将不会保存为文本文件 (任何的 EXP 文件);

回答 Y (Yes): 当前绘制的图将会保存为文本文件 (一个 EXP 文件), 这样程序将进一步询问用户以下的问题:

File name /scheil/: < a desired file name, e.g. Steell-SCHT-a>

Any more diagrams? /Y/:

回答 N (No): 程序将不会用当前模拟的结果继续绘制其它的图, 中止当前 SCHEIL 模块的运行, 而且 TCC 程序将会返回至先前调要 SCHEIL 模块的地方 (通过 GO SCHEIL 命令完成);

回答 Y(Yes): SCHEIL 模块将允许用户采用同一模拟结果继续绘制其它的图 (这和主选项 2 的情况一样, 详见第 8 步)。

## 第九步: 绘制其它的图

在任何主选项（1, 2 或 3）中，只要用户对 “Any more diagrams?” 这个问题回答为 Y (Yes) 时，SCHEIL 模块就会给用户从同一 SCHEIL 模块模拟结果（或是保存在当前的工作空间的结果或是在打开的之前在 SCHEIL 模块中保存的 POLY3 文件）进行定义和绘制许多其它类型的图形的机会。

.....

The following axis variables are available

```

T --- Temperature in Celsius
NL/BL --- Mole/mass fraction of liquid
NS/BS --- Mole/mass fraction of all solid phases
NS(ph)/BS(ph) --- Mole/mass fraction of a solid phase
W(ph,el) --- Weight fraction of a element in a phase
X(ph,el) --- Mole fraction of a element in a phase
NH/BH --- Latent heat evolution per mole/gram

```

"el" and "ph" are name of element and phase, respectively  
 "\*" can be used as a wild character for "el" and "ph"

.....

X-axis Variable: <a property for the X-axis; e.g. T>  
 Y-axis Variable: <a property for the Y-axis; e.g. BL>

在完成 X-/Y-轴的设置后，在屏幕上的 **Thermo-Calc 图形窗口** 中最先绘制的是其想要的图（如温度(°C)与液相的质量分数的曲线）。与默认图形相同的是，用户也可以立即在 **Thermo-Calc 图形窗口** 编辑/保存/打印所绘制的图（详见 9.3.8 节）。

用户也可以选择（参见下面的子选项）放大所绘制的图形，将图形导出为硬拷贝（以各种图形格式，详见 9.3.6 节中的 SET\_PLOT\_FORMAT 命令），将所绘制图形的 X-/Y- 坐标保存为简单的文本文件（即：EXP 实验数据文件，详见 9.4.2 节的 MAKE\_EXPERIMENTAL\_DATAFILE 命令），以及决定用同一 SCHEIL 模块模拟结果绘制更多的图形。

```

Zoom in? /N/: <N or Y>
Change scaling of X-axis? /Y/: <N or Y>
Minimum /0/: < e.g. 1505>
Maximum /1/: < e.g. 1525>
Change scaling of Y-axis? /Y/: <N or Y>
Minimum /0/: < e.g. 0>
Maximum /1/: < e.g. 1.0>
Zoom in? /N/: <N or Y>
Hard copy of the diagram? /N/: <N or Y>

```

```
Save coordinates of curve on text file? /N/: <N or Y>
Any more diagrams? /Y/: <N or Y>
```

在图 10.16 中已经展示了，按照这样方式用同一 SCHEIL 模块模拟结果（或是保存在当前工作空间中的结果或是打开一个 SCHEIL 模块之前保存的 POLY3 文件）得到的许多其它图形；以及一些这种非默认的图形。

### 10.8.5 SCHEIL 模块模拟的演示实例

在软件安装目录的\TCEX\目录下（TCEX15.TCM 和 TCEX30.TCM）以及 **TCCR** 实例集中有两个例子阐述了怎样进行各种 SCHEIL 模块的模拟和图形的处理。

- |                   |            |                                                                            |
|-------------------|------------|----------------------------------------------------------------------------|
| <b>Example 15</b> | TCEX15.TCM | 阐述了用 SCHEIL 模块模拟 Cr-10Ni 合金的凝固过程（合金元素的成分用重量百分数表示）。                         |
| <b>Example 30</b> | TCEX30.TCM | 阐述了用 SCHEIL 模块模拟 Al-4Mg-2Si-2Cu 合金的凝固过程（合金元素的成分用重量百分数表示）。                  |
| <b>Example 48</b> | TCEX48.TCM | 阐述了用 SCHEIL 模块模拟 Fe-10Cr-1C 合金的凝固过程（合金元素的成分用重量百分数表示），并允许间隙原子 C 在固相中存在反向扩散。 |

### 10.8.6 Scheil-Gulliver 模拟的参考文献

- Chen Q., and Sundman B. (1999) *TQ-I Thermodynamic Calculation Interface: Programmers' Guide and Examples*. Thermo-Calc AB.
- Jansson Å., and Sundman B. (1997) Simulation of solidification of light alloys using a thermodynamic database. In Jansson Å. *Phase Diagram Evaluation and Applications in Light Metal Alloys*, KTH Ph.D. Dissertation.
- Gulliver C.H. (1913) *J. Inst. Metals*, **9**, 120.
- Saunders N (1996) Phase diagram calculations for commercial Al-alloys. *5th Intl Conf. On Al-Alloys*, Grenoble, France.
- Sundman B., Jansson B., and Schalin M. (1993) Thermodynamic calculations made easy. *J. Phase Equilibria*, 573-562.
- Scheil E. (1942) *E. Metallkde*, **34**, 70.

## 10.9 REACTOR 模型

### 10.9.1 REACTOR 模型介绍

同类和异类的相互作用的化学动力学是各种材料过程的一个重要的部分。对于材料研究开发领域中现有的软件包来说，模拟这种过程，加上平衡，化学动力学和传输（扩散，流动和其它机制）是一项复杂的任务，如：PHOENIX，ASPEN，和 FACSIMILE。然而，在这些软件包中应用可靠的化学动力学参数是极其困难的，尤其是当动力学速率是温度，压强，成分，活性表面积等的方程的时候。

对化学动力学问题的一个非常著名的简化就是应用多级稳态反应假设。Eriksson 和 Johansson (1978)发明了一种模拟这种简化过程的方法。多年前我们就在 TCC 软件中采用了这种方法，并发展成了一种专门的模块，称为 **REACTOR** 模块。该模型能够对多级稳态反应堆的同向或逆向原料流和反应堆不同阶段或与周围环境的能量交换进行动力学模拟。过程发生在这样一个连续的工作反应堆中（垂直或水平），而且原料和能量可以在任何阶段提供供给。各种化学反应可以发生在局部，且其速率受温度（和压强）以及在一段体积流内形成的相的控制，以便在其它体积流内进行进一步的反应或离开反应堆后形成部分的产物。自 TCCQ 版本以来，我们已经对 REACTOR 模块进行了更新。它不仅可以模拟稳态过程，还可以模拟随时间变化的动态过程，如：液态钢的脱碳过程。

有关反应堆的一些概念可以进一步参考在 10.9.4 部分。这种多级稳态反应是许多冶金过程的特性（如：硅石碳热还原，回转窑，鼓风炉，电热炉，反射炉，梯度凝固等）。

为模拟这种动态过程，REACTOR 模型在概念上可以在气相和凝聚相以相反或平行方向流动之间分为几个连续的段。沿着定义的方向，气态产物和凝聚态产物将离开某一特定的段到相邻的段反应，或者在相同（顺流）或相反（逆流）的终端离开反应堆。这样一来，用户就可以通过输入各种所需成分和能量（焓或熵）的值来预测反应堆内的温度和成分曲线。我们可以找到过程的最佳条件，即能保证用最少的能量消耗产生最多的产物；这种信息对特种工程技术的开发显得尤其有用，而不需要求助于昂贵的试错试验。

如在 10.3 部分所述，REACTOR 模块与基本模块(例如：TDB, GES, POLY, POST, PARROT 和 ED-EXP 模块)是命令行用户界面，而不是问题行界面 (如其它专用模块的编码，例如：BIN, TERN, POT, POURBAIX 和 SCHEIL)。

REACTOR 模型在内部与 TDB 模块相连以获得所定义体系的热力学数据，与 GES 模块相连以获得每个相的热力学性质的数据处理及模型的建立，与 POLY 模块相连以计算多级稳态反应堆的局部和部分平衡及列出在每步工具箱中的模拟结果。

采用这个高级的模块，用户就可以对多级稳态反应堆或其它动力学过程进行模拟。已经得到验证的应用实例有在熔炼炉中不同部分的电弧硅的形成(TCCR 中的例 24)和液态钢的脱碳过程(TCCR 中的例 51)。



下面列出了 REACTOR 模块中的所有命令：

---

REACTOR: ?

|                    |                       |                  |
|--------------------|-----------------------|------------------|
| AMEND_RECORD       | EXECUTE_POLY3_COMMAND | LIST_RECORDS     |
| BACK               | EXIT                  | PATCH_WORKSPACE  |
| CREATE_DIVIDERS    | GOTO_MODULE           | READ_WORKSPACE   |
| CREATE_PIPES       | HELP                  | SAVE_WORKSPACE   |
| CREATE_PROBE       | INFORMATION           | SHOW_PROBE       |
| CREATE_STAGE_BOXES | LIST_DESIGN           | START_SIMULATION |

REACTOR:

---

### 10.9.2 多级稳态反应堆模拟的一些概念

从技术上讲，我们在采用了化学反应在反应堆中进行直至完成是这个基本的假设。每一阶段在其达到稳态条件前都被认为是单独的一段，这可以通过物质和能量（焓或熵）输入和输出总的平衡来表征。在反应堆中可以分两种类型的阶段：

- ◆ **能量控制段：**恒定的反应温度由化学和热平衡决定。在该反应温度，该段内的总焓变或熵变与从体系外提供的焓或熵（如：电加热）或这段的热损失量相抵消。
- ◆ **温度控制段：**当该过程的温度曲线已知且将反应温度设为一个条件，进而反应的总能量（焓或熵）可按照局部平衡来进行计算。

根据所选的反应堆类型（顺流或逆流），某一段中产生的所有的相都可迁移到邻近的段中。但是，当在反应堆中有未完成的反应时，程序会假定离开该段的气态或凝聚态中间反应产物绕过相邻段而不经冷却或加热过程，或在反应发生之前分在几个段中。出于模拟的目的或基于实际应用经验，我们将对受影响反应产物的量来进行估计。这个转换成分数值的量则被称为“分配系数”。例如，离开某一指定段的 80% 的气体可能在下一段反应，其中 15% 可能在绕过一段，而 5% 可能在反应前绕过两段，等等。对气态混合相和每一个凝聚相（化学计量相或溶液相），可以设置不同的分配系数。顶部和底部的段意味着在这些特殊段形成的产物会离开反应堆。图 10-18 示意性地表示了一个反应堆的分配系数。

每一段中的局部化学平衡和热平衡的假设，加上所给分配系数就可给出在每段边界处的气态和凝聚态流的成分和温度。这种越过段界的流未达到化学平衡，而且与平衡态的偏离量和段的物理长度成比例。如果只有一个段，这就意味着不存在流的分配，只有离开的流才有与段内化学平衡和热平衡对应的成分和温度。如果一个反应堆中段的数目增长到无穷大，段中的每个点都可达到化学平衡和热平衡。因此，通过选择段的数目和分配系数，我们可以在在一定程度上模拟反应的化学动力学对质量和能量转换的过程的影响。

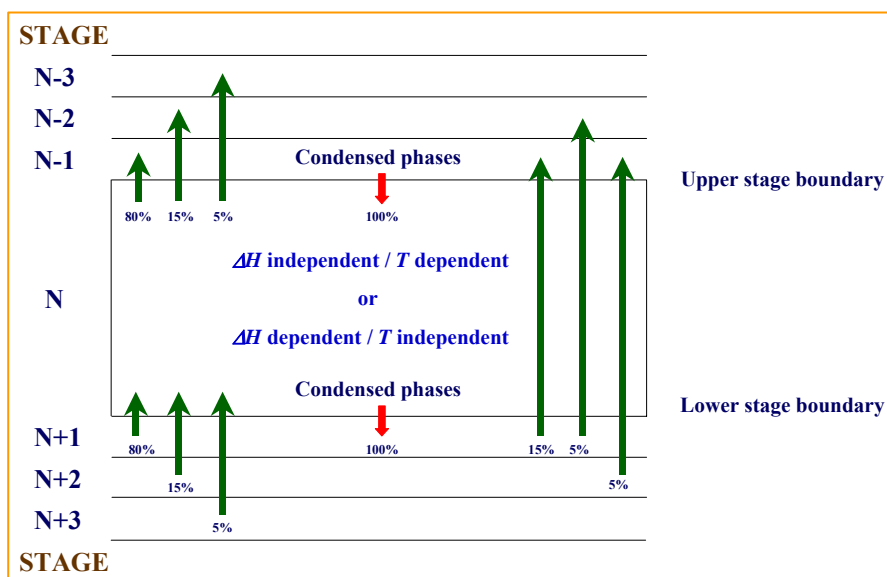


图 10-18. 多级稳态反应堆概念的示意图

### 10.9.3 REACTOR 模块的命令

#### 10.9.3.1 AMEND\_RECORD

**描述:** 该命令用来修正一些已经建立的记录，但是目前该命令还未添加到模块中。

**大纲:** AMEND\_RECORD

#### 10.9.3.2 BACK

**描述:** 该命令用于将控制切换到最近使用过的模块。也可参见 GOTO\_MODULE。

**大纲:** BACK

#### 10.9.3.3 CREATE\_DIVIDERS

**描述:** 该命令用于定义段界及各段之间相的分配方法以与热和质量的分割方法。

**大纲:** CREATE\_DIVIDERS

**随后的提示:** Number of dividers /4/: <the number of dividers>  
指定反应堆中的分隔数目（各段之间的边界数）。通常来说是段的数目加 1：  
比如，若段工具箱的数目已经被定义为 4，那么分隔数目就应定为 5。

Number of outputs for divider # /3/: <the number of outputs>  
指定某一特定分隔体#的输出数目。

Percent of input to output 1 /100/: <percent of input>  
定义在当前分隔体#中从输入到输出 1 的百分数。

Percent of input to output ## /100/: <percent(s) of input(s)>

定义在当前分隔体#中从输入到输出##的百分数。这个过程可以重复执行直至最后一个输出被指定。

#### 10.9.3.4 CREATE\_PIPE

**描述:** 该命令定义在各段之间的管以及热和质量在周围环境（记录号为 0）与反应堆之间、反应堆中各段之间，及沿着各分隔体（在反应堆中的段界）的传输方式。

**大纲:** CREATE\_PIPES

**随后的提示:** From record: <a record number>

指定一个记录编号。如果反应堆中有 4 个段，程序中将有以下的：

- 0 周围环境
- 1-4 段工具箱 (段)
- 5-9 分隔体(段界)

Pipe to record: <another record number>

指定另外一个记录号，即：质量和热将从当前的记录(在上面定义的)流入的记录。在这个提示之前，屏幕上将会出现一个信息说明应在这个管中定义何种类型的质量或热流(根据阶段工具箱 和分隔体的定义，它们在该命令之前已经创建了)。这一步是在当前的记录中重复质量或热的所有输入和/或输出。

#### 10.9.3.5 CREATE\_PROBE

**描述:** 该命令用来创建探测器，但是目前还没添加到模块中。

**大纲:** CREATE\_PROBE

#### 10.9.3.6 CREATE\_STAGE\_BOXES

**描述:** 该命令用来将几个反应段创建为工具箱(段)，其中，我们必须定义质量流入和初始温度或来自周围环境的热输入，以及在每一段中的质量输出和初始温度。

**大纲:** CREATE\_STAGE\_BOXES

**随后的提示:** NUMBER OF STAGE BOXES /4/: <the number of stage boxes>

指定反应堆中段工具箱的数目。随后，程序中将会出现下面的信息：

YOU MUST FIRST DEFINE FEED FROM SURROUNDINGS!

现在，我们必须在随后的提示中定义到反应堆的质量和/或能量（来自周围环境）的供给。

GIVE FEED TO SYSTEM: <feed>

这里，我们必须定义一个提供给反应堆的供给（质量或热）。有两种类型的供给可以使用：

第一，作为热（焓）的输入量，

H=Value

第二，作为某一指定物种或元素的输入量及其初始温度，

N(SPECIES)=Value, 输入温度

## Thermo-Calc 用户指导书

(在一行上输入, 或在随后的提示中输入温度)

Input temperature /298.15/: <input temperature>

GIVE FEED TO SYSTEM: <feed>

指定提供给反应堆的其它供给 (质量或能量)。按 <RETURN> 则会结束 供给的输入, 随后将会出现以下的信息:

GIVE FOR STAGE BOX #

现在开始定义段工具箱的类型(尤其是用#编号的段), 并指定段中初始温度和每个相的输出的估计值。

TYPE OF BOX /EQUILIBRIUM/: <type of box>

目前, 程序只允许 EQUILIBRIUM 类型; 按 <RETURN> 接受选择。

Is the stage heat controlled? /Y/: <Yes or No>

Y (Yes) 意味着当前的段是热控制的, 而 N (No)则表示不是热控制的。

Initial guess of temperature? /1000/: <initial temperature>

给当前的段赋一个初始温度(K)的估计值; 可以通过按<RETURN> 来接受默认的估计值。

Give initial amount: <initial amount of mass or heat>

这里, 用户可以指定当前段中的质量和/或热的初始量。可使用两种类型的初始量:

第一, 热 (焓) 的初始量,

H=Value

第二, 某一物种或元素的初始量及其初始温度,

N(SPECIES)=Value, 输入温度

(在一行上输入, 或在随后的提示中输入温度)

Input temperature /298.15/: <input temperature>

Give initial amount: <initial amount of mass or heat>

进一步指定当前段中的初始量 (质量或能量)。按<RETURN> 结束初始量的输入, 随后后将会出现以下信息:

Each phase may have a separate output, give these

现在开始定义每个相的输出。

Phase name /REST/: <name of phase>

指定一个有单独输出的相, 例如: GAS; 按<RETURN> 接受所有 REST 相均没有有单独的输出。然后, 程序将会询问用户有关所有其它段的进一步

定义 (一个接一个), 重复上面的一些问题, 直到反应堆中的最后一个段也被定义了为止。

### 10.9.3.7 EXECUTE\_POLY3\_COMMAND

**描述:** 该命令给在 REACTOR 模块中直接使用各种 POLY 命令提供了可能性。

**大纲:** EXECUTE\_POLY3\_COMMAND <a valid POLY command>  
这里, 我们可以使用任何的 POLY 命令 (见第 8 部分)。

### 10.9.3.8 EXIT

**描述:** 该命令用来终止程序并返回到操作系统中。除非之前使用了 SAVE 命令(与在 GES, POLY, PARROT 或 REACTOR 模块中), 否则所有的数据和结果都将丢失。

**大纲:** EXIT

### 10.9.3.9 GOTO\_MODULE

**描述:** 该命令用于各模块间的切换。用户必须输入所需的模块名。欲获得所有模块的列表, 可按 <RETURN> 键 (也可参见 5.4.11 部分)。

**大纲 1:** GOTO\_MODULE <module name>

**大纲 2:** GOTO\_MODULE

**随后的提示:** MODULE NAME:  
NO SUCH MODULE, USE ANY OF THESE:  
SYSTEM\_UTILITIES  
GIBBS\_ENERGY\_SYSTEM  
TABULATION\_REACTION  
POLY\_3  
BINARY\_DIAGRAM\_EASY  
DATABASE\_RETRIEVAL  
FUNC\_OPT\_PLOT  
REACTOR\_SIMULATOR\_3  
PARROT  
POTENTIAL\_DIAGRAM  
SCHEIL\_SIMULATION  
POURBAIX\_DIAGRAM  
TERNARY\_DIAGRAM  
MODULE NAME: <module name>

**选项:** module name -- 随后所要打开的模块名。

### 10.9.3.10 HELP

**描述:** 该命令可列出所有的命令或给出某一指定命令的解释。

大纲 1:           HELP <command name>

大纲 2:           HELP

随后的提示:   COMMAND: <command name>

选项:           command name -- 输入想要获取帮助的命令名 (REACTOR 模块中的一个命令)

注意:           如果在不出命令名的前提下按<RETURN> 键, 程序将会列出所有的 REACTOR 命令。

指定唯一的命令屏幕上将会出现那个命令的解释 (通常与用户指导书中的文本相同)。

若输入一个命令的简写形式且不唯一, 程序将会列出所有相匹配的命令。只有输入一个唯一的缩写形式或完整的命令名才可获得所需命令的信息。

### 10.9.3.11 INFORMATION

描述:           与它们在本章的不同部分被描述的那样, 各种 POLY (和 REACTOR)的主题的基本信息可用这个命令来获取。

大纲:           INFORMATION

随后的提示:   WHICH SUBJECT /PURPOSE/: <subject name>  
                必须给出主题的信息。各个主题的更多的信息出现在下面的列表中。(如果输入一个问号“?”就可看见该列表)。

### 10.9.3.12 LIST\_DESIGN

描述:           该命令用于列出反应堆的设计细节, 但目前该命令尚未添加到程序中。

大纲:           LIST\_DESIGN

### 10.9.3.13 LIST\_RECORDS

描述:           该命令可在屏幕上列出所有已经创建的反应堆的记录 (包括段工具箱, 分隔体, 管, 等等)。

大纲:           LIST\_RECORDS

### 10.9.3.14 PATCH\_WORKSPACE

描述:           该命令只适用于清楚自己在做什么的人!

大纲:           PATCH\_WORKSPACE

### 10.9.3.15 READ\_WORKSPACE

描述:           REACTOR 工作空间(与 POLY3 和 GES5 工作空间一起) 和利用 SIMULATE 命令模拟的结果都可从一个文件中读取, 而且他们都是之前用 SAVE\_WORKSPACE 命令保存在该文件中的。 这个 \*.RCT 文件不能打印的。

大纲 1:           READ\_WORKSPACE <file name>

**选项:** file name -- 必须指定先前保存的一个 RCT 文件名, 且 REACTOR 和 POLY3/GES5 工作空间将从该文件读取。如果它的默认扩展名是 “.RCT”, 用户就不需要输入扩展名, 否则用户则必须输入整个 RCT 文件的名字。

**大纲 2:** READ\_WORKSPACE

**随后的提示:** File name /ABCDEF/: <file name>  
程序显示出“ABCDEF”作为最近指定的 RCT 文件的名字, 或如果没有已经保存的工作空间在运行, 则作为“RESULT”。按 <RETURN>键或输入一个指定的文件名, 用户可以从该文件读取 REACTOR(和 POLY3/GES5)的工作空间。

**注意:** 在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 的工作环境下, 如图 10-19 所示, 如果在这个命令之后没有给出文件名或文件名路径不正确, 在屏幕上将会跳出一个 **打开文件**窗口, 以使得用户正确地指定路径(在**寻找**工具箱中)和文件名(在 **文件名**工具箱中)。文件类型(即, RCT, 在**文件类型**工具箱中)不能被改变。点击**打开**按钮, 程序从指定的、之前保存的\*.RCT 文件打开 REACTOR (和 POLY3/GES5)工作空间来继续进行下去。用户也可以取消这种**打开文件**的对话框, 这样一来程序就不会打开之前保存过的 REACTOR (和 POLY3/GES5)工作空间。

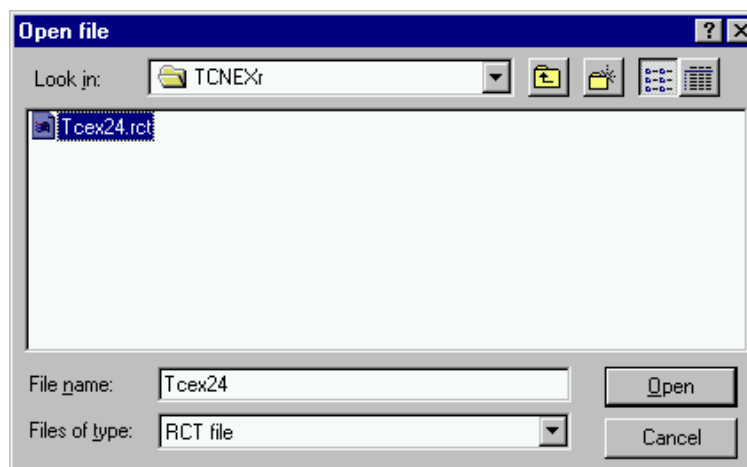


图 10-19. “打开文件”窗口: 从一个\*.RCT 文件中读取 REACTOR 工作空间。

### 10.9.3.16 SAVE\_WORKSPACE

**描述:** 使用该命令可将 REACTOR (和 POLY3/GES5)工作空间保存在一个文件中。在 GES5 工作空间, 所有热化学数据都被储存。在 POLY3 工作空间, 所有热化学数据, 所有的条件, 状态变化, 输入的符号等等都被储存。在 REACTOR 工作空间, 所有的多级稳态反应堆及其分配系数, 与 GES5 和 POLY3 工作空间一起都被储存。在 SAVE 命令之后, 用户简单地输入 READ 命令总能回到他执行 SAVE 命令时的状态。

把 REACTOR (和 POLY3/GES5) 工作空间保存在一个文件中之后, 用户可以离开这个程序, 并在随后的时间读取该文件并从所保存的状态继续工作。注意:



START\_SIMULATE 命令会用最近指定的名字自动保存在工作文件中。不可在 START\_SIMULATE 命令后使用 SAVE 命令！

大纲 1: SAVE\_WORKSPACE <file name>

选项: file name -- 必须指定一个用户想要的文件名。RCT 文件默认的扩展名是“.RCT”，而且用户也可以使用任何其它想要的扩展名。

大纲 2: SAVE\_WORKSPACE

随后的提示: File name /RESULT/: <file name>

通过按 <RETURN>，用户可以将 REACTOR (和 POLY3/GES5) 工作空间保存在一个文件中，且该文件的默认名是 RESULT，其默认扩展名是“.RCT”。

或者用户可以指定一个想要的文件名，其默认扩展名为“.RCT”，同时用户也可以使用其它想要的扩展名。

Overwrite current file content /N/: <Y or N>

(在 Windows NT/2000/XP/95/98/ME 环境下)

或

Proceed with save /N/: <Y or N>

(在 PC Linux 和各种 UNIX 平台下)

只有当已经有一个相同名字的文件存在时用户才会被询问这个问题，而且屏幕上将会出现以下信息：

```
This file contains results from a previous START_SIMULATE command.
The SAVE command will save the current status of the program but destroy
the results from the previous START_SIMULATE commands.
```

如果回答 Y，之前的内容将会被覆盖。注意：由 START\_SIMULATE 命令保存的结果会被 SAVE 命令破坏。您可以通过使用 START\_SIMULATE 命令来添加几个结果而不破坏先前的结果，但是，SAVE 命令会将它们全部擦除。想要删除一些 SIMULATE 命令的结果，可以使用 AMEND\_RECORD 命令。

如果回答 N，将不会保存任何东西，而且先前的内容也不会被覆盖。您可以之后使用 SAVE 命令，并用一个未指定的名字来保存 REACTOR (和 POLY3/GES5) 工作空间。

注意: 在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 的工作环境下，如图 10-20 所示，如果在这个命令之后没有给出文件名或文件名路径不正确，在屏幕上将会跳出一个 **另存为** 窗口，以使用户正确地指定路径(在 **保存** 工具箱中)和文件名(在 **文件名** 工具箱中)。文件类型(即，RCT，在 **另存为类型** 工具箱中)不能被改

变。点击**保存**按钮，程序会将 REACTOR (和 POLY3/GES5)工作空间保存在一指定的\*.RCT 文件中。用户也可以取消这种**另存为**的对话框，这样一来当前的 REACTOR (和 POLY3/GES5)工作空间就不会被保存了。

但是，如果在这个目录下已经有一个相同名字的文件（如在**保存**工具箱中**所示**），如**图 10-21** 所示，屏幕上将会跳出一个提示信息。如果按下**不**按钮，程序将会返回到**另存为**窗口，以便用户选择其它**保存于**的路径或不同的**文件名**。如果按下**是**按钮，程序可能会询问这个问题“Overwrite current file content /N/: ”，以便用户决定是否要在已有的\*.RCT 文件中重新写入当前的 REACTOR (和 POLY3/GES5)工作空间（如上）。

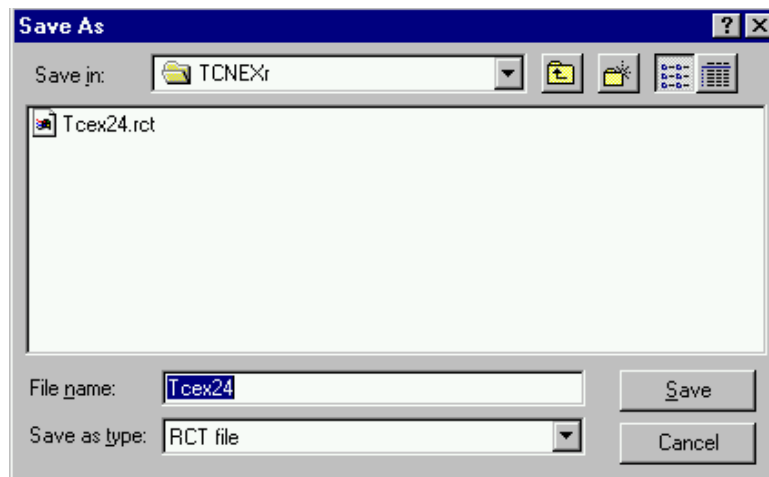


图 10-20. “另存为”窗口：将 REACTOR 工作空间保存为 \*.RCT 文件。

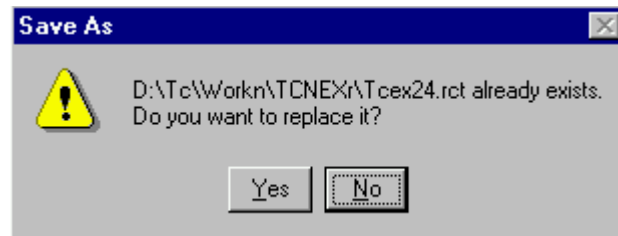


图 10-21. 提示信息：是否将 REACTOR 工作空间保存在已存在的\*.RCT 文件中。

### 10.9.3.17 SHOW\_PROBE

**描述:** 这个命令会显示已创建的 probe 的详细信息，但尚未完成。

**大纲:** SHOW\_PROBE

### 10.9.3.18 START\_SIMULATION

**描述:** 该命令用于开始反应堆的模拟，并列出现所有迭代的结果。每次迭代的输出均包含每段的条件设置，而且用户还可以选择一些状态变量列出来。在每个循环之后，程序会列出所有段的温度。

**大纲:** START\_SIMULATION

**随后的提示:** Max number of loops /10/: <the max number of loops>

给出最大的循环数。REACTOR 模块将会重复该反应堆的模拟直到达到这个最大的循环数。

OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/: <file name or RETURN>  
 决定在屏幕上列出模拟结果 (按 <RETURN>键) 还是将它们保存在一个实验文件中 (默认扩展名为 .EXP)。注意: 每段中的条件不会被保存在该文件中, 而只能在屏幕上显示。

Output variables /T BP(\$)/: <variable name(s)>  
 指定将要与每段的条件在屏幕上列出或保存在输出的实验文件中的变量的名。

**输出举例:** 对于一个 4 步反应堆, 某一特定迭代的输出可以如下所示:

```
H=-991745.1, P=100000, N(C)=2.8468936, N(N)=6.78399966E-4, N(O)=3.8171615,
 N(SI)=1.77031
DEGREE OF FREEDOM 0
BP(GAS)=43.464341, BP(C1SI1_BETA)=25.175981, BP(C_S)=8.1588099,
 BP(QUARTZ_S3)=68.193896
1.78803E+03
BP(GAS)=61.971213, BP(C1SI1_BETA)=38.144346, BP(QUARTZ_L)=66.230717
2.06569E+03
BP(GAS)=67.66262, BP(C1SI1_BETA)=35.480983, BP(QUARTZ_L)=58.219292
2.08691E+03
BP(GAS)=71.23129, BP(SI_L)=22.471787
2.20831E+03
H=-924751.87, P=100000, N(C)=2.0594558, N(N)=5.17999978E-4, N(O)=4.0142358,
 N(SI)=2.7551438
DEGREE OF FREEDOM 0
BP(GAS)=43.464341, BP(C1SI1_BETA)=25.175981, BP(C_S)=8.1588098,
 BP(QUARTZ_S3)=68.193896
1.78803E+03
BP(GAS)=61.971213, BP(C1SI1_BETA)=38.144346, BP(QUARTZ_L)=66.230717
2.06569E+03
BP(GAS)=67.66262, BP(C1SI1_BETA)=35.480983, BP(QUARTZ_L)=58.219292
2.08691E+03
BP(GAS)=71.23129, BP(SI_L)=22.471787
2.20831E+03
H=-813239., P=100000, N(C)=1.6592668, N(N)=3.59999988E-4, N(O)=3.7549293,
 N(SI)=2.896635
DEGREE OF FREEDOM 0
BP(GAS)=43.464341, BP(C1SI1_BETA)=25.175981, BP(C_S)=8.1588098,
 BP(QUARTZ_S3)=68.193896
1.78803E+03
BP(GAS)=61.971213, BP(C1SI1_BETA)=38.144346, BP(QUARTZ_L)=66.230717
```

```

2.06569E+03
BP(GAS)=67.66262, BP(C1SI1_BETA)=35.480983, BP(QUARTZ_L)=58.219292
2.08691E+03
BP(GAS)=71.23129, BP(SI_L)=22.471787
2.20831E+03
H=7374.6403, P=100000, N(C)=8.84911857E-1, N(N)=1.99999996E-4, N(O)=1.9379203,
N(SI)=1.853872
DEGREE OF FREEDOM 0
BP(GAS)=43.464341, BP(C1SI1_BETA)=25.175982, BP(C_S)=8.1588097,
BP(QUARTZ_S3)=68.193896
1.78803E+03
BP(GAS)=61.971213, BP(C1SI1_BETA)=38.144346, BP(QUARTZ_L)=66.230717
2.06569E+03
BP(GAS)=67.66262, BP(C1SI1_BETA)=35.480983, BP(QUARTZ_L)=58.219292
2.08691E+03
BP(GAS)=71.23129, BP(SI_L)=22.471787
2.20831E+03
10 1788.03 2065.69 2086.91 2208.31 0.00 0.00 0.00

```

## 10.9.4 REACTOR 模块模拟的实例演示

在\TCEX\目录下（TCEX24.TCM）以及 **TCCR 实例集** 中有一个例子阐述了怎样进行 REACTOR 模型的模拟及图形的处理：

**例 24**            TCX24.TCM        对硅电弧熔炼炉中的多级稳态反应的 REACTOR 模型模拟的演示。其中，气相从顶部输出，凝聚相从底部输出。气相混合物从某一段流到更高的段时，80 % 会在之上的第一段中反应，15%在第二段反应，而 5%会在第三段反应。凝聚相将会向下流动且所有都会流到低一级的段中。

我们将在\TCEX\目录下和 **TCCR 实例集** 中增加另一个演示 REACTOR 模块是如何模拟液态钢的脱碳过程的例子。

**例 51**            TCX51.TCM        液态钢的动力学过程的 REACTOR 模块模拟的演示。

## 10.9.5 REACTOR 模块模拟参的考文献

Eriksson G., and Johansson T. (1978) *Scandinavia Journal of Metals*, **7**, 264-285.  
 Johansson T., and Eriksson G. (1984) *J. Electrochem. Soc.*, **131**, 365-702.

## 11 吉布斯自由能系统模块 (GES)

### 11.1 引言

吉布斯自由能系统 (GES)<sup>☞</sup>，是“热力学计算” (Thermo-Calc) 软件的一个基本模块。具有多种热化学计算子程序包。这个模块与 Thermo-Calc 和 DICTRA 的所有基本的和高级的模块相互联接。许多用户只有在进行评估时才用到 GES。

GES 模块的目的是为任何需要热力学数据的应用程序提供一个标准化的子程序系列。多种物质类型的所有热力学模型都包含在 GES 模块中。但是，大多数与模块相关的特性隐藏在模块中，且应用程序可以运用一组标准化子程序，*i.e.*，如打包进入 **TQ** 和 **TCAPI** 界面，计算总自由能或每相在任一温度、压力、成分的偏导数。

这个模块里包含有计算总自由能关于任一变量的一次或二次偏导数的分析性子程序，这是 Thermo-Calc 软件和其应用程序界面的一个特色。

GES 模块还给用户提供一些应用程序，这些应用程序的用户界面能够用简单概括的命令进行数据操纵。经过这个用户界面，你可以交互的进入和修改相描述，模型联系、基本热力学参数等等。此说明的目的就是为了描述这种用户界面。

POLY 模块以及所有其它基本的和特殊的模块，以及 DICTRA 程序，都能自由的调用 GES 系统中的子程序来计算任意热力学量。

GES 是由 SGTE(Scientific Group Thermodata Europe)定义的用于热力学计算的一个标准软件界面实施。

以下为 GES 模块的可用命令：

---

GES:?

|                    |               |                 |
|--------------------|---------------|-----------------|
| ADD_COMMENT        | ENTER_PHASE   | LIST_PHASE_DATA |
| AMEND_ELEMENT_DATA | ENTER_SPECIES | LIST_STATUS     |
| AMEND_PARAMETER    | ENTER_SYMBOL  | LIST_SYMBOLS    |

---

☞ **GES 模块用户说明书的修订历史:**

Feb 1984 第一版 (Bo Sundman 编辑)  
 Oct 1993 二次修订版 (Bo Sundman 编辑)  
 Mar 1996 三次修订版 (Bo Sundman 编辑)  
 Jun 2000 四次修订和增补版 (Pingfang Shi 编辑)  
 Nov 2002 五次修订和增补版 (Pingfang Shi 编辑)  
 June 2004 六次修订和增补版 (Pingfang Shi 编辑)  
 June 2006 七次修订和增补版 (Pingfang Shi 编辑)

|                         |                   |                    |
|-------------------------|-------------------|--------------------|
| AMEND_PHASE_DESCRIPTION | EXIT              | PATCH_WORKSPACE    |
| AMEND_SYMBOL            | GOTO_MODULE       | READ_GES_WORKSPACE |
| BACK                    | HELP              | REINITIATE         |
| CHANGE_STATUS           | INFORMATION       | SAVE_GES_WORKSPACE |
| DELETE                  | LIST_CONSTITUTION | SET_INTERACTIVE    |
| ENTER_ELEMENT           | LIST_DATA         | SET_R_AND_P_NORM   |
| ENTER_PARAMETER         | LIST_PARAMETER    |                    |
| GES:                    |                   |                    |

---

注意 ADD\_COMMENT 命令是 TCCQ 版本新出现的。

## 11.2 热化学

一个热化学系的吉布斯自由能是一个成分、温度和压力的函数。这些变量为某个固定值时，系统的稳定态是吉布斯自由能的最小的那个状态。GES 本身并不提供任何找到稳定状态的路径，但在本说明中描述了利用 GES 找到稳定状态的方法。

### 11.2.1 术语定义

为了描述 GES 结构，定义以下术语：

- **Elements(元素)** 指元素周期表中的元素，另外还有空位（用 va 表示）和电子（用 /- or 或 ze 表示）。空位是用来描述带亚点阵的相的化学计量偏差。用户还可以键入假想元素。
- **Species(物质)** 用来描述一个分子，像带电荷的集合体，元素都属于物质（species）。
- **Constituents(组元)** 组成一个相的物质（Species），一个相的组元是物质(Species)的子集。
- **Phases(相)** 系统的一个具有相同成分和结构的均匀部分。GES 中所有热化学数据对应于相和它们的组元的。
- **Composition(元素成分)** 每种元素在系统中的含量。
- **Constitution(相组成成分)** 相组成成分是指相中每一组元的含量。
- **Sublattices(亚点阵)** 用来描述相中随机排列的偏差，原子间隙、组元的尺寸和电负性的不同决定了组元占据相中的点阵位置的倾向不同。
- **Constituent array(组元排列)** 是指相的每一亚点阵中的一列组元。
- **Site-fraction(点阵分数)** 亚点阵中组元的分数，每一亚点阵中的点阵分数总和是一。

### 11.2.2 Elements（元素）和 species（物质种类）

GES 模块中某一个系统中的元素 (**elements**) 是按字母顺序列表的。但存在两个例外,那就是电子总是排在列表的第一,空位排在第二。在元素列表中每一元素分配一个连续的数字,数字从-1 开始 (-1 代表电子), 0 (0 代表空位) 和 1, 2... (其它元素)。元素以由一个或两个字母组成的名字来表示的(唯一的例外是: 电子用 /- 或 ZE 表示)。元素的物理化学数据有原子质量、参考态的 (*Selected Element Reference State* , SER)名称, 以及参考态 (SER) 在下 298.15 K 时焓和熵相对于它们在 0K 时的差值。

物质 (**species**) 列表主要是为了程序内部的应用, 鉴于一个物质既有化学式又有非化学式的名字, 因此系统在该部分特别增加了命名的机动性。如同相组元的命名, 物质也是用名字来表示的, 这就使得具有相同化学式但热力学性质不同的物质种类的区分变得容易, 例如 C2H2Cl2\_cis 和 C2H2Cl2\_trans 具有相同的化学式 C2H2Cl2。物质的名称, 必须以字母开头, 可以包括字母、数字、圆括号和字符 (如下划线)。注意在物质列表中的物质与任何相都没在关联, 只有在某些热化学性质与物质联系在一起时, 它才作为一个相的组元。

### 11.2.3 大写和小写形式

GES 模块可以运用大写或小写形式。用户可以用 REINITIATE 命令选择大小写。

在小写形式中, 必须把元素的第一个字母写成大写形式, 第二个字母(如果有)写成小写形式。在大写形式中, 大写和小写字母等同, 物质的化学式写为小写形式更为简单。如 CO 表示一氧化碳, 然而在大写形式中同样的物质必须写成 C1O 因为 CO 是表示钴。

### 11.2.4 Phases (相)

一个热化学系统至少存在一个相。在 GES 模块中一个系统可以键入任意多个相, 对于每一相, 必须描述该相的吉布斯自由能随温度、压力和成分的变化。

一个相有大量数据与之相联系:

- 一系列组元,
- 亚点阵结构信息等,
- 任意两组元之间的相互作用是用何种多项式来描述的信息(见规则模型信息),
- 特殊物理现象对吉布斯自由能的贡献如磁性有序化、静电相互作用假设等
- 描述与本相相关的热化学性质和特殊物理性质所需的所有参数 (如, 居里温度, 博恩方程)。

吉布斯自由能的成份依赖, 在 GES 中由内在数据结构描述, 这个数据结构在该相键入时就已经被创建了。有关信息将在 11.5 数据结构中深入讨论。相的吉布斯自由能总是对应于该相的单位公式, 其归一化除数是每一个亚点阵中阵点数的总和。如果空位是亚点阵的一个组元, 每一个相单位公式中的物质的总量就要随成分而变。在相的热化学描述中, 有一系列依赖温度和压力的参数。这些参数的表达可以由 T、P 的乘幂及自然对数和指数的形式给出。这种类型的表达式是以 T、P 为变量的函数, 称 **TP-函数**, 有关内容将在下一段中做更详细说明。



## 11.2.5 温度和压力的函数

GES5 工作空间中依赖于温度和压力的参数用一种类似于 FORTRAN 语言来描述，称为 **TP-函数**，这种函数的输入的格式非常严格。

**TP-函数**的基本实体称为“简单项”（**simple term**）。简单项的表示如下：

<实数>\* <符号名> \*\* <指数>\* T \*\* <指数>\* P \*\* <指数>

在<>中的文字表示所需的因子。其它的量必须精确的给出，并且具有它们的习惯性的定义，如 \* 表示乘， \*\* 表示乘幂。指数必须为整数。负指数必须用圆括号括起。简单项的多余的部分可以省略。

简单项举例如下：

```
14000
1.15*T
V1
1E-12*P**2
-456754.65*T**(-1)*P
10*V2*T
```

为了在这些函数中包含对数以及幂指数，允许简单项乘以另一个简单项的对数或指数。除了对数或指数也可以仅乘一个符号（标志符）。这种更为通用的式子称为一个“因式项（**term**）”例如：

```
1.15*T*LOG(T)
1E-6*LOG(-32000*T**(-1))
-5*V3*EXP(V4*P)
0.078*V1**(-1)*T**2*V2
```

简单项依次写下来就形成一个表达式。

例式：

```
10000-10*T+1.15*T*LOG(T)+1E-6*P+134567*T**(-1)-1E-12*T*P**2;
F1+2.5*R*T*LOG(T)+R*T*LOG(P);
```

通常一个函数用一个分号“;”来结束，或者用一个空行来结束。注意：标志符可以表示一个数值或另一个函数。

函数的约束条件是：

- 必须遵守简单项中的因子书写顺序。。

- 除非用于描述幂指数、对数或负指数，否则不允许出现圆括号
- 不允许用除号(允许使用负指数),
- 符号和数值中间不允许出现空格
- 一个简单项中只允许有一个标志符,
- 指数必须为整数

设立这些约束条件的目的，一些是为了更简单的分解函数；一些是为了能够快速计算函数值以及求出函数关于  $T$  和  $P$  的一阶和二阶偏导数。

如果了解更多关于函数和参数是如何存储在数据库中的信息，请参见热力学计算软件数据库说明书 (*Thermo-Calc Database Guide*) 中的第三章: (数据库模块 Database Module (TDB) – 管理者说明书) 里的第 6.3.14 (方程) 节 和 6.3.15 (参数) 节。

GES 命令 LIST\_SYMBOL 可以列出所有的或者任意一个的在 GES5 工作空间中已经定义了的特殊标志符(数字常量, 数字变量, 函数或表格)。

我们除了可以从数据库提取已定义的函数，还可利用 GES 命令 ENTER\_SYMBOL 来定义其它必要的函数。而且，任何一个已经定义好的标志符还可以通过 GES 命令 AMEND\_SYMBOL 来修改。

## 11.2.6 标志符

当输入 TP-函数的时候，**标志符 (Symbols)** 可以用于代替数值。由于热力学参数都是 TP-函数，这使得在定义参数函数时也可以运用标志符。

所有标志符存储在一个列表中。实际上列表中的一个标志符可以代表一个常数，变量，方程或一个列表：

- **数字常量** 就是值是固定不变的，在国际单位制中气体常数 的默认符号是  $R$ 。
- **数字变量** 就是指值是可以随时改变的。
- **函数** 在标志符列表中的函数可以由几个 TP-函数组成，这样做是为了给每个 TP-函数定义最高和最低的温度限制，在温度断点处的值是一个常量(即，它们不能随压力改变)。
- **列表** 当一个量随温度的变化难以用其它方式表达时，我们就可以用列表来表示它。列表中数值是对应于恒定的温度步长。位于步长中间的值可以用线性查补法来求。

可以用压力范围代替温度范围。可以通过设定最低温度为  $-10000$  来表明。断点处即理解为压力。函数必须是连续性的，在断点附近一阶、二阶导数也必须是连续。

标志符的这个特性，使我们能够用简单的 TP-函数语句，建立一个非常复杂的表达式。由于一个标志符可以表示一个简单数值，使得它还可以做为所有的 TP-函数的单独系数，通过修改标志符的值，我们就可以同时修改所有的 TP-函数的系数。在 PARROT 模块中(用于热化学数据

评估), 这种性质被用于修改相的描述以获得最接近于试验数据的评估。所有能够输入 TP-函数的标志符, 都存储在 GES5 工作空间的标志符列表中。

GES 命令 LIST\_SYMBOL 可以列出所有的或者任意一个的在 GES5 工作空间中已经定义了的特殊标志符(数字常量, 数字变量,函数或表格)。

我们除了可以从数据库提取已定义的标志符, 还可利用 GES 命令 ENTER\_SYMBOL 来定义其它必要的标志符。而且, 任何一个已经定义好的标志符还可以通过 GES 命令 AMEND\_SYMBOL 来修改。

### 11.2.7 可混合性间隙 (Miscibility gaps)

一个相可能同时存在两个或更多不同的成分。通常被称为可混合性间隙但也可以归咎为有序化反应。不论在 GES 模块或者是在 POLY 模块, 两个相是用同相同的热力学参数来描述的, 但 GES 模块必须被提前告知这个相有两个或更多个成分。详细说明请看: AMEND\_PHASE\_DESCRIPTION 命令或 POLY 模块中的 SPECIAL\_OPTION 命令。

## 11.3 热力学模型

每相的总吉布斯自由能取决于它的相组成成分, 温度和压力, 并且其由热力学模型描述并通过 GES 模块中的数学等式表达。相组成成分的依赖性最难以找到一个适合的模型。温度和压力的依赖性对于某些相来说也很困难(例如离子溶液)。

GES 模块为不同状态的许多物质提供提供了大量热力学模型 (如表 11-1)。详细信息如下。

**表 11-1. GES 模块中提供的热力学模型**

| GES 模型名称                | 全称                   | 应用相                  |
|-------------------------|----------------------|----------------------|
| Ideal (理想)              | 理想取代模型               | 理想气体                 |
| Regular (规则)            | 规则溶液模型               | 二元合金                 |
| Redlich-Kister          | Redlich-Kister 模型    | 二元合金                 |
| Polynom (多项式)           | 简单多项式模型              | 无亚点阵的二元相             |
| Legendre                | Legendre 多项式模型       | 无亚点阵的二元相             |
| Redlich-Kister_Muggianu | R-K 模型的 Muggianu 外推法 | 三元或更高元合金             |
| Redlich-Kister_Kohler   | R-K 模型的 Kohler 外推法   | 三元或更高元合金             |
| Toop-Kohler             | Toop-Kohler 外推模型     | 三元或更高元合金             |
| Kohler                  | Kohler 外推模型          | 三元或更高元合金             |
| Muggianu                | Muggianu 外推模型        | 三元或更高元合金             |
| CEM                     | 复合能模型 (亚点阵模型)        | 合金, 液相, 气相, 氧化物, ... |

|                          |                                 |                         |
|--------------------------|---------------------------------|-------------------------|
| TSILM                    | 两个亚点阵离子液相模型                     | 液相                      |
| Associate(联合)            | 联合模型                            | 液相, 矿渣                  |
| Quasichem-Ionic (准化学-离子) | 离子液相准化学模型                       | 液相, 矿渣                  |
| Quasichem-FACT00         | F*A*C*T 准化学模型                   | 液相, 矿渣                  |
| Quasichem-Irsid          | Irsid 矿渣模型                      | 液相, 矿渣                  |
| KFCM                     | Kapoor-Frohberg Cell 模型         | 液相                      |
| MO                       | Inden 磁有序模型                     | 合金                      |
| CVM                      | CVM 途径化学有序                      | 合金                      |
| Murnaghan                | Murnaghan 模型                    | 高-PT 矿物/合金              |
| Birch-Murnaghan          | Birch-Murnaghan 模型              | 超高-PT 矿物                |
| GPVT                     | 普通 PVT 模型                       | 合金, 液相, 矿物, <i>etc.</i> |
| SUPERFLUID               | SUPERFLUID 超流体 模型               | 纯气态& 气态混合物              |
| DHLL                     | Debye-Hückel 限制性法则              | 稀释水溶液                   |
| SIT                      | 特定离子相互作用理论                      | 稀释水溶液                   |
| PITZ                     | 普通 Pitzer's 形式                  | 浓缩水溶液                   |
| HKF                      | 修正的 Helgeson-Kirkham-Flowers 模型 | 浓缩水溶液                   |
| FLORY                    | Flory-Huggins 模型                | 高分子                     |
| G2SLA                    | 普通两态模型                          | 液态无定型相                  |
|                          |                                 |                         |

一个熟练的用户可以自己为每相选择一个特定的模型。对一般用户,数据库将为每相选择合适的模型。在任意模型中总吉布斯自由能都由一系列参数组成,这些参数依赖于 T 和 P 并都乘以成分分数。

### 11.3.1 标准吉布斯自由能

最简单的相是指只含有一种元素成分,它唯一的参数是该相的“标准”吉布斯自由能。这个标准吉布斯自由能是下面的两项的差值:

- 相在当前温度和压力下的吉布斯自由能
- 该元素在 1 个大气压和 298 K 时,其标准态 (SER) 的焓值

对于具有多组元的相,必须给出每个组元的标准吉布斯自由能(如果这个相是有亚点阵的,还必须给出每个组元排列的标准吉布斯自由能)。这个组元可以由许多元素组成的物种,但是标准吉布斯自由能总是相对于给定元素的标准态 (SER) 的。

我们选用标准吉布斯自由能,而不是传统的合金相图计算中常用的“晶格稳定态”(lattice stabilities)的吉布斯自由能的原因是:标准吉布斯自由能可以更容易的计算热容和绝对焓差值。

### 11.3.2 理想替代模型

对于一个含有一定成分范围的相，最简单的模型是理想替代模型 *Ideal Substitutional Model*。在这种模型中，组元等同于元素，组元的参数就是在这个相中组元对应元素的标准吉布斯自由能。这些参数乘以相应的成分分数，再加上理想混合熵就可以计算总吉布斯自由能。

### 11.3.3 规则溶液模型

理想替代模型往往不能充分描述一个相的实际吉布斯自由能，为此我们提供了许多待选模型，使用户可以选到一个可靠的模型。

在规则溶液模型 (*Regular Solution Model*) 中，引入了相的每对成份的参数。通过比较近似原子和非近似原子之间的结合能的不同，这种“二元相互作用”参数被赋予一定的物理意义。这个参数要乘以相应的两个成份的分数，当任一成份为零时，这个参数对自由能没有任何贡献。

在许多情况下，单独的二元参数不能很好的描述相的吉布斯自由能，因此又延伸出许多所谓的“过剩”模型，这些模型运用成分分数幂级数来描述二元参数是怎样依赖于成分的。当相只含有两种组元时，这两个组元的参数是等同的，因为这两个成份分数的总和是一，分数之间可以相互转化。因此，GES 模块只是应用了俗称为 *Redlich-Kister Model* 的模型，编程以处理成分分数的幂级数。*Redlich-Kister* 模型通常写为多项式：

$$X1 * X2 * (L0 + L1 * (X1 - X2) + L2 * (X1 - X2) ** 2 + L3 * (X1 - X2) ** 3 + \dots)$$

式子中的  $X1$  和  $X2$  是指成份分数； $L0, L1, L2 \dots$  是温度和压力函数。 $L0, L1, L2 \dots$  是描述二元参数是怎样依赖成分的。

为了从二元系外推至三元系甚至更高元系，上述表达式中必须还得加上三元系的成份分数。由此演出模型叫：*Muggianu 模型*。但是，当二个组元分数之和不为一时，二元参数的幂级数存在另外的选择性，这一不同的选择将会造成不同的结果。这种不同的结果引起了许多讨论：那就是是否有可能通过选择适当的幂级数和外推模型去描述一个反对称系统。

因为这种反对称性一定有其物理原因，所以 GES 使用了更普遍的亚点阵模型 *Sublattice Model*。使得其可以检查其他程序的计算，GES 还允许使用所谓的 *Kohler and Toop-Kohler 外推模型*。

GES 系统并不仅限于使用二元相互作用参数，当有足够的实验数据去优化三元、四元甚至更高元的参数时，这些多元参数也可以被 GES 系统所使用。三元参数并不罕见且在某些情况下显示它们也是依赖于成分的。在 GES 中，遵循 Hillert 建议，可以应有三元参数：

$$X1 * X2 * X3 * (V1 * L1 + V2 * L2 + V3 * L3)$$

其中  $X1, X2$  和  $X3$  分别是组元 1, 2 和 3 的成份分数，且

$$V1=X1+(1-X1-X2-X3)/3$$

$$V2=X2+(1-X1-X2-X3)/3$$

$$V3=X3+(1-X1-X2-X3)/3$$

L1, L2 和 L3 是 T 和 P 的方程。在三元系 1-2-3 中,  $V_i$  和  $x_i$  是等同的, 但是在外推到四元或更高元系时  $V_i$  的和总是一, 但  $x_i$  的和不是。

L1, L2 和 L3 参数在 ENTER\_PARAMETER 命令中由自由度确定。如果 L1, L2 和 L3 相等, 那么只需要一个自由度为零的参数。

如果有一个三元成分依赖的参数, 则必须输入所有三个参数 L1, L2 和 L3。这是为了确保用户懂得他在做什么。如果这个三元参数必须为零, 则赋给它一个为零的函数或一个很小的值。

在一个系统 A1, A2 和 A3 中, 替代相如液相 (LIQUID) 的三元参数为:

L(LIQUID,A1,A2,A3;0) 乘以 V1

L(LIQUID,A1,A2,A3;1) 乘以 V2

L(LIQUID,A1,A2,A3;2) 乘以 V3

### 11.3.4 使用组元而不是元素

在气态混和相中,通常以分子形式存在, 而且气相的组元的数量往往多于元素的数量。这种情况也有存在于水溶液或液相中。 甚至一些结晶固体是由分子组成, 而不是由元素组成。标准吉布斯自由能是对应于组元而不是对应于元素的来定义的, 它是组元在某一状态下的吉布斯自由能与形成物种的元素在基态的焓值之差。假如一个相的物种是非元素的, 那么有必要在该相的不同组元之间引入一个相互作用参数, 正如下述模型所述(联合模型, 亚点阵模型, 离子液相模型, 准化学模型, Flory-Hussins 模型, SIT/PITZ/HKF 模型, ..., 等)。

### 11.3.5 亚点阵模型—化合物能量公式

如果原子之间的尺寸、电负性差别很大, 或所带电荷不同, 那么在形成晶体时, 它们倾向于占据晶格中不同的点阵位置。在某些情况下, 一个溶质原子可能占据正常晶格格点之间的间隙位置。假如一个相的每一个亚点阵都是一个单一的组元, 那么这个相就不存在混合熵。

含亚点阵的相, 其混合熵就是所有亚点阵中每一组元的理想混合熵与该组元在其亚点阵中的位置分数的乘积之和。如果相中每一亚点阵仅有一个成份, 那么不存在混合熵。

由于引入亚点阵, 热力学中许多传统的概念对于常规情况就变得复杂了。例如, 不可能写出相中的单一元素的部分吉布斯自由能的清楚的表达式。为了描述亚点阵相的热化学性质, 有必要引入组元序列(constituent array)的概念。组元序列是指组元在每一亚点阵中的排列。亚点阵相的吉布斯

自由能参考面由所有可能的组元序列的标准吉布斯自由能来计算。于是亚点阵相的相互作用参数能够象非亚点阵相的相互作用参数一样去表达。

想要得到 *Sublattice Model* 的综合描述, 或是更通用的 *Compound-Energy Model*, 请参考 Hillert (1998), Sundman and Ågren (1985).

### 11.3.6 离子液相模型, 用于具有有序趋势的液相

离子液相是指在某一特定的成分下, 具有非常低的混合熵的液体, 这是因为在这一成分下刚好出现了离子的中和反应。

根据 Temkin 建议, 离子液相的模型可以建立在这种假定基础上: 即阳离子只与阳离子进行相互混合, 阴离子也只跟阴离子相互混合。在数学上, 这就等同于前面已经描述过的固态晶体的亚点阵模型。对于液相而言, 其难度在于是阳离子和阴离子在亚点阵上的点阵数可能会随成分的改变而改变。

这个问题由 Hillert (1985) 已经做过详细讨论, GES 就提供了一个名为 两个-亚点阵的离子液相模型 的常规公式,

### 11.3.7 团聚模型

在某些情况下, 为了描述液相实验数据, 假定组元以分子形式存在。这种分子的存在期可能很短, 所以无法观察到这种分子的独立实体, 但是为了描述在特定成分附近的有序趋势, 我们引入了团聚这个概念。如果元素之间存在共价结合的趋势, 那么团聚的存在就是受支持的。

Thermo-Calc 软件包提供的 **团聚模型 (Associate Model)**, 把这类组元以分子形式存在的相做为“气态混合物”来处理, 如此一来就可以考虑分子之间的相互作用项。

### 11.3.8 准化学模型

目前, GES 模块提供三种不同的 准化学模型:

- ☞ *Quasichem-FACT00 Model* 是以蒙特利尔的 F\* A\* C\* T 研究小组的研究人员 Kongoli 等人提出的的准化学模型为基础发展而来的。这种模型类似于团聚模型, 但它的混合熵的方程非常特别的。
- ☞ *Quasichem-Irsid Model* 是以 IRSID 矿渣模型为基础的。



🌿 *Quasichem-Ionic Model* 是基于离子液相( QUAS\_IONIC 相), 它的熵可以用准化学模型来计算。但是到至今为此, 这个模型还没有应用于任何实际的材料系统。这种模型可能不会非常有效。

### 11.3.9 吉布斯自由能中的非化学贡献 (例如: 铁磁性)

在某些情况下, 有些重要的物理现象以一种特殊方式依赖于成分, 磁的有序性就是这样的例子。为了处理这种现象, 可以引入某种依赖相组元的数值, 这可以通过用参数乘以组元的成分分数来实现, 这种参数的处理方法与上述“化学”吉布斯自由能的参数的处理的方法是相同的。居里温度就是这种数值的一个例子。在特定成分下的居里温度值就被用于模型中去计算磁性有序化对吉布斯自由能的贡献。GES 系统就可以处理 Inden 磁性有序化(*Inden Magnetic Order*) 现象(Inden, 1976)。

正如将在 11.3.13 和 11.2.14 节提到的, 又一个非化学性质对吉布斯自由能的贡献的例子就是: 水溶液相中的假想静电效应。我们常常是用各种各样的玻恩函数(X, Y, Z,  $\omega$ , 等) 来描述静电特性, Debye-Hückel 限制定律 (Debye-Hückel Limiting Law), 离子溶液, 离子结合等对吉布斯自由能的贡献。

### 11.3.10 具有有序无序转变的相

有些相具有有序无序转变, 例如 fcc 结构(结构符号为 A1) 可以由于不同类型的原子占据了不同的亚点阵位置, 而转变为  $L1_2$  或  $L1_0$  相。在某些情况下, 把这种有序的超结构处理为完全不同的相会比较有利, 但是在有些情况下, 如 Fe-Al 中的 fcc 的 B2 有序结构, 由于这个转变在温度和成分坐标同是一个线性的二阶转变, 所以它们必须被描述为一个相。有序化能够用亚点阵描述很好的描述出来, 具有 fcc 结构的相必须用 4 个亚点阵去描述  $L1_2$  和  $L1_0$  这两个有序结构, 同时这些亚点阵必须包含所有的替代成份。另外, 或许还让一个亚点阵中含有空位。在某些情况下甚至可以描述空位的有序性, 例如在 M2C 碳化物中。就可以把这种相处理为带亚点阵的相。但是, 亚点阵描述不考虑短程有序。

如果有序相和无序相形成了一个两相区, 这个相就必须有两套或多套成分。这几套成分可在 GES 模块中创建或通过 POLY 模块中的命令 SPECIAL\_OPTIONS 在创建。

GES 系统支持一个化学有序相的参数分裂为两个不同的相描述的性质。这在当今的评估工作中变得非常流行。应用这种方法, 就可以让一个相中所有参数都是描述无序状态 (不依赖于结构的部分), 而另一个相中仅包含那些用于描述剩余部分 (依赖于结构的部分) 的参数。用这种处理方法使得, 当相是无序态时, 来自结构依赖部分的贡献将是零。在高元系统中, 有序相可以溶解许多对实际有序化并没有特殊贡献的元素, 上述方法在处理这种情况时就非常有用。在键入命令后, 吉布斯自由能系统就自动的将相的有序部分和无序部分合并在一起, 这个命令就是: :

```
AMEND_PHASE <ordered phase> DISORDERED_PART <disordered phase>
```

通常有必要在具有有序/无序转变的相中, 设置两组或多组成分, 但是用户经常忘记给有序和无序相设定各自的成分, 从而导致程序崩溃。现在当无序相须要单独考虑时, GES 模块中的命令 AMEND\_PHASE 或 POLY 模块命令 SPECIAL\_OPTION SET\_MISCIBILITY 能够自动的为无序相创建成分组。

### 11.3.11 CVM 方法: 用于化学有序/无序现象

针对化学有序/无序现象, GES 系统提供 CVM (cluster-variation-method) 方法去建立模型, 但是现在这种方法仅适用于二元系。(Sundman and Mohri, 1990)。参见 *Thermo-Calc Examples Book* 中和 TCEX\ 区(TCEX31.TCM)中的第 31 例。

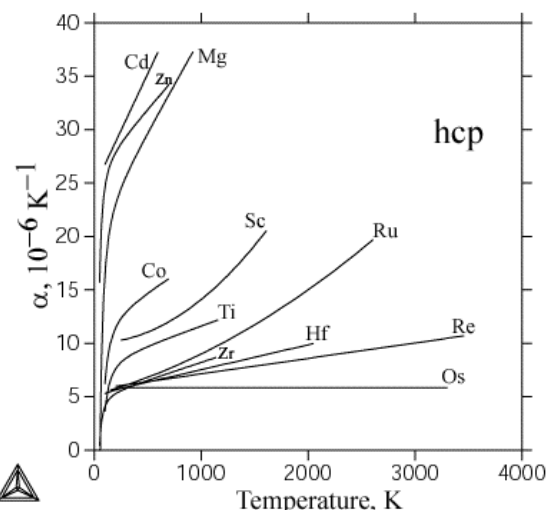
### 11.3.12 Birch-Murnaghan 模型: 用于 高-PT 贡献

在高压 (高温) 条件下, 金属, 矿物和其他类型材料的 EOS (状态方程) 可由 Murnaghan 或 Birch - Murnaghan 模型来处理, 来描述它们的  $P$ - $V$ - $T$  关系式及热力学性质 (Saxena 等人, 1992)。**Murnaghan 模型**适用于从 1 bar 到 20 GPa 的压力范围内, 化学计量相的吉布斯自由能可以间接的表示为温度和压力的函数。**Birch-Murnaghan 模型**可被用于一个更广的压力范围 (从 1 bar 到高于 20 GPa), 然而化学计量相的吉布斯自由能只能从 Helmholtz 自由能转变而来, 间接的表示为一个温度和压力的函数。在 GES 系统中, 通常把一个在高压下依赖于成分的固溶体相用 **Redlich-Kister 模型**或普通的化合物能量模型来处理。

### 11.3.13 广义 PVT 模型: 用于高-PT 贡献

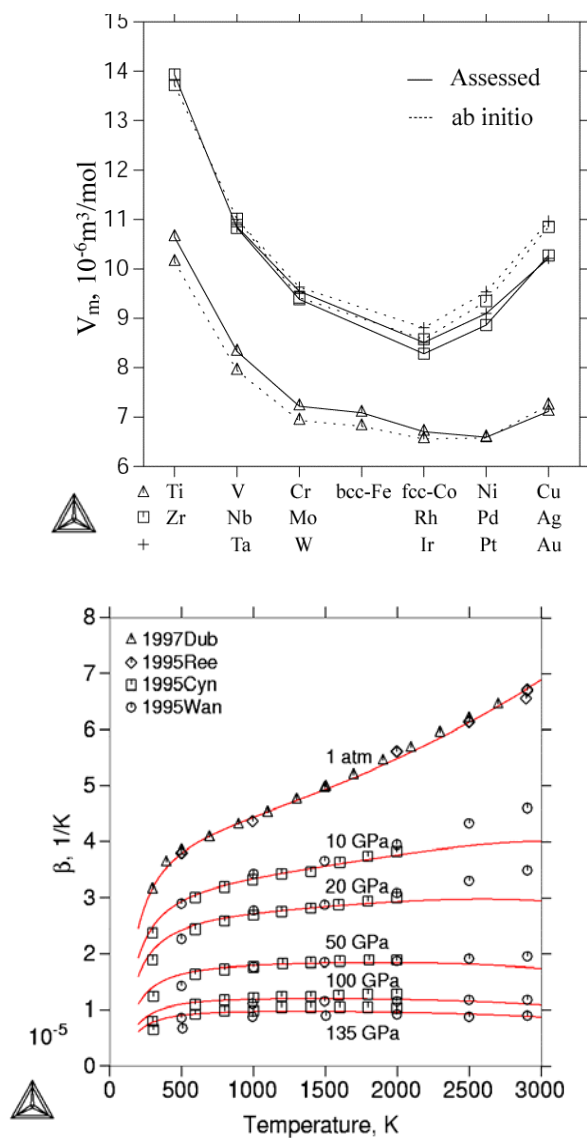
在以前的 Thermo-Calc 软件版本中(直到 TCCQ 和 TCW3), 有许多热力学模型用于表达合金和其他多种形式的固体/矿物(碳化物, 氮化物, 氢化物, 氧化物, 硫化物, 氢氧化物, 硼化物, 亚磷酸盐, 岩盐, 硅酸盐, 碳酸盐, 硫酸盐, 硝酸盐, 磷酸盐, 等)以及液相(溶体/矿渣), 水溶液和气态混合物的压力-体积-温度的 EOS (状态方程)。特别是对于合金和矿物质, Thermo-Calc 软件的 GES (Gibbs Energy System)提供了 Murnaghan 模型, Birch-Murnaghan 模型和修正的 Birch-Murnaghan 模型; 另外还附带了几个结合这些模型的, 含有评估数据的数据库 (如, 针对矿物质的 GCE2/PGEO 数据库, 然而针对合金的数据库还没有完善)。这些数据库可以提供物质的摩尔体积, 热膨胀, 体模量和可压缩性, 以及它们的温度和压力依赖的等数据。

在新的 Thermo-Calc 软件版本(TCCR/TCW4 及相应的程序界面), 将提供一种被称为**广义 PVT 模型 (GPVT)**的新模型, 并且还将发布一个应用这种模型的特殊数据库/数据集。这样使用者随时可以根据需要, 应用这个模



型计算体积和相关的热-物理性质 (以温度、压力和成分的方程)。

我们未来新的发展目标是: 1)建立一个包含多种组元: Al, B, C, Co, Cr, Cu, Fe, Mg, Mn, Mo, N, Nb, Ni, O, P, S, Si, Ti, V, W 等; 多种相结构: 如 fcc, bcc, hcp, 碳化物,氮化物,氧化物,液相等系统的摩尔体积和体模量数据库, 即, 包括  $V_m(T, P, X_i)$  和  $K(T, P, X_i)$  的数据库; 2)创建计算热物理性质的理论方法,特别是计算亚稳相热物理性质的理论方法; 3) 建立和提供一种的能够计算依赖于压力的吉布斯自由能的有效的新模型。



我们将应用了三种综合的方法去实现这些新目标, 这三个方法是: a) 应用 Thermo-Calc 软件中的 PARROT 模块, 采用 CALPHAD-方法, 依据所获得的各种各样的实验数据严格评估热力学数据; b)利用第一原理计算, 加上 Debye-Grüneisen 模型做一些必要的计算; c) 根据物理学基础原理, 建立热量的状态方程(EOS) 。利用这种方法, 并通过采用新的模型, 现在已经开发了一些应用于钢铁和许多其他类型合金以及他们的液相的高质量的数据库/ 数据集合, 这些数据库将在下个春季的 TCC/TCW 的新版本中公布, 它们还可以联合老数据库, 如: TCFE3 钢/Fe-合金 数据库或者 SSOL2/SSOL4 合金溶体数据库等, 一起使用。

已证明的成功应用包括:高压相图, 随温度改变的膨胀曲线, 等温分解的膨胀分析, 晶格畸变, 等等。

### 11.3.14 理想气态模型 vs. 非理想 气态/气态混合物模型

在低压(和低温)下, 理想气体模型可以近似的被处理为一个纯气相或气态混合物相。这暗示着纯气态物质的  $P$ - $V$ - $T$  关系式和热力学性质的计算, 能够采取类似于理想气体一样的计算方法, 并且气态物质在混合时, 相互之间具有相互作用。在许多当前所使用的物质和溶体数据库(例如 SSUB, TCMP, TCES, TCFE, 等)中, 就是以这种方法来处理气态混合物相 (GAS)。

然而, 在高温高压条件下, 纯气态物质和实际气态混合物的状态方程 (EOS) 是不同于理想气体的行为的。因此纯气态物质或气态混合物相的  $P$ - $V$ - $T$  关系式和热力学性质必须用非理想气体和气态混合物模型来加以描述。模型在近邻界和超临界温度-压力条件下是可靠的。现在有许多综合的模型, 它们被广泛的应用于物理化学, 化学工程, 地球化学/地球物理学等领域。

**SUPERFLUID 模型** (Belenoshko, Shi and Saxena, 1992), 是应用于 **SUPERFLUID 程序** 的编码。(出版于 *计算机与地球科学*, 18(1992):1267-1269), 它将由下一 TCC 版本中被提供。这种模型的提出是为了研究 C-H-O-S-N-Ar 气态/液态混合物(具有 13 种物质 H<sub>2</sub>O-CO<sub>2</sub>-CO-CH<sub>4</sub>-O<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>-S<sub>2</sub>-SO<sub>2</sub>-COS-H<sub>2</sub>S-N<sub>2</sub>-NH<sub>3</sub>-Ar)在亚/超临界条件下的  $P$ - $V$ - $T$  关系式和热力学性质。把它与非理想模型结合, 就可以在非常广的温度-压力-成分范围内, 研究各种各样的纯气态物质[Johnson and Norton, 1991; Shi and Saxena, 1992; Belonoshko and Saxena, 1991, 1992; Saxena and Fei, 1987, 1988; Saul and Wanger, 1987, 1989; Haar 等人, 1984; Levelt Senger 等人, 1983; Jacobs and Kerrick, 1981; Kerrick and Jacobs, 1981; among others] 和气态混合物[Shi and Saxena, 1992; Belonoshko and Saxena, 1992; Saxena and Fei, 1988]的  $P$ - $V$ - $T$  关系式和热力学性质。SUPERFLUID 程序本身也可以在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME, PC Linux 及多种 UNIX 工作平台下独立运行。

在下一个 TCC 的版本中, 将给气态混合物相 (GAS) 提供的 SUPERFLUID 模型, 这将有助于研究非理想气/液混合物, 金属/合金/矿渣, 矿物, 水溶液, 等物质之间的复杂的异类物质的相互作用。

### 11.3.15 DHLL 和 SIT 模型: 用于稀释水溶液

在稀释水溶液中, 溶剂(H<sub>2</sub>O)和溶质物质的活度系数可由 **DHLL (Debye-Hückel Limiting Law) 模型**描述, 这种模型忽略离子溶剂化的影响, 只采用一些简单因式来描述静电贡献 (Atkins, 1982)。随着水溶液浓度的增加, 就要使用 SIT (**Specific Ionic Interaction Theory-特殊离子相互作用理论**)模型, 这种模型考虑到一些简单的二元, 三元和高元有序离子的相互作用项。(Ciavatta, 1990)。

在两种情况下, 溶剂 H<sub>2</sub>O (和溶质物质) 的  $P$ - $V$ - $T$  关系式和标准热力学性质可用一些简单的模型计算; 但是, 也可以用更成熟的模型, 例如用 Johnson-Norton 模型来处理 H<sub>2</sub>O 这种模型 编码于

SUPCRT92 程序(Johnson 等人, 1991) 和 SUPERFLUID 程序(Belenoshko 等人, 1992; 见 11.3.13).

### 11.3.16 HKF 和 PITZ 模型: 适用于浓缩水溶液

在提高的温度和压力,而且在较高的浓度条件下,溶剂( $\text{H}_2\text{O}$ )和溶质物质的活度系数应该用 **HKF (Complete Revised Helgeson-Kirkham-Flowers) 模型**描述,这种模型利用最全面的方法去研究静电贡献,离子溶剂化的影响和离子的相互作用(二元,三元及更高元)。实验已经验证,对于某些极高浓度的特殊的水溶液体系, **PITZ (Generalized Pitzer's Formalism) 模型**应该还是适用的。

TCC-P 版本中,为水溶液提供的完全 HKF 模型将包括两个远离非理想的部分。第一部分是  $P$ - $V$ - $T$  关系式和溶剂  $\text{H}_2\text{O}$  和溶质物质的标准热力学特性,这里是用 Johnson-Norton 模型计算  $\text{H}_2\text{O}$  (Johnson and Norton, 1991),用 Revise- Helgeson-Kirkham-Flowers 模型计算水溶质 (Helgeson and Kirkham, 1976; Helgeson *et al.*, 1981; Shock and Helgeson, 1988, 1990; Shock 等人, 1989; Shi 等人, 1993), 这些模型编码在 **SUPCRT92 程序** (Johnson 程序, 1992) 和 **SUPERFLUID 程序** (Belenoshko 等人, 1992; 见 11.3.13)里。第二部分是水溶液相中阳离子,阴离子和联合体的非理想混合性质,由完全 Revise- Helgeson-Kirkham-Flowers 模型计算 (Helgeson 等人, 1981; Shi 等人, 1993), 编码在 **AQSMIX 程序**中(Shi and Saxena, 1994)。在 TCC-P 版本中,还系统的计算了  $\text{H}_2\text{O}$  溶剂和溶质物质在标准和混合状态下的玻恩函数的贡献。完全 Revised-HKF 模型可以有效的、可靠的应用于复杂的水溶液相,从室温、室压到  $1000^\circ\text{C}$  和 5 kbar 等条件下计算。

结合完全 HKF 模型,用户可以利用 **AQS Aqueous Solution Database 水溶液数据库**,在一个很宽的温度-压力-成分范围内,去研究各种异类物质相互作用的体系,包括水溶液,气/液混合物,金属/合金/矿渣,矿物质(氧化物/氢氧化物/硅酸盐/碳酸盐/硫化物/硫酸盐/氮化物/硝酸盐/岩盐)等。

这个通用 PITZ 模型(Pitzer, 1973, 1987, 1991; Pitzer 等人, 1984; Spencer 等人, 1990; Sterner 等人, 1992) 将在不久的将来涵盖在 Thermo-Calc 软件包中。

### 11.3.17 通用的两态模型

新模型 G2SLA (**Generalized Two-State Model for Liquid Amorphous Phases 通用的液态非晶相两态模型**) 提供了一种能够更平稳、更合理的描述液态非晶相的热力学性质的标准方法。在 Thermo-Calc 下一版本中,用户可以输入源自这种模型的特殊参数,并因此可以很容易的将两态激发对吉布斯自由能的贡献与其他物理效应(如磁性化)对吉布斯自由能的贡献结合起来。

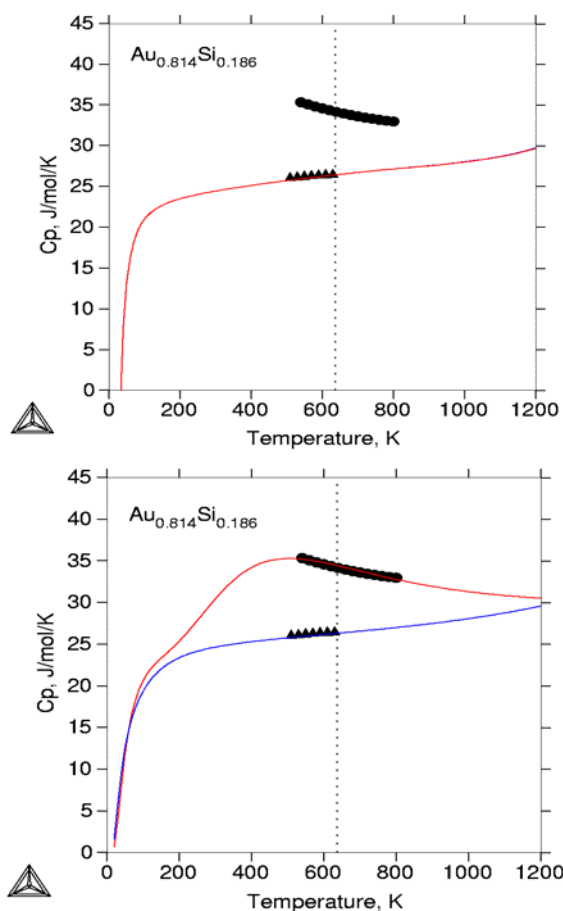
通用两态模型的本质是假设:液态非晶相中的原子既可以处于非晶态,又可以处于类液态,并且这些原子从非晶态激发到类液态时,会引起液态非晶相的总吉布斯自由能的改变。

**Example: Au-Si**

比较 Au-Si 系的共晶液态非晶相和固态混合物的热容的实验值和计算值：(a) 应用新的两态模型的结果。(b) 用 SSOL 数据库计算的结果，用这两种模型计算出来的液态和固态的热容都相同。虚线表示合金的熔解。

这种模型的优点：

- ✎ 非常普遍。参数易于拟合
- ✎ 在熔点以下液相热熔的外推是合理的。
- ✎ 精确估计非晶相结晶化的焓。
- ✎ 为非晶态向晶态转变的动力学模拟提供精确的热力学数据。



### 11.3.18 Flory-Huggins 模型: 适用于聚合物

这是一个适用于液相聚合物的模型，聚合物的成份区别仅在于尺寸大小并且仅位于一组点阵当中。首先,新的成分变量如下所示：

$$\Phi_i = \frac{v_i y_i}{\sum_j v_j y_j}$$

其中  $v_i$  与成份尺寸有关。它是一个独立于成分，温度和压力的常量。对于每种成分,  $v_i$  的值用 GES 命令设定如下



```
ENTER_PARAMETER PLYV(POLYMER, I) 298.15 vi; 6000 N
```

根据标准语法, 必需输入最高和最低温度, 但是除了常量 `vi` 不可以给出任何其它的值。`PLYV` 是  $v_i$  参数的特殊标志符。

这种模型的吉布斯自由能是:

$$G_m = \sum_i y_i G_i^o + RT \sum_i y_i \ln\left(\frac{\Phi_i}{y_i}\right) + G_m^E$$

$$G_m^E = \sum_i \sum_{j>i} \Phi_i \Phi_j \left(y_i + \frac{v_j}{v_i} y_j\right) \cdot L_{ij}$$

参数  $L_{ij}$  是 GES 的过剩参数, 与 Flory-Huggins 模型的标准  $x_{ij}$  参数有关, 定义为注意  $j$  是第二个(按字母顺序的)组元。

$$L_{ij} = RT v_j X_{ij}$$

## 11.4 热力学参数

从前述讨论来看, 相的热力学参数是温度和压力的函数, 把这些参数乘以各种相组元的分数, 然后再把这些值加入吉布斯自由能。参数代表的是特定的相和这个相组元的集合; 这些要参数乘以其所代表的相组元的分数。在某些情况下, 相互作用参数的依赖于成分(见 11.3.3 规则溶液模型), 各种各样 依赖于成分的项是由指数来表示的。指标值的意义是依赖于模型的。

有许多其他依赖于成分的量(如, 磁性有序化的临界温度), 它们也可以表达为参数乘以分数的方程。另外有一些量可能是信赖于温度, 压力和成分的复杂函数(如, 假想静电效应的玻恩函数)。

这种磁性或静电贡献参数用特殊标识符表示, 以区别于那些表示“化学”吉布斯自由能的标识符。

- 对于“化学”参数, 标识符为 `G` (标准吉布斯自由能) 或 `L` (过剩吉布斯自由能相互作用参数)。
- 对于磁性贡献, 需要两个依赖于成份的量, 它们的标识符为:
  - `TC` 磁性有序化的临界转变温度,
  - `BM` (或 `BMAGN`) 波尔磁子数。
- 对于水溶液中的静电贡献(使用完全修正 HKF 模型)、溶剂( $H_2O$ )的玻恩函数 (`X`, `Y`, `Z`,  $\omega$ , 等) 是以数据块的形式储存在 GES 模块的可操作的子程序中, 而溶质物质的玻恩函数  $\omega_{Pr,Tr}$  存储在常规的 GES5 工作空间中, 用标识符 `BM` 表示。(注意: 这个标识符与波尔磁子数的标识符相同, 它只是暂时性的在 P 版本中应用, 在未来的新版本中将改为 `WB`)。



参数的总体形式为:

<标识符>(<相>, <组元排列>; <数字>) <xxx> <表达式> <yyy> <关键词 Y or N> <zzz> !

其中:

标识符 给出的是参数类型;

相 给出相名称;

组元排列 相特定的组元排列;

数字 表示自由度 (仅用于相互作用, 临界温度和波尔磁子数; 如果该值为零, 可以省略不写);

表达式 描述参数的数学式;

xxx 和 yyy 为相应的参数表达式最高和最低温度限;

关键词 Y 或 N 表示表达式是否写完是否要继续;

zzz 用于评估的参数的参考数;

符号 “!” 是表示当前的参数定义已经完成。

注意, 数量 H (焓), S (熵), V (体积), F (Helmholtz 自由能) 等, 如果必要可以由总吉布斯自由能计算得来, 但是它们不能以直接的表达式来存储。

参数总是与特定的相相关联。必须提供这个相的名称。名称可以简写。

参数是由相组元决定的, 参数要乘以相应组元的分数。组元的名称可以简写。注意必须是写组元的**名称**, 而不是化学式。如果相的每一亚点阵只有一个组元, 可以省略不写。

对于具有几个亚点阵的相来说, 程序要求 每个亚点阵需要至少一种组元。过剩参数, *e.g.*, 规则参数或三元参数, 在同一亚点阵中被乘以两个或更多个组元的成份分数。这些附加组元必须作为相互作用组元来给定。注意具有亚点阵的相, 它的 每个亚点阵中可能都有相互作用组元。

用于描述过剩量的参数必须由两种或多种发生相互作用的组元。选择哪种组元作为主要成分, 哪种成份作为相互作用成份, 这种选择是任意的。但是当参数写有提示语时, 程序通常把组元(每一亚点阵中) 以字母顺序归类。这种顺序对于依赖于标记顺序的参数的来说是很重要。

对于每一个参数, 在参数名后面, 必须给出数学表达式。有时, 一个表达式可用于多个参数(例如元素的参考能)。在这种情况下, 推荐使用函数符号来表示一系列方程, 当这个符号被用于定义参数时, 符号所代表的方程就被调用了。

各种各样的参数名称的举例:

```
G(GAS,AL1CL2H1O1) 298.15 F243T#+R*T*LN(1E-5*P); 6000 N 151!
G(CD_L,CD) 298.15 F5462T#+6192.3-10.42123864*T; 6000 N 2609!
G(QUARTZ_S2,O2SI1) 298.15 F13149T#+732.2-.8644628099*T; 6000 N 5934!
```

## Thermo-Calc 用户指导书

```

G(M23C6,V:MN:C) 298.15 0.869565*GVM23C6#+0.130435*GMNM23C6#; 6000 N
 275!
G(BCC_A2,SI:C) 298.15 +322050-75.667*T+GSIBCC#+3*GHSERCC#
 +3*GPCGRA#; 6000 N 98!
G(LIQUID,CA) 298.15 +5844.846+62.4838*T-16.3138*T*LN(T)
 -.01110455*T**2-133574*T**(-1); 500 Y
 +7838.856+18.2979*T-8.9874787*T*LN(T)-.02266537*T**2
 +3.338303E-06*T**3-230193*T**(-1); 1115 Y
 -2654.938 +188.9223*T-35*T*LN(T); 3000 N 283!
G(AQUEOUS,FE+3) 298.15 -48534.4+315.892*T+ZAD; 350 N 1!

L(FCC_A1,CR,NI:VA;0) 298.15 +8030-12.8801*T; 6000 N 322!
L(FCC_A1,FE,MO,NI:VA;0) 298.15 -204791+163.93*T; 6000 N 132!
L(FCC_A1,FE,MO,NI:VA;1) 298.15 11555-55.81*T; 6000 N 132!
L(FCC_A1,FE,MO,NI:VA;2) 298.15 77975; 6000 N 132!
L(M23C6,CR,FE:CR:C;0) 298.15 -205342+141.6667*T; 6000 N 322!
L(M23C6,CR,FE,NI:FE:C;0) 298.15 -460000; 6000 N 322!
L(M23C6,FE,MN:CR,MN:C;0) 298.15 -100000; 6000 N 326!
L(LIQUID,CR,FE;0) 298.15 -14550+6.65*T; 6000 N 107!
L(LIQUID,CR,FE,NI;0) 298.15 14510; 6000 N 322!
L(LIQUID,CR,FE,NI;1) 298.15 11977; 6000 N 322!
L(LIQUID,CR,FE,NI;2) 298.15 5147; 6000 N 322!
L(AQUEOUS,AL+3,CL-1;0) 298.15 -0.481; 1273.15 N 1!
L(AQUEOUS,CUCL2,NA+1,CLO4-1;0) 298.15 +0.27; 1273.15 N 5!

TC(CO_S2,CO) 298.15 1396; 1768 Y 1E-05; 6000 N ,!
TC(FCC_A1,FE:VA) 298.15 -201.00; 6000 N 281!
TC(BCC_A2,CR,MN:VA;0) 298.15 -1325; 6000 N 326!
TC(BCC_A2,CR,MN:VA;2) 298.15 -1133; 6000 N 326!
TC(BCC_A2,CR,MN:VA;4) 298.15 -10294; 6000 N 326!
TC(BCC_A2,CR,MN:VA;6) 298.15 26706; 6000 N 326!
TC(BCC_A2,CR,MN:VA;8) 298.15 -28117; 6000 N 326!

BMAGN(CO_S2,CO) 298.15 1.35; 1768 Y 1E-05; 6000 N ,!
BMAGN(FCC_A1,FE:VA) 298.15 -2.10; 6000 N 281!
BMAGN(BCC_A2,CR,FE:N;0) 298.15 -.85; 6000 N 126!
BMAGN(BCC_A2,CR,MN:VA;0) 298.15 .48643; 6000 N 326!
BMAGN(BCC_A2,CR,MN:VA;2) 298.15 -.72035; 6000 N 326!
BMAGN(BCC_A2,CR,MN:VA;4) 298.15 -1.93265; 6000 N 326!

BM(AQUEOUS,FE+3) 298.15 Z0127PW0#; 1600 N 0127 !
BM(AQUEOUS,U3O6C6O18-6) 298.15 Z0270PW0#; 1600 N 0270 !

```

GES 命令 LIST\_SYMBOL 可以列出现在在 GES5 工作空间已经被定义的所有或任意指定的标志符 (数字常量,数字变量,方程或表), 且 LIST\_PARAMETER 命令可列出一个具体相的各种各样的参数(从不加密数据库中获得)。

除了从数据库中调用已经定义的参数, 用户还可利用 GES 命令 ENTER\_PARAMETER 或 ENTER\_SYMBOL 来定义其它用户所需要的参数。另外, 任何已定义的参数可以利用 GES 命令 AMEND\_PARAMETER 或 AMEND\_SYMBOL 来修改。

## 11.5 数据结构

在 GES 系统中可以将前几章讲的所有模型组合在一起, 因此一个相可具有亚点阵、团聚、相互作用参数、磁性贡献等等。在 GES5 工作空间中, 每一相都被独立的对待。

GES 中和各种各样的模型, 要求数据存储方式必须比 FORTRAN 提供的静态数据排列方法要高级。现代计算机最通用的数据结构语言是 LISP 和 Pascal, 它们的数据存储方式是“列表”式的。这些语言都具自我创建语言的优势。在 FORTRAN 中, 有必要为这种数据结构类型写一个子程序包。在 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件中都是开发了通用的软件包。在链状结构中, 实际数据是以散乱记录存储于计算机的存储器中。通常把存储器中的这种部分称为一个堆。记录只能通过指针调用, 记录里面可以包含去下一个记录的指针。这种非常灵活的, 通用的列表结构是可以建立的。列表数据结构的缺点是: 对于一个简单问题, 它的计算时间可能要比专门处理该类问题的程序所用的时间要长一些。

在 GES 系统, 工作空间路径用于创建一个链状结构, 这种数据结构自身就定义了吉布斯自由能表达式。这种数据结构可用于计算总吉布斯自由能和任一偏微分解析值。

### 11.5.1 相的组元

相中每一亚点阵有一列表, 它存储了亚点阵的组元集和它们的成分。

亚点阵用来描述相随机混合的偏离程度, 如, 当间隙原子或组元具有不同的尺寸或电负性时, 它们会倾向于占据相中不同的结构点阵。

对于相成份和相参数中的化学计量相或溶体相的组元列, 不同的亚点阵由“:”分隔, 在一个具体的亚点阵中不同组元由“,”分隔。其它详情, 请参见, 本章中的 11.4 和 Thermo-Calc 数据库说明书中第 3 章(数据库模块(TDB)–管理员说明)

### 11.5.2 吉布斯自由能参考面

每个相的标准吉布斯自由能参数都有一个针对于该相定义的参考面。这些标准吉布斯自由能参数以线性列表的方式存储，线性列表从相记录开始的。这个列表中的每一个记录，都有一个指向组元记录的指针，这个组元记录里存储的是组元分数，这些组元分数值将乘以相应的参数值。这些标准吉布斯自由能参数值都是 TP-函数，存储在其他列表中。

### 11.5.3 过剩吉布斯能

用于描述过剩吉布斯能的参数存储在树形数据结构 *tree structure* 中，该树形数据结构的根部来自于标准吉布斯自由能的记录。在这个树形数据结构的每一层中，是一系列参数，这些参数都将乘以相同的分数值。下一层，这些参数将再多乘以另一个分数。值为零的或者不确定的过剩参数将会被树状结构忽略掉。如此一来，就可以节省计算时间，因为多组元相的可能参数的个数比实际参数个数大得多。

### 11.5.4 个人文件存储

在 GES 系统中所有存储在计算机存储器中的热化学数据，可以写在一个无格式的文件上（该文件的默认扩展名是“GES5”）。以这种方式书写的文件可以重复进入程序中去。如果没有数据库与应用程序相连，对于在各种不同的热化学软件之间相互调用、相互转换的热化学数据，这种文件存储方式是唯一可能的存储形式。注意具有扩展名“GES5”的无格式文件不能用于在不同电脑之间转换数据。这些文件的内容也不能打印。

这种以 \*.GES5 方式存储的文件，在 PC Windows NT/2000/XP, Windows 95/98/ME, PC Linux 以及多种 UNIX 工作平台上具有相同的格式，并且它们对于运行多种 Thermo-Calc 应用程序界面 (e.g., TQ, TCAPI and/or TC-Toolbox in MATLAB)而言至关重要。

在已定义系统上的部分存储信息和重新获得的热力学数据可以以简单文本的形式写在格式化文件上(即默认扩展名为“DAT”或“TDB”的文件)。这种文件可以在 Thermal-Cal 软件之外，使用文本编辑器打开和编辑。

**注意对于 TCC- P 版本之后的加密数据库，定义系统或定义系统中某个特定相的任何热力学数据，都不能利用这个命令在屏幕上或在 \*.DAT / \*.TDB 文件中列出。**

### 11.5.5 加密和不加密数据库

自 TCCP (还有 TCW2.1 和 DICTRA22)以来，为了防止非法拷贝，所有商业数据库都采用了加密的形式，然而对于所有免费数据库依然使用不加密形式。这种加密数据库只能再拥有数据库特定密码的情况下才能使用。数据库特定密码只能从 TCS 或其代理商处获得。

在 TCCP/TCW2/DICTRA22 版本中的这种数据库加密方式, 在同时使用不同类型数据库时, 会产生许多问题。TCCQ/TCW/DICTRA23 之后的版本, 为了避免这些不便之处作了许多努力, 现在已经可以使加密数据库相互联合或者与公共数据库联合。

一个加密的数据库总是由带有扩展名 \*.TDC 的二元数据文件组成 (二元数据文件是服务于 Thermo-Calc 热力学数据库和 DICTRA 迁移率数据库的), 一个不加密数据库可以包含多种类型的具有不同扩展名 (*e.g.*, \*.TDB, \*.DAT, \*.REF, *etc.*) 的文本数据文件(不分块的, 分块的, 或分类的)。

一个 \*.TDC 数据文件不能被任何编辑器编辑或者查看, 并且它只能用相应的数据库密码文件开启, 在 TCC/TCW/DICTRA 软件及 TQ/TCAPI 程序和 TC MATLAB Toolbox 中使用。数据库密码文件是由 TCS 特别制造的, 提供给终端用户的, 针对某一特定的电脑/服务器的独一无二的分辨码。

分块的或分类的数据文件(*e.g.*, \*.TDB, \*.DAT, \*.REF, *etc.*) 可以通过简单的文本编辑器查看, 但是由于文件的限制结构, 用户不能对其编辑(否则, 它将不能再被 TCC/TCW/DICTRA 软件使用)。不分块数据文件可以利用一个普通的文本编辑器, 谨慎的编辑和查看。用户-指定数据库通常书写为不分块数据文件。

以前的数据库文件偶尔会对 CPU 有依赖, 这意味着因为数据结构不同, 文件对 UNIX/Linux 系统与 PC Windows OS 不能同时兼容。TCCP, TCW2.1 和 DICTRA22 之后的版本, 提供了自动转换数据库文件标准路径, 使得从两种系统中读取数据库文件成为可能。当这种转换是必要的, 路径将给出提示信息。

在 TDB 模块, 从加密数据库中提取热力学数据, 或者在 GES 工作空间把数据存储到加密数据库中, 其方式与针对于非加密数据库的工作方式一样。但是为任意定义的系统或者该系统中的任意相, 从加密商业数据库中提取的热力学参数和相关方程(除了两个 SGTE-所有数据库, 即 SSUB3 和 SSOL2/SSOL4), 将无法在屏幕上或 GES 模块的文本文件(\*.TDB or \*.DAT)中显示或者列出来, 然而相组元的定义可利用适当的 GES 命令 LIST\_CONSTITUENT 或者 TDB 命令: LIST\_SYSTEM CONSTITUENT 显示出来。但是, 对于特殊请求, 可以接受并安装一个商业 Thermo-Calc 或 DICTRA 数据库的简单-文本版本 (*i.e.*, 无数据加密), 在必要的条件下 用户和 TCS 要签订一个 “TCS 数据库使用许可协议” 双边协议; 如果你对这项服务感兴趣, 请联系 [info@thermocalc.se](mailto:info@thermocalc.se) 获取相关的详细信息。

## 11.6 GES 系统的应用程序

GES 系统是一个子程序包, 虽然可以用它直接进行热化学性质的列表, 但通常使用 GES 的方式是与一个应用程序相结合, 如 POLY 模块和 DICTRA 软件, 它们需要这些热化学性质进行各种计算。这种热力学计算包括化学反应计算, 平衡计算, 及扩散-控制相变驱动力的计算等。

通常, GES 系统与热力学参数的数据库相连, 这些含有热力学参数的数据库是在进行各种计算所需要的。然而, 用户也可以在 GES 模块中交互的输入数据, 而且还可以通过文件存储和提取这些数据。

现在用于 Thermo-Calc 软件的 GES 系统, 与 TDB 模块(用于存储热化学数据库), POLY 模块 (多相平衡的计算), TAB 模块(热力学性质列表), 及 PARROT 模块(用于优化实验数据)等模块内在相连。GES 也与 DICTRA 软件相连。

应用程序的另一层是供用户书写的、能应用于 Thermo-Calc 应用程序界面, TQ, TCAPI 或 MATLAB 软件中的 TC-Toolbox 的书写程序。在这种环境下, 用户首先要在 TDB 模块中提取所有必要的热化学数据, 并在 Thermo-Calc 软件的 GES 模块中为一个特别定义的系统创建一个 \*.GES 文件, 然后在热力学计算和动力学模拟应用程序中打开文件。

## 11.7 用户界面

GES 模块的命令结构承袭自 SINTRAN, SINTRAN 是挪威 NORD 电脑家庭的操作系统。如同 Thermo-Calc 和 DICTRA 中其它模块一样, GES 中的命令通常是一个完整的句子, 单词之间由连字符“-”或下划线“\_”分隔, 连字符或下划线的作用是等同的。命令只要不引起混淆, 就可以尽可能的简写, 分隔符之间的单词也可以简写。命令的修饰部分如果不是必要的, 就可以完全去掉。

对于每一个命令, 程序通常需要一个或多个附加值, 如果用户在命令后敲<RETURN> (回车) 键, 程序将索要这些值。通常, 程序在两斜线之间给出一个缺省值作为答案, 如 /Y/ 或 /.50/, 如果用户认为此值适合, 只需再敲<RETURN> 键。

熟练的用户如果知道程序将要索要的值, 可以直接在命令后输入这些值。这些值在输入时, 必须有空格分开。如果针对某个提问, 用户要输入的就是缺省值, 此时可以直接键入一个逗号 “,” , 一个逗号对应一个缺省值。

每一个命令之后可能提问的问题, 同样有解释。通常, 当用户在线时, 通过键入一个“?”号就可以获得相同的解释信息。

一般有两个用于帮助的命令。但是, 最重要的帮助方式是在你遇到任何不理解的问题时, 键入一个“?”; 通常, 当你键入“?”后, 在线获得的信息与本说明书中给出的每个命令和提示语的说明是完全一样的。你将获得一个关于程序希望你给出一个怎样的输入的简单说明。在某些情况下, 如果用户想获得更多的解释说明还可以键入两个问号 “??”。

### 11.7.1 模块性和交互性

如上所述, GES 系统是一个子程序包,它在应用程序内部运作,如 Thermo-Calc 软件。通常,应用程序有许多模块组成,由一套标准命令集合在不同的模块之间转换。应用程序的每一个模块都有其特定的任务,因此为获得某种期望的结果,可能用到几个模块。

GES 模块准备接收输入时,其提示语为:

GES:

用户必须输入一个 GES 命令,在命令被执行后 GES 将再次给出它的提示语。

### 11.7.2 控制符的使用

在命令执行过程中,在屏幕上产生的输出,可以通过 CTRL-S 命令停止这个输出,然后以 CTRL-Q 命令继续这个输出。当用户在屏幕上获得在线帮助信息时,有时这个信息可能超出满屏,此时可用 CTRL-S 和 CTRL-Q 命令来读取输出信息。为了暂停程序的执行,可连续键入 CTRL-C 两次。

## 11.8 帮助(Help)和信息(Information)命令

一般有两个用于帮助的命令。然而,最重要的帮助方式是在你遇到任何不理解的问题时是敲一个问号:“?”;通常,你敲问号“?”后获得的在线信息,与本说明中给出的每个命令和提示语说明是完全一样的

。你将获得一个关于程序希望你给出一个怎样的输入的简单说明。在某些情况下,如果用户想获得更多的解释说明还可以键入两个问号“??”。

### 11.8.1 HELP

*说明:* 这个命令用于列出可用命令或给出一个具体命令的解释。

*语句 1:*           HELP <命令名称>

*语句 2:*           HELP

*后续提示语:*   COMMAND: <命令名称>

*Options:*       命令名称 -- 选一个要获得帮助的命令(属于 GES-模块)。

*Notes:*        不输入命令名称而直接敲<RETURN> 键将列出所有可用的 GES 命令。



输入一个具体的命令，屏幕上将显示出这个命令的解释(通常与本说明书中的原文相同)。

输入一个非唯一的缩写命令，将列出所有匹配命令。若要获得期望的命令信息，请输入唯一的缩写形式或给出完整命令。

## 11.8.2 INFORMATION

**说明:** 多种 GES 主题-- (概念和模型) 的基本信息可由这个命令获得, 这些信息在本章不同的部分都有描述。

**语句:** INFORMATION

**后续提示语:** WHICH SUBJECT /PURPOSE/: <主题名称>

指定一个需要获知其信息的主题(或者是它的独一无二的简写形式, , SPE, STA, STO, SUB, SUR, SYM, 等), 下列主题都是选用 GES 模块的重要主题 (敲一个问号 “?” 可以看到如下信息):

---

|                     |                           |                      |
|---------------------|---------------------------|----------------------|
| PURPOSE             | HELP                      | APPLICATION PROGRAMS |
| USER INTERFACE      | MODULARITY                | CONTROL CHARACTERS   |
| DATA STRUCTURE      | CONSTITUTION              | SURFACE OF REFERENCE |
| EXCESS GIBBS ENERGY | STORED PRIVATE FILES      | ENCRYPTED DATABASES  |
| THERMOCHEMISTRY     | DEFINING SOME TERMS       | UPPER AND LOWER      |
| CASE                |                           |                      |
| ELEMENTS            | SPECIES                   | PHASES               |
| FUNCTIONS           | SYMBOLS                   | PARAMETERS           |
| SUBLATTICES         | CONSTITUENT ARRAY         | MISCIBILITY GAPS     |
| MODELS              | STANDARDISED GIBBS ENERGY | IDEAL MODEL          |
| REGULAR MODEL       | USE OF CONSTITUENTS       | COMPOUND-ENERGY      |
| MODEL               |                           |                      |
| IONIC LIQUID MODEL  | ASSOCIATE MODEL           | QUASICHEMICAL MODEL  |
| NON-CHEMICAL TERMS  | FERROMAGNETISM            | BORN FUNCTIONS       |
| ORDER-DISORDER      | CVM APPROACH              | TWO-STATE MODEL      |
| MURNAGHAN MODEL     | BIRCH-MURNAGHAN MODEL     | GENERALIZED PVT      |
| MODEL               |                           |                      |
| AQUEOUS SOLUTIONS   | DHLL AND SIT MODELS       | HKF AND PITZ MODELS  |
| FLORY-HUGGINS MODEL | GAS EOS AND MIXING        |                      |

---

## 11.9 转换模块和结束程序命令

## 11.9.1 GOTO\_MODULE

*说明:* 这个命令用于转换模块，其后必须输入所要进入的模块，为了获得一系列可用模块，键入<RETURN>键 (见 5.4.11).

*语句 1:* GOTO\_MODULE <模块名称 >

*语句 2:* GOTO\_MODULE

*后续提示语:* MODULE NAME:  
NO SUCH MODULE, USE ANY OF THESE:  
SYSTEM\_UTILITIES  
GIBBS\_ENERGY\_SYSTEM  
TABULATION\_REACTION  
POLY\_3  
BINARY\_DIAGRAM\_EASY  
DATABASE\_RETRIEVAL  
REACTOR\_SIMULATOR\_3  
PARROT  
POTENTIAL\_DIAGRAM  
SCHEIL\_SIMULATION  
POURBAIX\_DIAGRAM  
TERNARY\_DIAGRAM  
MODULE NAME: <模块名称 >

*Options:* 模块名称—接下来要打开的模块名

## 11.9.2 BACK

*说明:* 这个命令是返回到上一模块。同见 GOTO\_MODULE.。

*语句:* BACK

## 11.9.3 EXIT

*说明:* 这个命令结束程序，并返回操作系统。除非执行 SAVE 命令 (无论是 GES, POLY 或 PARROT 模块)，否则所有数据和结果将丢失。

*语句:* EXIT

## 11.10 输入数据命令

通常，GES 模块与一个数据库联合使用，必要的数据库数据从数据库中获取。熟练的用户可以对一个已经定义的系统添加数据。GES 提供添加信息基本实体(元素、物种和相)的命令。还有用于输入辅助量，如标志符(symbols)的命令，这种命令可以用于输入热化学参数。

### 11.10.1 ENTER\_ELEMENT

**说明:** 用户可以用命令交互的指定他的系统。程序将从当前数据库或预先设定的数据库为给定的元素搜索所需的数据。数据库中给定元素的数据有:

- 摩尔质量 g/mol,
- 所选元素的参考态(SER) 名称，元素的参考态通常为该元素在 298.15 K 时的稳定态。
- 元素在 298.15 K 的 SER 参考态的与到 0K 的焓值之差。
- 元素在 298.15 K 的 SER 参考态时的绝对熵值。

两个预定义的元素，即电子和空位，具有相应的化学符号 /- 和 VA。起初，两者均处于暂停状态，但都可以由 ENTER\_ELEMENT 这个命令或 CHANGE\_STATUS 命令变为参与状态(见 11.12.6)。

如果涉及到水溶液相，用户必须在 GES 模块中，输入一个水溶电子：ZE。这是特殊的设计是为了适当的计算水溶液中的标准电动势。

**语句1:** ENTER\_ELEMENT <元素名称>

**语句2:** ENTER\_ELEMENT

**后续提示语:** ELEMENT NAME: <元素名称>

用户可以在一行中指定几个元素。元素名称是输它的化学符号。化学符号用空格分隔，假想的元素名称是合法的，但是数据库找不到他们相应的数据。

注意元素名称既可以写成第一个字母为大写，第二个字母(如果有) 为小写 (即, 小写模式)也可以全写成为大写或者小写 (i.e., 大写模式)。大小写模式由 REINITIATE 命令选择 (见 11.13.1)。注意 REINITIATE 命令将清除所有数据，因此必须在所有其他命令之前使用这个命令。

### 11.10.2 ENTER\_SPECIES

**说明:** 用户可以交互的输入物质，物质由已输入的元素构成。对于每一种物质，它的名称和化学式必须给出。注意所有元素将自动地输入，它们同时也被当作物质种类。相的组元必须是物质，但是单作为物质是没有相应的热化学数据的，除非是作为一个相的组元。

**语句1:** ENTER\_SPECIES <物质名称> <化学式>

**语句2:** ENTER\_SPECIES

**后续提示语:** SPECIES NAME: <物质名称>

用户必须为一个物质提供独一无二的名称。通常为它的化学式，但也可为一个字母开头，包含字母或者数字，圆括号“()”和下划线“\_”的任意一串字符组合。物质名结合/- 或/+ 符号以标识物质所带电荷的性质，这种写法也是合法的，例如：

NaCl<sub>2</sub>, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, FeO<sub>3/2</sub>, Fe<sub>10</sub>1.5, Ca.5Mg.5Si<sub>10</sub>3,  
Al<sub>1</sub>H<sub>10</sub>1\_Al(OH), Al<sub>1</sub>H<sub>10</sub>1\_Ha<sub>10</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O<sub>3</sub>\_124TRIOXOLANE,  
Na<sup>+</sup>, SiO<sub>4</sub>-4, H<sub>1</sub>/+1, H<sub>10</sub>1/-1, AGC<sub>2</sub>N<sub>2</sub>-1.

物质的名称被用于区分有相同化学式的同素异构体。例如：

C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, (CHCl)<sub>2</sub>-cis, (CHCl)<sub>2</sub>-trans, CH<sub>2</sub>-CCl<sub>2</sub>.

STOICHIOMETRY /物质的名称/: <化学式>

物质的化学计量式就是物质的化学式。已输入的物质名称为这个问题的缺省值，如，

化学式中的元素通常是以化学计量数分隔，化学式中不允许使用圆括号“()”和下划线“\_”，然而特殊符号/- 或/+ 可以结合使用的。

在大写模式中 (见 REINITIATE 命令)，只有在元素符号由两个字母组成的情况下，化学计量为一个单位时，这个数字才可以不写。在小写模式中，元素第一个字母必须大写，第二个小写，这种方式可以区分没有化学计量数的 CO (一氧化碳) 和 Co (钴)。

注意所有在物质中出现的元素必须在输入物质之前被输入。

## 11.10.3 ENTER\_PHASE

**说明:** 通常，在指定元素和物质种类之后，系统的数据才可以从已设定的数据库中取得。这个过程通过命令 GET\_DATA 在 TDB 数据库模块中自动完成。某种情况下，用户用这个命令交互的输入一个相。

语句: ENTER\_PHASE

后续提示语: NAME OF PHASE: <相名称>

相的名称是以字母开头的且仅由字母、数字或下划线组成的任意字符串。相名称必须是唯一的。

TYPE CODE: <类型代码>

如果相不是普通固溶体相，则必须指定相的类型代码。如果相是普通相只需敲<RETURN>键。

定义如下类型代码:

- G 气相。注意一个系统中可能只存在一个气相。
- A 水溶液相。
- L 液相(非水溶液或离子相)。
- Y 用特殊两个亚点阵表达的离子液相。
- I 具有带电物质的相(但并非 A, G 或 Y)。
- F 四个亚点阵的有序 fcc 相。相同的参数值将只须存储一次。

NUMBER OF SUBLATTICES /1/: <亚点阵数>

具有化学计量约束的相通常具有两个或多个亚点阵。每一亚点阵中一种或多种物质可以作为组元输入。亚点阵个数不得超过 10。没有亚点阵的相可以看作是具有一个亚点阵的相。

NUMBER OF SITES ON SUBLATTICE # /1/: <点阵数>

对于具有亚点阵的相，每一亚点阵中的点阵比率 (赠予 #) 必须给出。程序要求给出所有亚点阵的值 (通过对每一亚点阵的重复提问)，但是 这些值可能是提取公因数之后的值。如果可能推荐使用整数作为点阵数。对于没有亚点阵的相这个问题不会出现。

NAME OF CONSTITUENT: <组元名称>

对每一亚点阵用户必须至少给出一种物质作为组元。可以在同一行中由空格分开，连续的给出多种组元(或在重复的提示语后输入)。这个询问将被重复的提出直到用户键入<RETURN>键或者在语句后面加上了分号“;”，这就意味着组元列表是以符号“;”或者空行作为结束。

Will you add constituents later (你是否在以后再添加组元) /NO/:  
<Y 或 N>

对于这个提问，如果回答 Y(YES)，用户可以稍候为相添加其他组元，通过在命令 *e.g.* ENTER\_PARAMETER (见 11.10.5)中指定新的组元。缺省答案为 NO (或者敲 <RETURN>键)。

如果使用了不合法的组元，程序将在后面给出一个错误信息，*e.g.*，当参数被输入时。

Do you want a list of possible parameters (你是否需要一系列可能的参数) /NO/: <Y 或 N>

如果输入 Y(YES), 程序将给出这个输入相的直到第五阶的一系列所有可能的参数。若敲<RETURN>键 (NO), 这种参数列就不会被列出来。

#### 11.10.4 ENTER\_SYMBOL

*Description:* 通常, 一个标志符可以表达一个数量, 函数或者表格。当输入参数时可以使用已输入的标志符, 这使得热力学函数的处理变得容易。当几个热力学参数中都使用相同的函数或表格时, 标志符就变得非常有用。

标志符可以在 GES 模块中, 由本命令输入。在 GES 模块中输入的标志符也可以在 PARROT 模块(用于数据优化)中列出或使用。在 PARROT 模块中, 用户可以使用通过 GES-输入的标志符 (变量, 函数或参数) 来定义要优化的参数。GES 模块中输入的标志符与 POLY 和 POST 模块中定义的标志符是不相同的。

如果一个参数被定义了, 这个命令等同于 ENTER\_PARAMETER 命令 (见 11.10.5)。如果用户想要定义一个常量, 用户可以输入一个在所有温度范围都具有定值的简单方程。

*Synopsis:* ENTER\_SYMBOL

*Ensuing Prompt:* VARIABLE, FUNCTION, TABLE OR PARAMETER? /FUNCTION/: <关键词>

关键词可以为 VARIABLE (变量), FUNCTION (函数), TABLE (表格) 或 PARAMETER (参数)。

- 
- 函数是状态变量或其他函数的表达式。
  - 变量与函数相似, 因为它们也可以是状态变量的表达式。任何时候都可以输入一个带有新表达式的变量。
  - 表格是用来列出结果。一个表格由一系列任意数量的状态变量、函数或变量组成。
  - 参数标志符是特别用于为相参数赋值的 (相参数还可以通过命令 ENTER\_PARAMETER 来赋值), 通过此选项去定义特征标志符。注意如果相参数还没有被定义, 参数标志符的值将赋为零或赋一个值为零的标志符。用这种方法用户很容易用已定义的相参数去定义其它的相参数。

NAME: <标志符名称>

每一个标志符具有一个独一无二的名称，它必须以字母开头，最长有 8 个字符。

根据标志符的选定类型(变量, 函数, 表格或参数), 将会提出不同的问题, 如下所示。

- 如果标志符是变量 (variable)，必须给其赋值。:

VALUE: <变量数值>

对于一个变量, 在此给它赋值。注意只接受常数值不接受表达式。

- 如果标志符是函数 (function)，你将被要求输入最低温度限制, 表达式, 最高温度限制, 假如在最高温度还有其他表达式, 也要一一给出来:

Low temperature limit /298.15/: <最低温度, 单位 K>

对于一个函数, 给定一个最低温度限度后, 若在这个温度之下还有(第一个)表达式, 这个表达式是不被应用的。缺省最低温度为 298.15 K。函数的温度限制在计算过程中将被检验, 如果实际温度超出给定范围, 计算机将会给出指示。

如果最低温度限制给的是负值, 则是假定该函数存在压力断点, 负值被解释为最低压力限制。其他的限制值都将被看作是压力值。

Function: <定义函数式>

一个函数由 T、P 因式项组成。详细信息, 见 11.2.5 (温度和压力函数)。表达式的书写方式类似于 FORTRAN 语言的 表达式的书写方式, 可以使用运算符: +, -, \*, = 及 \*\* (\*\*只能是整数指数)。也可使用一元函数如 LOG, LOG10, EXP, SIN, COS 及 ERF。一个表达式可以分为几行来写。一个函数可以有几个温度范围, 每个范围对应一个不同的表达式。函数必须由分号“;”或空行来表示结束。一行不得超过 80 个字符。如果一行中写不下, 敲<RETURN> 键另起一行, 程序将用符号“&”提示: 希望给出后续表达式。

假如函数在不同的温度范围内具有多个表达式, 这个问题将被重复提出。

& <继续当前函数的定义>

符号“&”意味着: 如果函数不能在一行中写完, 那么用户可以在新的一行中继续写完函数。如果已经写完, 只要再敲一下<RETURN>键。

High temperature limit /6000/: <最高温度, 单位 K>



对一个函数, 要给出最高温度限制, 这个温度之上的当前表达式是无效的。

最高温度限制的默认值是 6000 K.

如果最低温度限制给的是负值, 它将被理解为给出的是最低压力限制值, 最高温度的限制自然的也被理解为当前表达式的最高压力限制值。

假如函数在不同的温度范围内具有多个表达式, 这个问题将被重复提出。

注意所有当前输入函数的温度范围**必须**为升序; 否则整个函数被认为是零。

如果依赖于温度的函数需要分为多个温度范围来描述, 那么当前表达式的最高温度限制就是下一个范围表达式的最低温度限制。计算过程中, 如果实际温度超出最高温度范围, 计算机将会给出指示。

Any more ranges (是否还有新的范围) /N/: <Y 或 N>

如果对这个提问的回答是 Y(YES), 程序将要求用户在前一个温度范围的最高温度限度之上和新给定的最高温度限制之下, 给出一个有效的新函数。最多温度范围的个数, 即最多表达式的数量是 10。

**重点注意:** 用户自己必须确保函数及其一阶导数在断点处是连续的。

- 如果标志符为表格 (table), 用户必须给定最高温度和最低温度限制, 温度步长以及指定温度相对应的值:

Low temperature limit /298.15/: <最低温度, 单位 K>  
表格的最低温度限制值。

High temperature limit /6000/: <最高温度, 单位 K>  
表格的最高温度限制值。

Step in temperature /100/: <温度步长>

在表格中不同值之间的温度步长。步长在整个表格中必须是固定的。如果一个表各不能用单一的步长所描述, 它必须根据不同的温度范围分成几个表格。最高和最低温度被收缩以给出合理的值, 必须给定最高和最低温度值所对应的表格值。

Table value at xxx /yy/: <表值>

在指定温度(yyy)的表格值必须被给出。缺省值(yy) 为最后值。

- 如果标志符为参数, 用户应输入相参数的正确名称 (包括标识符, 相名称, 组元和多种亚点阵 (如果存在) 有相互作用的组元, 以及参数的自由度。

PARAMETER: <参数名称>

输入一个正确的参数名称。如果一个参数的名称是不合格的或者用户仅仅按了<RETURN>键, 将出现如下警告:

\*\*\* ERROR, PLEASE RE-ENTER EACH PART SEPARATELY (错误, 请重新分别输入每一个参数)  
接着程序将进一步提示, 要求分别输入参数名的每一部分。

Identifier (/X/): <G 或 L, 或 TC, 或 BM>

从下列合法的标识符(G 或 L, 或 TC, 或 BM)中确定一个标识符。功能同 ENTER\_PARAMETER 命令中的一样。

Phase name (/ABCD/): <相名称>

定义相名称。功能同 ENTER\_PARAMETER 命令中的一样。

Constituent (in SUBLATTICE # /abc/): <物质名称>

定义组元名称。功能同 ENTER\_PARAMETER 命令中的一样。

INTERACTING CONSTITUENT (IN SUBLATTICE # /xyz/): <物质名称>

确定发生相互作用的组元名称; 如果没有相互作用的组元, 直接敲 <RETURN>键。功能同 ENTER\_PARAMETER 命令中的一样。

INTERACTING CONSTITUENT (IN SUBLATTICE # /xyz/): <物质名称>

如果组元之间的存在多于一个相互作用, 要给它们一一定义; 否则直接敲 <RETURN>键。该功能同 ENTER\_PARAMETER 命令中的一样。

Degree /#/ : <度 degree>

为相参数定义一个数字作为它的自由度。该功能同 ENTER\_PARAMETER 命令中的一样。

## 11.10.5 ENTER\_PARAMETER

说明:

用户可以通过这个命令为一个相参数交互地输入 TP-函数。 如果之前这个参数已经存在一个参数表达式, 这个参数表达式的将被删除。

输入的参数 TP-函数 可以由命令 AMEND\_PARAMETER 进行修改。(见 11.12.4).

参数名为(详细信息见 11.4):

<identifier>(<phase>,<constituent array>;<digit>)  
<标识符> (<相>,<组元列>;<数字>)

参数名举例:

|                    |                            |
|--------------------|----------------------------|
| G (GAS, C1O2)      | 一个气体 CO2 分子的吉布斯自由能的形成能。    |
| G (FCC, FE:VA)     | 具有空位的 fcc Fe 的 吉布斯自由能的形成能。 |
| L (LIQ, Fe, Cr; 0) | 液相 Fe 、Cr 的规则溶液参数。         |

|                     |                  |
|---------------------|------------------|
| L (LIQ, Fe, Cr; 1)  | 亚规则溶液参数。         |
| TC (BCC, Fe: Va)    | bcc Fe 的居里温度。    |
| BMAGN (BCC, Fe: Va) | bcc Fe 的波尔磁子数参数。 |

参数的名称由许多部分组成。首先是一个类型标识符。下列类型标识符是合法的: G (标准吉布斯自由能和相互作用参数)、L (相互作用参数), TC (居里温度), BM 或 BMAGN (波尔磁子数)。用户可以使用 L 作为相互作用参数; 输出时 L 总是作为相互作用参数。注意类型标识符 BM 也用于表示水溶物质的玻恩函数。

下面的新标识符是从 TCCN 版本开始启用的, 从 TCCRTCCN 版本之后应用更广泛:

|    |                                                               |
|----|---------------------------------------------------------------|
| V0 | 298.15 K , 1 bar 下的体积 (仅为数值),<br>$\int_{298.15} \alpha(T) dT$ |
| VA | 总的热膨胀性,                                                       |
| VB | 1 bar 时的体模量,                                                  |
| VC | 等温可压缩性,                                                       |
| VK | 高压匹配参数。                                                       |

标识符必须后面紧跟圆括号, 相名称,逗号和组元列。组元列后面可以跟一个分号和一个数字。 参数名由闭括号结束。

组元列由一系列组元名称组成。相互作用参数在同一亚点阵中具有两个或两个以上的组元时, 组元之间由逗号隔开。如果相是具有亚点阵的, 每个亚点阵中至少有一个确定的组元。在不同亚点阵中的组元必须以亚点阵顺序给出, 并且用冒号隔开。

在成份列后, 打一个分号, 分号后可输入一个分索引数字。数字从 0 到 9。分索引数字的意义取决于相所使用的过剩自由能的模型。如果没有输入分号和数字, 分索引数字将被认定为零。

用户可以使用星号, “\*”, 表示参数独立于特定亚点阵的组元。例如, L (L12, AL, NI: \*), 意味着相互作用参数是第一个亚点阵组元 AL 和 NI 之间的二元相互作用, 它独立于第二个亚点阵中的所有组元, 即第二个亚点阵成分与第一个亚点阵的相互作用参数无关。

当被要求输入参数名称时, 而你直接敲了<RETURN>键, 或者你输入了一个不合格的参数名称时, 你将被要求输入名称中的每一部份。

语句:

ENTER\_PARAMETER

后续提示语:

PARAMETER: <参数名>

输入一个正确的参数名称。如果一个参数的名称是不合格的或者用户仅仅按了<RETURN>键, 将出现如下警告:

\*\*\* ERROR, PLEASE RE-ENTER EACH PART SEPARATELY (错误, 请重新分别输入每一个参数)

接着程序将进一步提示, 要求分别输入参数名的每一部分。

Identifier (/X/): <G 或 L, 或 TC, 或 BM>

从下列合法的标识符(G 或 L, 或 TC, 或 BM)中确定一个标识符。

- G 或 L            能量参数(吉布斯形成自由能或相互作用参数),
- TC                磁有序温度参数,
- BM                波尔磁子数参数 (或水溶物质玻恩函数)

注意这些量如 H (焓), S (熵), V (体积), F (Helmholtz 自由能), *etc.*, 如果需要, 可以通过吉布斯自由能计算出来。

如果这个命令曾经被使用过, 前次输入的值就成为这个提示语的缺省值。如果接受这个缺省值只需敲<RETURN>, 否则再输入一个新的类型。

Phase name (/ABCD/): <相名称>

每个参数仅对一个具体的相有效。相的名称必须给出。名称可以缩写。

如果这个命令曾经被使用过, 前次输入的值就成为这个提示语的缺省值。如果接受这个缺省值只需敲<RETURN>, 否则再输入一个新的相名称。

Constituent (in SUBLATTICE # /abc/): <物质名称>

参数由组元区别, 组元的成分分数要与这个参数相乘。组元名称可以缩写。注意这里需要的是物质名称, 而不是化学计量分子式。

如果这个命令曾经使用过, 前次输入的值就成为这个提示语的缺省值。如果接受这个缺省值只需敲<RETURN>, 否则再输入一个新的物质名称。

对于具有许多亚点阵的相, 程序要求每一亚点阵要有一个组元。

过剩参数, *e.g.*, 规则参数或三元参数, 要乘以该相的同一亚点阵中的两个或多个组元的成分分数。这种额外的组元必须作为相互作用的组元给出 (如接下来的提示语)。注意具有亚点阵的相可以在每一亚点阵中都含有相互作用的组元。星号, “\*”, 用于表示参数独立于亚点阵成份。

INTERACTING CONSTITUENT (IN SUBLATTICE # /xyz/): <物质 species 名称>

用于描述过剩量的参数，必须具有两个或两个以上的组元，组元之间有相互作用。至于哪一种组元作为第一组元，哪一种组元作为相互作用组元是没有要求的。程序往往将这些按字母顺序将这些组元归类（每一亚点阵）。这个排序对于那些依赖于 顺序的参数而言是非常重要的。

如果这个命令曾经使用过，前次输入的值就成为这个提示语的缺省值。如果接受这个缺省值只需敲<RETURN>，否则再输入一个新的物质名称。

注意！删除相互作用组元的缺省值必须敲 NONE 或者其他组元的名称。

这个问题将被重复提出，直到某个相的一指定亚点阵中所有的有相关相互作用参数都被确定，最后还必须敲一个 <RETURN>键。

Degree /#/: <Degree>

degree 的意义是依赖于模型。对二元相互作用参数，这个 degree 通常是指 Redlich-Kister 表达式的指数。对三元相互作用参数，这个 degree 通常是指 Hillert 三元指数值。

如果命令用于为纯组元输入 G 参数这个提示语将不会出现。

这个提示语后,程序将在屏幕上回应相参数的完整定义。

Low temperature limit /298.15/: <最低温度，单位 K>

输入参数的函数的最低温度限制，作用同输入函数的一样。

Function: <定义方程>

一个由 T、P 因式组成的函数。作用同输入函数的一样。

& <继续定义当前函数>

继续定义（输入）方程。作用同输入方程的一样。

High temperature limit /6000/: <最高温度，单位 K>

输入参数方程的最高温度限制，如同输入函数时。

Any more ranges /N/: <Y 或 N>

还要添加另一个函数，就输入 Y(YES)；输入 N(NO)，则 结束这个命令。作用同输入方程的一样。

## 11.11 列出数据命令

### 11.11.1 LIST\_DATA

**说明:** 已输入系统的所有数据能够以可读形式写在指定输出文件中。如果没有指定输出文件，数据将显示在屏幕上。

输出数据由一系列元素及其数据，跟着是一系列相及与每一相相关的数据组成。每一相的热化学参数总是按国际单位制列出。

**注意对于TCC 版本P 以后的加密数据库,不能利用这个命令列出任何数据。**

**语句:** LIST\_DATA

**后续提示语:** OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/: <文件名>  
定义一个文件名，数据将以可读形式写在此文件中。缺省值是屏幕(直接敲<RETURN>键)。

OPTIONS?: <选择输出方式>

从下列选项中选择一个方式作为输出:

- N 以“用户”数据库形式输出。
- P 输出书写为 MACRO 文件以便将来的输入。这对于创建用于评估的\*SETUP 文件非常有用。
- S 标志符被禁止。
- R 列出参数的参考态(仅用于使用参考态的数据库)。
- L 适用于 LaTeX 预处理程序的输出。

### 11.11.2 LIST\_PHASE\_DATA

**说明:** 指定相的所有数据能够以可读形式写在屏幕上。相的热化学参数总是按国际单位制列出。

**注意对于TCC 版本P 以后的加密数据库,不能利用这个命令列出任何数据。**

**语句1:** LIST\_PHASE\_DATA <相名称>

**语句2:** LIST\_PHASE\_DATA

**后续提示语:** PHASE NAME: <相名称>  
输入相名称 (如果是缩写,缩写式必须是唯一的)。

### 11.11.3 LIST\_PARAMETER

说明:

这个命令可以在屏幕上列出相的某个特定参数的 TP-函数。你必须给出相参数的名称, 详细信息, 请参见命令 ENTER\_PARAMETER。

参数名称为(详细信息见 11.4):

<identifier>(<phase>,<constituent array>;<digit>)

中文: <标识符>(<相>,<组元列>;<数字>)。

参数名举例:

|                    |                        |
|--------------------|------------------------|
| G (GAS, C1O2)      | — CO2 气体分子的吉布斯形成自由能。   |
| G (FCC, FE:VA)     | 具有空位的 fcc Fe 吉布斯形成自由能。 |
| L (LIQ, Fe, Cr; 0) | 液相 Fe 、Cr 的规则溶液参数。     |
| L (LIQ, Fe, Cr; 1) | 亚规则 sub-regular 溶液参数。  |
| TC (BCC, Fe:Va)    | bcc Fe 的居里温度。          |
| BMAGN (BCC, Fe:Va) | bcc Fe 的波尔磁子数参数。       |

参数的名称由许多部分组成。首先是一个类型标识符。下列类型标识符是合法的: G (标准吉布斯自由能和相互作用参数)、L (相互作用参数), TC (居里温度), BM 或 BMAGN (波尔磁子数)。用户可以使用 L 作为相互作用参数; 输出时 L 总是作为相互作用参数。注意类型标识符 BM 也用作表示水溶物质的玻恩函数。

下列的新标识符从 TCCN 版本开始启用, 在 TCCR 版本之后应用更为广泛:

V0 298.15 K , 1 bar 下的体积 (仅为数值),

VA 总的热膨胀性,

VB 1 bar 时的体模量,

VC 等温可压缩性,

VK 高压匹配参数。

标识符后必须跟圆括号, 相名称,逗号和组元列。组元列后跟一个分号和一个数字。 参数名由闭括号结束。

标识符必须后面紧跟圆括号, 相名称,逗号和组元列。组元列后面可以跟一个分号和一个数字。 参数名由闭括号结束。

组元列由一系列组元名称组成。相互作用参数在同一亚点阵中具有两个或两个以上的组元时, 组元之间由逗号隔开。如果相是具有亚点阵的, 每个亚点阵



中中至少有一个确定的组元。在不同亚点阵中的组元必须以亚点阵顺序给出，并且用冒号隔开。

在成份列后，打一个分号，分号后可输入一个分索引数字。数字从 0 到 9。分索引数字的意义取决于相所使用的过剩自由能的模型。如果没有输入分号和数字，分索引数字将被认定为零。

用户可以使用星号，“\*”，表示参数独立于特定亚点阵的组元。例如，`L(L12,AL,NI:*)`，意味着相互作用参数是第一个亚点阵组元 AL 和 NI 之间的二元相互作用，它独立于第二个亚点阵中的所有组元，即第二个亚点阵成分与第一个亚点阵的相互作用参数无关。

当被要求输入参数名称时，而你直接敲了<RETURN>键，或者你输入了一个不合格的参数名称时，你将被要求输入名称中的每一部份。

**注意对于TCC 版本P 以后的加密数据库,不能利用这个命令列出任何数据。**

语句1: `LIST_PARAMETER <标识符>(<相>,<组元列>;<数字>)`

语句2: `LIST_PARAMETER`

后续提示语: `PARAMETER: <参数名>`

输入一个正确参数名。如果一个参数名不合格或用户按<RETURN>键，将出现如下警告:

\*\*\* ERROR, PLEASE RE-ENTER EACH PART SEPARATELY (错误, 请分别的重新输入每一个参数)  
程序将进一步提示, 要求分别输入参数名的每一部分。

Identifier (/X/): <G 或 L, 或 TC, 或 BM>

从(G 或 L, 或 TC, 或 BM)中确定一个合法标识符 identifiers。同 `ENTER_PARAMETER` 命令。

Phase name (/ABCD/): <相名称>

定义相名称。同 `ENTER_PARAMETER` 命令。

Constituent (in SUBLATTICE # /abc/): <物质 species 名称>

确定组分名称。同 `ENTER_PARAMETER` 命令。

INTERACTING CONSTITUENT (IN SUBLATTICE # /xyz/): <物质 species 名称>

确定相互作用组元名称; 如果没有相互作用组元, 敲<RETURN>。同 `ENTER_PARAMETER` 命令。

INTERACTING CONSTITUENT (IN SUBLATTICE # /xyz/): <物质 species 名称>

如果有相互作用组分,确定它们;否则敲<RETURN>。同 ENTER\_PARAMETER 命令。

Degree /#/ : <度 degree>

确定一个数字作为相参数的度。同 ENTER\_PARAMETER 命令。

#### 11.11.4 LIST\_SYMBOL

*说明:* 当系统中各相的模型参数的 TP-函数被输入后,用这个命令就可以在屏幕上列出可用的标志符。

*语句:* LIST\_SYMBOL

*后续提示语:* NAME: <标志符 symbol 名称>

指定一个标志符名称。注意只有与这个名字相配的标志符才会被列出。或者敲<RETURN> 键,列出系统中已经输入的所有可用标志符。

OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/: <文件名>

定义一个文件名,已输入的标志符将以可读形式写在此文件中(简单文本文件,稍后可以通过一个文件编辑器打开和编辑)。缺省值是屏幕(直接敲<RETURN>)。

#### 11.11.5 LIST\_CONSTITUENT

*说明:* 这个命令在屏幕上列出已定义系统所有相的所有成分(如点阵分数)。这主要是为了方便软件管理员。注意 GES 监控器中没有设定成分的命令。

*语句:* LIST\_CONSTITUENT

#### 11.11.6 LIST\_STATUS

*说明:* 此命令用于列出已输入的元素,相和物质及相应的状态词。这个命令的存在主要是方便系统管理员。

*语句:* LIST\_STATUS

**重点注意:** 每一元素, 物质种类, 相和标志符具有一系列状态位(bits)。这些位的数值可由 LIST\_STATUS 命令列出。它们对使用者而言没有意义, 但在此处我们解释它们的含义。

字(bits)以十六进制列表, 四个字(bit)写为十六进制数。两个十六进制数为一字节 byte。在十六进制中, 0 到 9 为一般数字。A 到 F 表值 10 到 15。十六进制数字 E4000000 具有 用字来表示时, 只有 1, 2, 3 和第 6 是 1, 其它位为零。字(bits)从 1 开始标号表示最重要(最左的)字。

### 元素状态字:

字 含义

- 1 表示元素不可被删除(金用于空位和电子)
- 2 表示终止状态 (包含 3 和 4)
- 3 表示显终止
- 4 表示暗终止(不出现)

### 物质状态字

字 含义

- 1 表示一个元素的物质记录(每一元素有一个物质记录)
- 2 表示终止状态 (包含 3 和 4)
- 3 表示显终止
- 4 表示暗终止(e.g., 物质元素被终止)
- 5 表示带电的(包括 6 和 7)
- 6 表示带负电
- 7 表示带正电
- 8 表示空位
- 9 表示成份 (缺省时元素为成份)

### 相状态字

字 含义

- 1 表示理想相(无亚点阵无过剩参数)
- 2 表示终止相(包含 3 和 4)
- 3 表示显终止
- 4 表示暗终止(即, 如果所有的成分终止)
- 5 表示气相
- 6 表示液相
- 7 表示溶液相
- 8 表示只有一个成份(在每个亚点阵中)
- 9 表示离子(包括 10 和 12)
- 10 表示新离子液相模型(内部电子平衡)
- 11 表示不可增加组元
- 12 表示需要外部电荷平衡
- 13 表示水溶液模型
- 14 表示带电物质(离子)

- 15 表示稀释熵
- 16 表示某一参数前次计算超出了温度范围。
- 17 表示 Kapoor-Frohberg-Gaye cell 模型
- 18 表示运用循环计算
- 19 表示无法进行循环计算
- 20 表示循环计算是非法的
- 21 表示非理想相
- 22 表示当前点阵分数已保存
- 23 表示这个相有序
- 24 表示这个相无序(字 2 & 3 同时设定)
- 25 表示阴影相具有扩散数据
- 26 表示离子模型中的错误
- 27 有时设
- 28 表示 CVM-SRO (短程有序) 熵表达式
- 29 表示 CVM 初始化完成
- 30 用于检测类-化学有序模型
- 31 表示主要成份检查即使没有融混间隙(有序)
- 32 表示 Hoch-Arpshofen 模型

#### 符号状态字

字 含义

- 1 常量
- 2 变量
- 3 方程
- 4 表
- 5 表示只不可被修改
- 6 表示未定义

## 11.12 修改数据命令

### 11.12.1 AMEND\_ELEMENT\_DATA

*说明:* 元素数据可由这个命令改变。它只应用于数据库中没有元素数据的元素。除了质量其它值不影响计算。

*语句:* AMEND\_ELEMENT\_DATA

*后续提示语:* ELEMENT NAME: <元素名称>  
输入你想改变数据的元素的名称。

NEW STABLE ELEMENT REFERENCE /ABCD/: <参考态名称>

敲<RETURN> 获得缺省参考态 SER 或为元素输入新的参考态 SER 。

重点注意:如果元素数据已从数据库中获得, 元素缺省参考态名 SER (the Stable Element Reference state) 不可改变。这个名称用于相参数已列出且数据库假定元素参考态在数据库中时。仅当元素数据不是从数据库中获得而是人工输入时, 才可以输入一个新的参考态 SER。

NEW ATOMIC MASS /xx.xxxx/: <yyyyyy>

敲<RETURN>获得缺省的原子质量或输入新的原子质量。原子质量的单位是 g/mol。

NEW H(298.15)-H(0) /xxx.xxx/: <yyyyyy>

敲<RETURN>获得缺省 H(298.15)-H(0)或输入新的值。H(298.15)-H(0) 表示在参考态 (SER) 下 298.15 K 到 0 K 之间的焓值之差。

NEW S(298.15) /xx.xxxx/: <yyyyyy>

敲 <RETURN> 接受缺省值 S(298.15)或输入新值。S(298.15) 是元素在参考态 298.15 K 下的绝对熵值。

Default element reference state symbol index /#/: <索引值 index>

为了缺省的列出参数(标志符)输入一个合适的索引值, 或敲<RETURN> 获得预设索引值。

*Index* 索引值 用于定义输出参数的列中的符号。符号可以为 G, H298 或 H0:

- G 表示数据为在可变温度的吉布斯自由能 (也叫作晶格稳定性 *lattice stability*).
- H298 表示数据为元素 298.15 K 和 1 bar 下的焓。
- H0 意义与 H298 相同但是在 0 K 下。

注意索引值 index 只改变标志符,不改变任何值! 通常索引符由数据库正确设定。只有当人工输入数据时, 才要小心的设定索引值来获得正确的标志符。

| 索引值 | 符号   |
|-----|------|
| 0   | G    |
| 1   | H298 |
| 2   | H0   |

## 11.12.2 AMEND\_PHASE\_DESCRIPTION

说明: 这个命令可以用于表示一个相具有溶混间隙 (miscibility gap), 特殊过剩模型 或 相对吉布斯自由能具有特殊贡献。

从 TCCQ 版本以来, 一个相拥有 19 个修改选项; 从版本 TCCR 以来, 又添加了可选项 (FRACTION\_LIMITS)。概括如下:

```
EXCESS_MODEL
MAGNETIC_ORDERING
DEBYE_HUCKEL
STATUS_BITS
NEW_CONSTITUENT
RENAME_PHASE
COMPOSITION_SETS
GLASS_TRANSITION
DISORDERED_PART
MAJOR_CONSTITUENT
ZRO2_TRANSITION
REMOVE_ADDITION
QUASICHEM_IONIC
QUASICHEM_FACT00
QUASICHEM_IRSID
TERNARY_EXTRAPOLAT
HKF_ELECTROSTATIC
DEFAULT_STABLE
SITE_RATIOS
FRACTION_LIMITS
```

注意对于多种修改选择, 它们相应的后续提示语和答案是不同的:

对于 COMPOSITION\_SETS,

```
NEW HIGHEST SET NUMBER /#/: <组数 set number n>
Major constituent(s) for sublattice 1: /AB/: <成份
constituent(s)>
```

对于 NEW\_CONSTITUENT,

```
SUBLATTICE /#/: <亚点阵数 sublattice number>
SPECIES: <物质名称 species name>
```

对于 MAJOR\_CONSTITUENT,

```
Composition set /1/: <成分组数 composition set number>
Major constituent(s) for sublattice 1: /AB/: <成份>
```

对于 RENAME\_PHASE,

```
NEW PHASE NAME /ABCD/: <相名称>
```

对于 EXCESS\_MODEL,

```
Model name /ABCDEFGH/: <模型名称>
```

对于 TERNARY\_EXTRAPOLAT,

```
Extrapolation method: /TOOP-KOHLER/: <三元模型>
```

## Thermo-Calc 用户指导书

对于 MAGNETIC\_ORDERING,

THE ANTIFERROMAGNETIC FACTOR /xx/: <yy>

SHORT RANGE ORDER FRACTION OF THE ENTHALPY /xx/: <yy>

对于 DISORDERED\_PART,

Disordered phase name: <相名称>

对于 STATUS\_BITS,

New status word (in hexadecimal) /04204000/: <新状态字>

对于 SITE\_RATIOS,

Sites in first sublattice /xx/: <yy>

Sites in ...

对于 FRACTION\_LIMITS,

Element: <el>

Low fraction limit: /0/: <合适的最低温度>

High fraction limit: /1/: <合适的最高温度>

对于 BEBYE\_HUCKEL, 没有后续提示语。

对于 HKF\_ELECTROSTATIC, 没有后续提示语。

对于 GLASS\_TRANSITION, 没有后续提示语。

对于 ZRO2\_TRANSITION, 没有后续提示语。

对于 QUASICHEM\_IONIC, 没有后续提示语。

对于 QUASICHEM\_FACT00, 没有后续提示语。

对于 QUASICHEM\_RISID, 没有后续提示语。

对于 REMOVE\_ADDITION, 没有后续提示语。

对于 DEFAULT\_STABLE, 没有后续提示语。

注意：在离子液相中添加新成份是非法的。

GES 系统中还提供有很多溶体模型(想要了解多种热力学模型详细信息, 请输入 INFO MODELS)。然而, 它们通过不同的途径转换和操纵 (通过多种 GES 命令):

- 第一种方法是以非理想部分作为**过剩** EXCESS 部分建立模型, *i.e.*, 通过修改相的 EXCESS\_MODEL 主题。
- 第二种方法是以非理想部分作为多余 ADDITIONAL 部分建立模型, *i.e.*, 通过修改这个命令中相的其它主题, *例如*, MAGNETIC\_ORDERING 磁贡献模型 Magnetic Contribution Model, DISORDERED\_PART ordering/disordering 有序无序现象建模的 CVM 方法, DEBYE\_HUCKEL 稀释水溶液相的 DHLL Model 模型, 等。
- 第三种方法是实现模型整体或部分进入 GES 系统和相关数据库, 运用这种方法有完善修订 HKF 模型用于水溶液相的静电贡献, Birch-Murngham 模型用于高压贡献, SUPERFLUID 模型用于非理想气体和气态混合物。



如果用户想要运用 DHLL (Debye-Hückel Limiting Law) 模型于稀释水溶液相, 可以转换为 BEBYE\_HUCKEL 部分, 其将取代前面设定的(如果设定)选定水溶液相非理想 ADDITIONAL 部分。

如果用户想要运用特殊模型于液相的玻璃化转变, 可以转换为 GLASS\_TRANSITION 部分, 其将取代前面设定的(如果设定)选定液相非理想 ADDITIONAL 部分。

对于 DISORDERED\_PART, 它被有序相的特殊处理所需要, 有序相中无序状态的贡献用不具有有序亚点阵的相(无序相名称)来描述。

如果用户想要运用准化学-离子模型于选定液相, 必须首先以离子型液相输入此相, 然后运用这个修改选择转换为 QUASICHEM\_IONIC。它将创建一个新相, 原始的**离子液**相将不改变。QUAS\_IONIC 类离子相的熵将运用准化学模型。

如果用户想要运用 Montreal 的 F\*A\*C\*T 组织的 Kongoli 发展的准化学模型, 可以运用一个具有指定联合体或物质的普通液相模型并选中 QUASICHEM\_FACT00。此准化学模型举例可见 TCCQ Examples Book (*Examples 49 和 50*)。

如果用户想要运用法国 ISRID 发展的准化学模型, 可以运用一个具有指定结合物和物质的普通液相模型并且转到选项 QUASICHEM\_ISRID。

如果用户想要为选定相设置假想静电贡献 (必须是采用完全修订\_HKF 模型的水溶液相!), 用户可以打开 ELECTROSTATIC\_HKF 部分, 其将取代前面设定的(如果设定)选定水溶液相非理想的**附加** ( ADDITIONAL) 部分。

如果用户想要从某个选定相的吉布斯自由能的描述中移除所有选择的 **附加** 部分, 用户可以设定选项 REMOVE\_ADDITION。

如果用户想要更好的预测哪个相在第一计算中稳定, 他可以运用选项 DEFAULT\_STABLE 设定可能稳定的缺省相。

如果用户想要改变外推方法, 不用缺省的 Redlich-Kister 模型 Muggianu 外推法, 而用其他的外推法, 用户可以设定选项 TERNARY\_EXTRAPOLAT。

如果用户由于某些原因想要改变亚点阵相中的点阵数, 他可以利用选项 SITE\_RATIOS。

如果用户必须限定特殊溶解相的使用范围(根据所有涉及元素的摩尔分数), 可以使用选项 FRACTION\_LIMITS。

语句:           AMEND\_PHASE\_DESCRIPTION

后续提示语:   PHASE NAME: <相名称 >  
                  输入相名称

AMEND WHAT /COMPOSITION\_SET/: <主题>

相的许多主题可以被修改,但是通常这个命令用于为一个相输入两套或多套成分。如果一个相具有一个混合性间隙,就需要有两套成分,每一套各自对应一个可能同时稳定存在的成分。

在上述提示后输入一个问号,可获得一系列所有可以修改的相主题,如下所示:

AMEND WHAT /COMPOSITION\_SET/: ?

```
You can amend
EXCESS_MODEL
MAGNETIC_ORDERING
DEBYE_HUCKEL
STATUS_BITS
NEW_CONSTITUENT
RENAME_PHASE
COMPOSITION_SETS
GLASS_TRANSITION
DISORDERED_PART
MAJOR_CONSTITUENT
ZRO2_TRANSITION
REMOVE_ADDITIONS
QUASICHEM_IONIC
QUASICHEM_FACT00
QUASICHEM_IRSID
TERNARY_EXTRAPOLAT
HKF_ELECTROSTATIC
DEFAULT_STABLE
SITE_RATIOS
FRACTION_LIMITS
```

接下来,将示范如何利用这个命令(及其提示语)修改这些不同的相主题。

对于 COMPOSITION\_SETS:

如果用户想要改变成份的套数,他将被提示:

NEW HIGHEST SET NUMBER /#/: <套数 n>

缺省值(#) 通常为高于当前值的一个值。所有相都具有一套初始的成分。如果给出一个较低的值 (*i.e.*, 低于缺省值), 指定的成分组将被删除。注意不可以取走第一个成分组。

GIVE FOR COMPOSITION SET            n

Major constituent(s) for sublattice #: /AB/: <主要组元>

为亚点阵#定义新的主要组元,或直接敲<RETURN>键接受计算机的缺省  
值,这个缺省值是根据相的成分组的定义,计算机自动设定的。

这个提示语将被重复用于选定相的所有亚点阵。每一亚点阵主要组元可以给出。当计算平衡时,做的这些设定就可以简化给定初始值,因为具有混合性间隙的相的每一组成分应该具有不同的主要组元。

对于 NEW\_CONSTITUENT:

如果想要给一个相添加新组元可以选择这个主题。为离子液相添加新组元是非法的。

SUBLATTICE /#/ : <亚点阵数>

确定新组元位于的亚点阵。

SPECIES: <物质名称>

给出有效的物质名称。

对于 MAJOR\_CONSTITUENT:

如果用户想要为一个相的每一组成分的每一个亚点阵设定主要组元,他将被提示:

Composition set /1/ : <成分组数>

给出此相的成分组数(数字),或者敲<RETURN>键,当用户想要为已定义的成分组设定主要成份时。

Major constituent(s) for sublattice #: /AB/ : <主要组元>

为亚点阵#确定新的主要组元,或敲<RETURN>接受根据相的已定义的成分组自动设定的缺省值。

这个提示语将被重复用于选定相的已定义成分组的所有亚点阵。

每一个亚点阵中的主要组元可被指定。这有利于使计算变得更简单快捷(因为当计算平衡时,这将简化初始值的给出,由于具有混合性间隙的相的每一组成分应该具有不同的主要组元)。当提取数据时,数据库经常自动的为许多相设定主要组元。

对于 RENAME\_PHASE:

如果想要给一个相添加新组元可以通过这个选项实现。为离子液相添加新组元是非法的。

NEW PHASE NAME /ABCD/ : <相名称>

为选定相输入一个新相名,或者当用户不想改变缺省值时,就直接敲<RETURN>键。

,这是一个通过把相隐藏在新的相名称之下,来“删除”相的方法。

对于 EXCESS\_MODEL:

如果用户想要改变相的过剩模型,他将被提示:

Model name /ABCDEFG/: <模型名称>

缺省模型为溶解相的预设模型, 通常为 REDLICH-KISTER\_MUGGIANU 模型。用户可以从下述模型中选择一个作为修改:

REDLICH-KISTER\_MUGGIANU  
REDLICH-KISTER\_KOHLER  
FLORY-HUGGINS POLYMER MODEL  
MIXED-EXCESS-MODELS  
HKF  
PITZER

Redlich-Kister 过剩模型的两种外延形式: Muggianu 和 Kohler , 都是为了从二元过剩模型外推到三元过剩模型 (仅应用于三元系; 详见 11.3.3 节)。Flory-Huggins Polymer Model 聚合物模型应用于聚合物 (见 11.3.15)。对于没有亚点阵的相的一个被选定的组元对, 用户除了选用默认的对称 Redlich-Kister 模型外, 还可能通过命令: MIXED\_EXCESS\_MODELS , 调用反对称简单式或 勒让德多项式作为二元过剩模型。这里反对称是指幂级数只依赖一个成份, 例如展开式是基于 $(1-2x_B)$  而不是  $(x_A-x_B)$ 。参数应该在模型定义之前输入。HKF 和 Pitzer 模型仅对水溶液相有效 (见 11.3.14)。

注意: GES 系统中提供了更多的溶解模型 (详见 Section 11.3)。然而, 它们通过不同的途径转换和操纵 (通过多种 GES 命令):

- ◆ 第一种方法是以非理想部分作为过剩 (EXCESS) 部分建立模型, 也就是: 通过修改相的 EXCESS\_MODEL 主题, 如同这里展示的。
- ◆ 第二种方法是以非理想部分作为附加 (ADDITIONAL) 部分建立模型, 也就是: 通过修改这个命令中相的其它主题, 例如, MAGNETIC\_ORDERING 是适用于磁贡献模型, DISORDERED\_PART 是适用于以 CVM 方法为有序无序现象建模, DEBYE\_HUCKEL 是用 DHLL Model 模型给稀释水溶液相建模。
- ◆ 第三种方法是实现模型整体或部分进入 GES 系统和相关数据库, 运用这种方法的有: 完善修订 HKF 模型用于水溶液相的静电贡献, Birch-Murngham 模型用于高压贡献, SUPERFLUID 模型用于非理想气体和气态混合物。

对于 MAGNETIC\_ORDERING:

如果用户想要改变相的磁性有序参数, 他将被提示:

THE ANTIFERROMAGNETIC FACTOR /xx/: <yy>

为选定相输入反铁磁性因子。BCC 相的反铁磁性因子为-1 , 其他所有相的反铁磁性因子为-3 。

SHORT RANGE ORDER FRACTION OF THE ENTHALPY /xx/: <yy>

磁性有序化是一种二级转变, 这种转变产生的焓变来源于短程有序。这个值是在磁性转变温度以上由于短程有序产生的总焓的分数。bcc 相缺省值 (xx) 是 0.40, fcc 和 hcp 相是 0.28。

对于 BEBYE\_HUCKEL:

如果用户想要运用 DHLL (Debye-Hückel Limiting Law) 模型于稀释水溶液相, 可以转换为这种**附加** (ADDITIONAL) 部分。

注意其将取代前面设定的(如果有设定)指定水溶液相的非理想 **附加** 部分。

对于 GLASS\_TRANSITION:

如果用户对液相的玻璃化转变, 采用特殊模型, 他可以转换为这种**附加**部分。

注意其将取代前面设定的(如果有设定)指定水溶液相非理想 **附加** 部分。

对于 DISORDERED\_PART:

这个命令被有序相的特殊处理所需要, 有序相中无序状态的贡献由不具有有序亚点阵的相(无序相名称)来描述。

Disordered phase name: <相名称>

给出没有有序亚点阵的无序相名称。

许多检验确保有序和无序相之间相谐调(亚点阵, 点阵和组元)。然后在各相之间创建了一条链接, 无序相在应用程序中是隐藏的。有序相的吉布斯自由能必须包括无序相的吉布斯自由能。

具有有序/无序转变的相将具有在两相上的参数分裂; 因此, 在 GES 系统中其被称为“*两相*”描述。其中一相具有有序亚点阵, 另一相代表无序状态。

这种工具在前面版本中已经可用, 但是现在对多组分有序的应用更规律。“两相”描述表示“有序”相仅具有描述有序化的参数。“无序”相具有所有参考态及描述无序相的参数。

应用一种“两相”描述的原因是有序相仅在某些系统中出现然而无序相却经常出现, 典型的例子是无序 FCC 和 BCC 相, 它们在特定的系统中可能变成有序的 L1<sub>2</sub> 或 B2。为了处理多组元系统, 系统中许多亚系已经有序, 有必要把 BCC 相的所有参数转变为 B2 模型。但是为了避免出现这种情况, 发展了“两相”描述。在这种情况下描述无序相的参数并不改变, 但是吉布斯自由能系统被提示应添加两相的自由能。利用 AMEND\_PHASE\_DESCRIPTION 命令中的 DISORDERD\_PART 选项设定。

关于这方面的更多信息在这部分的其它地方已经给出(见 10.3.10)。但是给出计算具有两个亚点阵的有序的两相模型的吉布斯自由能的准确方法是有益的。

$$G_m = G_m^{ord}(y_i', y_i'') + G_m^{dis}(x_i) - G_m^{ord}(y_i' = x_i, y_i'' = x_i)$$

注意摩尔分数  $x_i$  由点阵分数  $y_i$  计算得来。最后一个因式表示减去无序状态中  $G_m^{ord}$  的贡献(无序状态是指在两个亚点阵上,有相同的点阵分数,点阵分数等于摩尔分数,)。其作用就是有序相中的参数对无序状态没有贡献。

对于 ZRO2\_TRANSITION:  
还没有提供。

对于 QUASICHEM\_LIQ:  
如果用户想把准化学-离子模型用于选定液相,必须首先以离子型液相输入此相,然后运用这个修改选项。它将创建一个全新相,原始的**离子液**将不改变。准离子相(QUAS\_IONIC)的熵将采用准化学模型加以计算。

对于 QUASICHEM\_FACT00:  
如果用户想要运用 Montreal 的 F\*A\*C\*T 组织的 Kongoli 等人发展的准化学模型,他可以运用一个具有指定联合体或物质的普通液相模型并选中 QUASICHEM\_FACT00。TCCQ Examples Book 提供了两个这样的准化学模型例子 (*Examples 49 和 50*)。

对于 QUASICHEM\_ISRID:  
如果用户想要运用法国 ISRID 发展的准化学模型,可以运用一个具有指定结合物和物质的普通液相模型并且转到选项 QUASICHEM\_ISRID。

对于 HKF\_ELECTROSTATIC:  
如果用户想要为选定相设置假想静电贡献(必须是采用完全修订\_HKF 模型的水溶液相!),可以打开这种**附加**(ADDITIONAL)部分。  
注意其将取代前面设定的(如果有设定)指定水溶液相非理想**附加**(ADDITIONAL)部分。

对于 STATUS\_BITS:  
如果用户想要修改相状态位(仅当用户完全清楚自己正在做什么时!),他将被提示:

New status word (in hexadecimal) /04204000/: <新状态位>

关于状态位的信息见命令 LIST\_STATUS。一般情况下,状态位不应该改变,因为这种相状态位在所有的相描述(在数据库中预定义,在 GES 系统中修改)被恰当定义后将自动设定!

仅有的两个例外是:

- ◆ 对于 Kapoor-Frohberg-Gaye cell 模型,仅可以设为 04208000;
- ◆ 对于完全修正 HKF 水溶液模型,可以设为 02084000。

对于 REMOVE\_ADDITION:

如果用户想要从被选定相的吉布斯自由能描述中移除所有选定的**附加** 部分, 可以设定这个选项。

对于 TERNARY\_EXTRAPOLAT:

如果用户不想选用缺省的 Redlich-Kiste 模型 Muggianu 外推法, 而想改变成其他的外推方, 可以设定选项 TERNARY\_EXTRAPOLAT。

Extrapolation method: /TOOP-KOHLER/: <ternary model>

从下面的备选模型中, 为当前溶解相选择一个合适的三元外推模型。

|                         |                      |
|-------------------------|----------------------|
| Redlich-Kister_Muggianu | R-K 模型的 Muggianu 外推法 |
| Redlich-Kister_Kohler   | R-K 模型的 Kohler 外推法   |
| Toop-Kohler             | Toop-Kohler 外推模型     |
| Kohler                  | Kohler 外推模型          |
| Muggianu                | Muggianu 外推模型        |

对于 SITE\_RATIOS:

如果用户由于某种原因想要改变亚点阵相中的点阵数, 可以利用选项 SITE\_RATIOS.

```
Sites in first sublattice /xx/ : <yy>
Sites in second sublattice /xx/ : <yy>
.
```

为当前相的每一个被提示的亚点阵输入期望的阵点数。敲<RETURN> 接受以前的定义。

对于 FRACTION\_LIMITS:

自 TCCR 版本以来, 这个选项使得可以对具体的溶解相, 全局的设定成份限制(按照元素的摩尔分数), 所以无论何时程序找到一个潜在相成份[或为可能存在的混合性间隙找到一个新的成分组], 但是这种成份超出全局设定成份范围, 程序将在平衡计算中自动忽略这样的相成份。其可在数据库中**永久性的** 应用(通过执行这个命令修改溶体相相描述) 或在 GES 模块中**暂时性的**应用(通过利用这个相描述修改选项)。

这对于溶解相非常重要因为相的热力学模型和评估数据是对于具体的成份范围, 例如, SLAG 数据库中的 FE\_LIQUID 相仅适用于富 Fe 液相混合物, 且在 TCAQ/PAQ 和 AQS 数据库中的 **水溶液** 相仅适用于以 H<sub>2</sub>O 为溶剂的水溶液相。

```
Element : <EL1>
Low fraction limit /0/ : <合适的最低限制>
High fraction limit /1/ : <合适的最高限制>
Element : <EL2>
Low fraction limit /0/ : <合适的最低限制>
High fraction limit /1/ : <合适的最高限制>
.
```



Element : <ELn>

Low fraction limit /0/ : <合适的最低限制>

High fraction limit /1/ : <合适的最高限制>

为相中可能使用的每一个元素输入期望的最高和最低摩尔分数限制 (在当前定义的系统中, 或特定的数据库中)。依次调用命令 AMEND\_PHASE\_DESCRIPTION 和 FRACTION\_LIMITS, 就可以一次性的对所有可能的元素(相中定义的)设定摩尔分数限制。例如,

```
TYPE_DEFINITION R GES AM_PH_DES FE_LIQUID FRACTION_LIMITS Fe 0
0.6
 Ag 0 0.01 Al 0 0.05 Ca 0 0.05 Co 0 0.01 Cr 0 0.01
 Cu 0 0.02 Mg 0 0.05 Mn 0 0.05 Mo 0 0.05 Nb 0 0.05
 Ni 0 0.05 Pb 0 0.05 Si 0 0.10 Sn 0 0.02 Ti 0 0.05
 U 0 0.01 V 0 0.02 W 0 0.02 Zr 0 0.03
 B 0 0.01 C 0 0.01 H 0 0.01 N 0 0.01 O 0 0.01
 P 0 0.01 S 0 0.01 !
```

### 11.12.3 AMEND\_SYMBOL

*说明:*

这个命令用于交互的计算函数或表格(通过转换数据库预定义或通过预先输入的命令 ENTER\_SYMBOL)在当前温度和压力条件下的当前值, 也可以修改变量和函数的定义。

注意正在计算的函数或表格的温度和压力的当前值, 可以通过命令 LIST\_STATUS 列出来, 另外没有办法改变 当前温度和压力值。

对于修改已输入标志符(变量, 方程 或参数)的定义, 这个命令的性能稍微有些不相同, 如下所述:

- ◆ 对于变量, 其值可以改变。
- ◆ 对于函数, 在不同范围的最高最低温度限制值及相应的表达式可以改变。
- ◆ 对于参数, 在不同范围的最高最低温度限制值及相应的表达式可以改变。

*语句:*

AMEND\_SYMBOL

*后续提示语:*

NAME: <标志符 symbol 名称>

确定一个已经输入的标志符名称。

对于表格和函数(或者是函数式的参数, 这种函数式的参数是用带有 PARAMETER 关键字的 ENTER\_SYMBOL 命令输入的 -- 而不是用 ENTER\_PARAMETER 命令输入的), 在标志符名称输入之后, 程序将自动计

算它们在当前温度和压力下的值, 并且在屏幕上列出它们的当前值, 例如:

```
FUNCTION VALUE 2.52500000E+01
TABLE VALUE 1.56000000E+02
```

对于变量和方程(或参数), 将出现进一步提示语, 提示语由于要修改的标志符类型不同而不同, 如下所述:

*For a variable (对于变量):*

Value /current value/: <新值>

对于一个变量, 当前值会被显示, 用户可以把它变为新值。

*For a function (or an parameter entered as a symbol):*

*对于函数 (或者是以标识符方式输入的参数):*

DO YOU WANT TO CHANGE THE NUMBER OF RANGES /NO/: <Y or N>

如果用户想要改变选定函数范围的数量, 或改变函数中的温度限定, 输入 Y (Yes), 然后用户必须重新输入最高/最低温度限制和函数(输入的细节见 ENTER\_PARAMETER 命令)。这样做非常繁琐但也没有其它的方法, 抱歉。如果用户不打算改变这个范围数, 直接敲<RETURN>键接受缺省答案 N (No), 选定函数在所有温度范围内的完整定义的将列在屏幕上。例如:

DIFFERENT FUNCTIONS IN THESE RANGES (函数定义在这些范围内)

```
1 298.15<T<2000.00
2 2000.00<T<4500.00
3 4500.00<T<6000.00
```

接下来将要提示:

DO YOU WANT TO CHANGE RANGE LIMITS /NO/: <Y or N>

如果具有一个以上的范围, 这个问题将提出。但是, 再次抱歉这个选项 (若打算输 Y) 还没有提供。所以这里就请直接敲 <RETURN>键!

RANGE NUMBER (0 TO EXIT) /0/: <行数>

如果函数在两个或多个温度范围内不同, 你必须指定你要修改的函数范围。或可以敲 <RETURN> 或符号 0, 退出这个命令而不作任何改变。

Function:

可以编辑前面输入的函数。编辑由普通的子程序 FOOLED 执行, 如 AMEND\_SYMBOL 命令中所述。提示用户的常规提示语如下所示:

1:+:>

提示语由在字符串中的当前位置和 冒号 “:”之间的字符组成。可以给出下列命令:

Help (帮助)

?

Move CP to last or first character

<+/-> A

Delete characters from CP

<+ -#characters> D

Exit E

Find <#occurences> F<string>@

Insert I<string>@

Move <+ -#positions> M

Restore string R

Substitute S<OLD>@<NEW>@

Type string T

CP 表示在字符串中的当前位置, #表示第几, @ 是一个输入或寻找字符串的终结器。

注意当字符串被书写时, 当前位置的字符被下划线“\_”代替。这种帮助也可在线通过敲一个“?”而获得。

为结束当前方程编辑, 必须在提示语后输 E 。

RANGE NUMBER (0 TO EXIT) /0/: <范围数>

输入编辑函数的范围数, 或敲 <RETURN>键 或 0 退出此命令。

## 11.12.4 AMEND\_PARAMETER

**说明:** 用户用这个命令可以交互的改变参数的温度-压力函数。这对于修改书写错误非常有用, 因为它可以实现在终端交互的编辑旧函数。关于如何定义参数的详细信息, 请参见 11.10.5.

**语句:** AMEND\_PARAMETER

**后续提示语:** PARAMETER: <参数名>

输入一个正确参数名。如果一个参数名不合格或用户直接按了<RETURN>键, 将出现如下警告:

\*\*\* ERROR, PLEASE RE-ENTER EACH PART SEPARATELY (错误, 请重新分别输入每一个参数)  
程序将进一步提示, 要求分别输入参数名的每一部分。

Identifier (/X/): <G 或 L, 或 TC, 或 BM>

从下列合法标识符(G 或 L, 或 TC, 或 BM)中指定一个标识符。同命令 ENTER\_PARAMETER 中的一样。

Phase name (/ABCD/): <相名称>

确定相名称。同命令 ENTER\_PARAMETER 中的一样。

Constituent (in SUBLATTICE # /abc/): <物质 species 名称>

确定组元名称。同命令 ENTER\_PARAMETER 中的一样。

INTERACTING CONSTITUENT (IN SUBLATTICE # /xyz/): <物质名称>

确定相互作用的组元名称; 如果没有相互作用组元, 敲<RETURN>。同命令 ENTER\_PARAMETER 中的一样。

INTERACTING CONSTITUENT (IN SUBLATTICE # /xyz/): <物质名称>

如果有相互作用组元, 指定它们; 否则敲 <RETURN>。同命令 ENTER\_PARAMETER 中的一样。

Degree /#/: <级数>

确定一个数字作为相参数的级数。同 ENTER\_PARAMETER 命令中一样。在参数名称正确输入之后, 程序将在屏幕上列出它的当前定义(在数据库中预设或之前由 ENTER\_PARAMETER 命令定义的), 例如:

```
L(PHASE2,AL,MG;1)=
 298.15<T<2000.00: +5000
 2000.00<T<4500.00: +4500
 4500.00<T<6000.00: +4000
```

然后程序将提示改变参数定义,如下所述:

DO YOU WANT TO CHANGE THE NUMBER OF RANGES /NO/: <Y or N>

如果用户想要改变选定函数的范围数, 或改变方程中的温度界定, 输 Y (Yes), 然后重新输入最高/最低温度限制和函数(输入的细节见 ENTER\_PARAMETER 命令。很抱歉, 这样做非常繁琐但也没有其它的方法。

如果用户不打算改变范围数但打算改变一个或多个范围中的函数, 敲 <RETURN>接受缺省答案 N (No), 选定参数在所有温度范围内的完整定义的将列在屏幕上。例如:

在这些行中的不同方程

```
4 298.15<T<2000.00
5 2000.00<T<4500.00
6 4500.00<T<6000.00
```

接下来将要提示:

DO YOU WANT TO CHANGE RANGE LIMITS /NO/: <Y or N>

如果具有一个以上的温度范围, 这个问题将提出。但是, 再次抱歉这个选项 (若打算输 Y) 还没有提供。所以这里直接敲 <RETURN>!

RANGE NUMBER (0 TO EXIT) /0/: <行数>

如果参数的函数在两个或多个温度范围内不同,你必须指定你要修改的函数的范围。或者敲 <RETURN>键 或符号 0 ,退出这个命令而不作任何改变。

Function:

可编辑前面输入的函数。编辑在普通子程序 FOOLED 中执行, 如 AMEND\_SYMBOL 命令中所述。下面将显示提示使用者的常规提示语:

1:+:>

提示语由字符串中的当前位置和 冒号 “:”之间的字符组成。

可以给出下列命令:

|                                    |                          |
|------------------------------------|--------------------------|
| Help                               | ?                        |
| Move CP to last or first character | <+/-> A                  |
| Delete characters from CP          | <+ -#characters> D       |
| Exit                               | E                        |
| Find                               | <#occurences> F<string>@ |
| Insert                             | I<string>@               |
| Move                               | <+ -#positions> M        |
| Restore string                     | R                        |
| Substitute                         | S<OLD>@<NEW>@            |
| Type string                        | T                        |

CP 表示字符串中的当前位置, #表示第几, @ 是一个输入或寻找字符串的终结器。

注意当字符串被书写时当前位置的字符被下划线“\_”代替。这种帮助也可在线通过敲一个“?”而获得。

当结束编辑当前函数进, 必须在提示语后输 E 。

RANGE NUMBER (0 TO EXIT) /0/: <范围数>

输入编辑方程的范围数, 或敲 <RETURN> 或 0 退出此命令。.

## 11.12.5 CHANGE\_STATUS

说明:

元素、物质或者相的状态 ( status) 可以是**参与态** ( ENTERED) 或 **暂停态** (SUSPENDED)。暂停态可以是隐性的或显性的。隐性暂停状态可以设给如元素为显性暂停态的物质。如果所有元素设为参与态, 那么隐性暂停态的物质将自动变为参与态。

在这个命令之后, 程序将给出信息显示哪一个元素/物质/相被暂停或恢复(参与)。因此, 具体元素、物质、相的状态位将被改变, 如 LIST\_STATUS 命令列出的信息。

语句1:

CHANGE\_STATUS <关键词> <新状态> <name1; name2; ...>

语句2: CHANGE\_STATUS

后续提示语: FOR ELEMENT, SPECIES OR PHASE /SPECIES/: <关键字 keyword>  
输入关键词 (元素或物质或相)。

SUSPEND /Y/: <Y or N>

(Y)表示状态由**参与态** 变为**暂停态**, (N)表示 相反的意思。

如果一个元素是被暂停的, 所有具有这个元素的物质就是隐性暂停的。如果相的所有组元或亚点阵中的所有组元都被暂停了, 那么这个相也会变为隐性暂停。

List of ELEMENTS/SPECIES/PHASES: <元素、物质或相的名称>

指定那些将变为暂停态或活动态的元素、物质、相的名称或索引。对于名称, 它们之间应由空格分开, 并且由一个分号 “;” 或一个空行表示结束。对于索引可以给出一个由连字符“-”分隔两个数字的范围, 行由一个分号 “;” 结束。

例:

5 1 7-12 FE;

## 11.12.6 PATCH\_WORKSPACES

说明: 这个命令仅由那些真正懂得其用途的人使用。

语句: PATCH\_WORKSPACES

## 11.12.7 SET\_R\_AND\_P\_NORM

说明: 气态常数(R) 值是用来定义能量单位的, 它被用于输入的数据。在输出时, 所有数据都是以国际单位制为单位。压力 1 atm 的值用于解释应用程序给出的压力值。

语句: SET\_R\_AND\_P\_NORM

后续提示语: VALUE OF GAS CONSTANT IN YOUR ENERGY UNITS /8.31451/: <新值>  
气态常量缺省值是 SI 单位制的 (即, 8.31451)。如果用户改变这个值, 将只影响终端交互给出的能量数据的解释, 例如: 如果气态常量值设为 1.98717, 用户就可以以卡 (Calories) 为单位输入能量。

VALUE OF ONE BAR IN YOUR PRESURE UNITS /100000/: <新值>

应用程序给出的压力值，将会被除以这个气态常数值，然后再乘以以帕斯卡为计量单位的一个大气压的数值，最后才能在 GES 系统中应用。

## 11.13 删除数据命令

### 11.13.1 REINITIATE

**说明:** GES 系统中存储的数据全部清除，且所有变量初始化为缺省值。

**语句:** REINITATE

**后续提示语:** UPPER CASE ONLY /Y/: <Y or N>

元素和物质的名称可以为大写模式(输 Y 或敲<RETURN>), 或由两个字母组成的元素名称, 其第一个字母为大写第二个为小写 (输 N)。注意在大写模式中所有的小写输入将自动转换为大写。

LOWER TEMPERATURE LIMIT /298.15/: <最低温度, 单位 K>

当数据交互输入时, 这个值将作为最低温度限制。

UPPER TEMPERATURE LIMIT /6000/: <最高温度, 单位 K>

当数据交互输入时, 这个值将作为最高温度限制。

Default element reference state symbol index /1/: <1 or 2 or 3>

为缺省的列出参数(标志符)输入一个合适的索引值, 或敲<RETURN> 获得预设索引值(1)。

*Index 索引值* 用于定义输出参数列中的标志符, 标志符可以是 G, H298 或 H0:

- G 表示数据是在可变温度下的相对于吉布斯自由能的 (也叫作晶格稳定性)。
- H298 表示数据是相对于元素在 298.15 K 和 1 bar 条件下的焓值的。
- H0 意义与 H298 相同, 但是参考态的温度是 0 K。

注意索引值只改变标志符, 不改变任何值! 通常索引符由数据库正确设定。只有当人工输入数据时, 用户必须设定索引值以获得正确的标志符。

| 索引值 | 符号 |
|-----|----|
|-----|----|

|   |   |
|---|---|
| 0 | G |
|---|---|



|   |      |
|---|------|
| 1 | H298 |
| 2 | H0   |

## 11.13.2 DELETE

*说明:* 尚未提供。

*语句:* DELETE

## 11.14 存储或读取数据命令

### 11.14.1 SAVE\_GES\_WORKSPACE

*说明:* GES 系统中应用的数据区可以保存到一个文件上 (在 Windows 操作系统下具有缺省扩展名“.GES5”, 在 UNIX/Linux 操作系统下, 其缺省扩展名为“.ges5” )。缺省的文件名是 “RESULT.GES5” 或为在前面命令 READ\_GES\_WORKSPACE 中使用的文件名。注意输出是非格式编排的, 它不能打印。

*语句1:* SAVE\_GES\_WORKSPACE <文件名>

*语句2:* SAVE\_GES\_WORKSPACE

*后续提示语:* WORKSPACE FILE /ABCD/: <文件名>  
在 UNIX 和 Linux 操作系统下, 这个提示语后要指定写入当前 GES5 工作空间的文件名。

在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 操作系统下, 如图 11-1 所示的 “**Save As**” 窗口将弹出。用户要在“**File name**” 栏里输入一个文件名, 用户还可以进一步的在“**Save in**”栏中指定他希望的工作目录。通常“**Save as type**” 栏里缺省的文件类型为适用于 GES5 工作空间的形式(即, GES5 文件)。

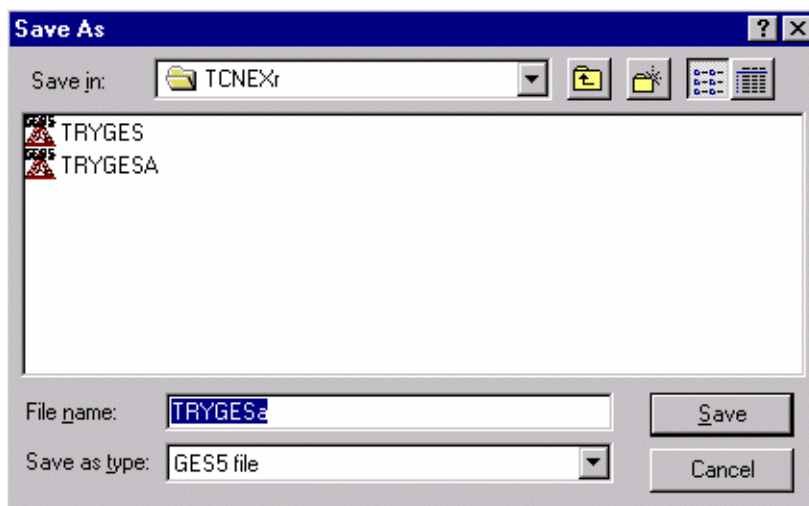


图 11-1. “Save As” 窗口: GES5 工作空间文件存储

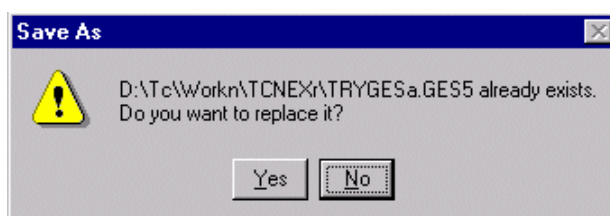


图 11-2. “Save As” 警示窗口: 继续还是停止存储

如果当前工作目录中已经存在一个具有相同文件名的\*.GES5 文件,将弹出如图 11-2 所示警示窗口。用户可以选择“**Yes**”按钮,以新文件替换以前存储的同名\*.GES5 文件,或选择“**No**”按钮以取消当前存储。对于后者,用户可以用另一个文件名或改变工作目录来存储当前 GES5 工作空间。

### 11.14.2 READ\_GES\_WORKSPACE

**说明:** 先前由命令 SAVE\_GES\_WORKSPACE 存储在一个文件中的数据区,可以通过这个命令读回到 GES 系统中。注意这些存储的文件对于每一类型的 CPU 而言都是独一无二的,即存储在一个 CPU 类型上的文件不能用于另一个 CPU 类型。

**语句 1:** READ\_GES\_WORKSPACE <文件名>

**语句 2:** READ\_GES\_WORKSPACE

**后续提示语:** WORKSPACE FILE /ABCD/: <文件名>

在 UNIX 和 Linux 操作系统下, 这个提示语后面要输入具体的文件名, 这样先前存储的 GES5 工作空间才会被读出。

在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 操作系统下, 将弹出一个如图 11-3 所示的“**Open file**”窗口。用户需要在“**File name**”栏里输入文件名, 用户还可以进一步的在“**Look in**”栏中指定他所想要的文件存储的工作目录。通常“**Files of type**”栏中缺省的文件-类型为适用于 GES5 工作空间的形式(*i.e.*, GES5 文件)。



图 11-3. “Open file” 窗口: 打开 GES5 工作空间文件

## 11.15 其它命令

### 11.15.1 ADD\_COMMENT

**说明:** 这个命令允许用户快速的记下参数或其他将来很难记住的内容。

**语句:** ADD\_COMMENT

### 11.15.2 SET\_INTERACTIVE

**说明:** 这个命令在 GES 模块中对停止执行示范或 MACRO 文件非常有用。他跟相互作用代码没有关系。

语句: SET\_INTERACTIVE

## 12 最优化模块(PARROT)

### 12.1 概述

**PARROT** 模块是 Thermo-Calc (TCC) 和 DICTRA 软件的另一个重要基本模块。它含有一个全面的子程序包,用于根据各种异类交互体系中的平衡状态描述量或动力学过程的实验观察来评估热力学、动力学模型参数。该模块与 Thermo-Calc 和 DICTRA 中的所有基本模块是交互联系的。目前,它在 TCW 软件中不可用。

**PARROT** 模块利用 **GES** 模块(吉布斯能量体系)来处理多组元体系中可能形成的各种相的模型,同时利用 **POLY** 模块(平衡计算模块)存储和计算复杂的异类平衡。在 Thermo-Calc 中使用 **PARROT** 模块之前,应当熟悉 **POLY** 模块,学习 **GES** 模块。关于模型、参数、函数和平衡状态的很多方面在那里作了解释。DICTRA 软件中,**PARROT** 模块同样利用 DICTRA 工具来存储和模拟扩散控制相变中动力学过程的性质;详情参阅 ***DICTRA 用户指南***。

**PARROT** 模块的目的是提供一套统一的子程序,根据现有的实验数据和文献数据对各种热力学和动力学参数进行严格评估。鼓励 Thermo-Calc 和 DICTRA 的高级用户在数据评估和数据库建立过程中使用此模块。然而,由于在严格评估中的特殊目的,在如 **TQ Interface** 的三级应用编程界面中没有包含该模块。

与 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件中的其他执行的模块相似, **PARROT** 模块为用户提供了一个用户界面,该用户界面包含对数据编辑和参数优化的一套简单而全面的指令。通过这样一个用户界面,用户能交互式的输入并修改相描述,模型关联,基本热力学参数等。该部分用户指南即对该用户界面给一描述。数据编辑任务是通过 **EDIT\_EXPERIMENTS** 命令进入 **PARROT** 的子模块 **ED\_EXP** 来实现的(详情参阅 12.7.7 节 和第 13 章)。

同 **POLY** 和 **GES** 模块一样,该模块有其自己的动态存储工作区。它连续的传输各种热力学/动力学数据及计算的平衡态或者动力学过程到 **POLY3**, **GES5** 和 **DICTRA** 工作区中。

以下是 **PARROT** 模块的可用命令:

---

```

PARROT: ?
AMEND_PARAMETER LIST_ALL_VARIABLES REINITIATE
BACK LIST_CONDITIONS RESCALE_VARIABLES
COMPILE_EXPERIMENTS LIST_PARAMETER SAVE_PARROT_WORKSPACES
CONTINUE_OPTIMIZATION LIST_PHASE_DATA SET_ALTERNATE_MODE
CREATE_NEW_STORE_FILE LIST_RESULT SET_FIX_VARIABLE
EDIT_EXPERIMENTS LIST_STORE_FILE SET_INTERACTIVE
ENTER_PARAMETER LIST_SYMBOL_IN_GES SET_OPTIMIZING_CONDITION
EXIT MACRO_FILE_OPEN SET_OPTIMIZING_VARIABLE
GOTO_MODULE OPTIMIZE_VARIABLES SET_OUTPUT_LEVELS
HELP READ_PARROT_WORKSPACES SET_SCALED_VARIABLE
INFORMATION RECOVER_VARIABLES SET_STORE_FILE
PARROT:

```

⇐ PARROT 模块用户指南修订史:

|             |                                           |
|-------------|-------------------------------------------|
| 1984 年 2 月  | 首次发行(Bo Jansson 编辑)                       |
| 1993 年 10 月 | 第二次修订发行(Birgitta Jönsson , Bo Jansson 编辑) |
| 1998 年 9 月  | 第三次修订发行(Bo Sundman 编辑)                    |
| 2000 年 6 月  | 第四次修订并扩大发行 (Bo Sundman , Pingfang Shi 编辑) |
| 2002 年 12 月 | 第五次修订发行(Bo Sundman , Pingfang Shi 编辑)     |
| 2004 年 6 月  | 第六次修订发行(Pingfang Shi 编辑); 2006 年小有改动      |

### 12.1.1 热力学数据库

事实已证明描述真实体系的热力学模型参数的严格评估对了解材料性质、结构和加工等方面具有工业价值。这是因为我们已经在所有二元系、许多三元系以及某些具有各种模型的更高组元体系的热力学模型参数的确定上投入了很大的心力。

从这些模型和参数中我们能预测多元体系的稳定状态。高达 10—15 种元素的热力学数据库能精确预测某些工业金属体系, 像钢, 铝合金, 钛合金和镍基超耐热合金的稳定状态。此外, 在长期的国际协作下, 严格的评估工作已经使建立一些实现各种应用的大规模内部一致的热力学数据库成为可能, 如 SGTE 物质和溶液数据库 (目前包含多达 83 种元素)。

与相应的不同的独立量相比, 我们总结出对热力学数据库的严格评估的优越性如下:

- ◆ 以独特的方式结合大量实验数据产生部分模型参数并减少实验的量;
- ◆ 使评估的实验热力学数据和相图数据的自相一致;
- ◆ 对热力学数据的添加和外推可靠;
- ◆ 设计新实验的有利工具;
- ◆ 相变建模和模拟相变的基础。

上面最后一点可以说最重要。我们对一些动力学过程往往缺乏理解, 经常必须通过反复实验和差错校验来确定输入条件和操作环境改变而导致的灵敏度。热力学不仅提供体系试图达到的稳定状态的信息, 而且也提供亚稳状态的化学势和驱动力信息。这对复杂材料处理过程的动力学建模和模拟至关重要。

### 12.1.2 最优化方法

对各个独立状态变量由极其微小的误差决定的平衡中，由“最大可能原理”得出的最合适标准，为有用剩余误差的平方和最小。PARROT 模块中可通过两种途径来考虑实验条件出现的误差：

- a) 条件误差，即，独立状态变量，在 POLY 界面中可以规定。在这种情况下，可以根据独立状态变量的实验值计算一个平衡。在假设其线性依赖独立体系变量的情况下，依附变量的标准偏差可根据误差传递规则计算。
- b) 用一个定义的变量为条件可以优化条件的真实值。可通过在实验数据文件中的 IMPORT 命令来实现。此情况下，独立状态变量的实验观测值应通过实验数据文件中的 EXPERIMENT 命令具体化。实验数据文件中可以使用的命令是有一定拓展的 POLY 模块的一个命令子集，详情请参阅第 13 章 (ED\_EXP: 实验编辑模块)。

这两种方法均可以转变成求最小平方和的问题。当几次实验已经在相同恶劣条件下进行时，可应用方法 b)。两种方法可在同一个优化中混合使用。

Harwell 子程序库的子程序 VA05A 中创建了提供最小平方和的一系列的变量。

### 12.1.3 最小平方方法使用要求

最小平方方法能对模型参数作出很好的评估，条件如下：

- ◆ 观测值的随机分布符合高斯概率分布；
- ◆ 观测量仅服从随机误差；
- ◆ 不同实验之间互无关联；
- ◆ 每次观测值的标准偏差可估计；
- ◆ 观测值的数目足够大；
- ◆ 考虑的模型准确；

在一般的热力学评估中上述条件几乎不能满足。但鉴于无其他更好方法，我们只能尽可能逼近这些条件。

### 12.1.4 其他优化软件

二元系优化的经典程序是由 Lukas 博士发展起来的，称为 BINGSS。为了同此软件兼容，我们用大量有效程序来转换 BINGSS 至 PARROT：

- c2g c2g 程序将 BINGSS 的“COE”文件转换成 PARROT 中的一个设置文件，以便输入所有的元素、相和参数；

d2p d2p 程序将 BINGSS 的“DAT”实验数据文件转换成一个 POP 文件;

t2c t2c 程序将 Thermo-Calc 中的 TDB 文件转换成 BINGSS 的一个“COE”文件。这是从 Thermo-Calc 数据库中提取纯元素参数用于 BINGSS 的一种方法。

## 12.2 准备工作

这是一个用户指南,而非评估方法说明书,仅给出评估中不同步骤的简明概述。此处涉及的一些命令可参阅本部分和以下部分的相关章节。

tcex36 是《Thermo-Calc 实例》一书中描述的有关评估的一个例子,评估对象是 Thermo-Calc 软件/数据包提供的一个虚拟体系。读者应当对此予以细究。我们也应当研究其他已经发表的评估实例,特别是关于模型方面。

### 12.2.1 实验数据文件: POP 文件

评估者应首先收集选定体系的现有实验结果和文献数据,然后在一个 POP 文件(因为它的扩展名是 .POP)中输入所有实验数据。实验的平衡状态和度量用带有一些附加功能的 POLY 命令描述。第 13 章(ED\_EXP:实验编辑模块)详细叙述了\*.POP 文件中合法的命令。

\*.POP 文件描述了体系中已知实验数据,因此显得非常重要。通常情况下,几年后由于新的信息的出现,或者一个相的模型需作一定改变时,该体系必须进行重新评估。因为重新评估工作可能由其他人进行,所以要对 POP 文件中的信息要经过精心组织和排版,以便于他人及软件能够读懂。

\*.POP 文件的句法自成文档并独立于该体系中描述相的模型。

我们推荐说明一个实验平衡的方式尽可能的接近实际的实验条件。通常,稳定相组、温度、压强和部分或者全部成分是已知。

#### 12.2.1.1 单相平衡

单一稳定相的实验大多关注混合焓或化学势。譬如,以下描述的是 Au-Cu 体系的一个实验:

```
CREATE-NEW-EQUILIBRIUM 1 1
CHANGE-STATUS LIQUID=FIX 1
SET-CONDITION T=1379 P=1E5 X(LIQUID,AU)=0.0563
SET-REFERENCE-STATE AU LIQ * 1E5
SET-REFERENCE-STATE CU LIQ * 1E5
COMMENT Measuremnt by Topor and Kleppa, Met trans 1984
```



```

LABEL ALH
EXPERIMENT HMR=-1520:200

```

此例中的前五个命令是标准的 POLY 命令，在 POLY 用户指南中有详述（第 8 章）。但第一个命令，CREATE，在 POLY 模块中很少使用，可能需要一些注解。每一个实验平衡必须以 CREATE 命令开始，此命令后的第一个整数是一个特殊标识符，用于后面交互式设置权重等。第二个整数是初始化编码，0 表示所有成分和相初始状态是 suspended，1 表示所有成分的初始态为 entered 但所有相是 suspended，2 代表所有成分和相得初始态为 entered。

最后三个命令，COMMENT, LABEL 和 EXPERIMENT, 仅适用于实验数据文件和 ED\_EXP 模块。这些命令的详细解释请参阅第 13 章（ED\_EXP: 实验编辑模块）。

EXPERIMENT 命令确定了适合优化的量。此命令的句法与 POLY 的 SET-CONDITION 命令相似。其后带有一个状态变量或者一函数名，接着是一个值和不确定度。

COMMENT 命令后附有将要保存在优化工作文件中的文档。用户也可在美元符号“\$”后给出注释，但这些注释在实验数据文件编译时（编译在后面将予以阐述）会丢失。

当用户希望将一系列平衡作为一个整体设定权重时，LABEL 命令提供了列出一系列平衡的方法。一个 label 最多四个字符，且必须以字母“A”开头。

### 12.2.1.2 两相平衡

大多数实验信息，如从相图中得到的，涉及两个或者更多的相。比如，Au-Cu 合金的熔化温度可描述如下：

```

CREATE-NEW-EQUILIBRIUM 1 1
CHANGE-STATUS PHASE LIQUID FCC=FIX 1
SET-CONDITION X(FCC,CU)=0.14 P=1E5
EXPERIMENT T=970:2
COMMENT H E Bennet, J Inst of Metals 1962
LABEL ALS
SET-ALTERNATE-CONDITION X(LIQUID,CU)=0.16

```

除最后一个外其他所有的命令的含义同上例。最后一个命令给出了该平衡中液体成分的一个估计值。实际上，除非要在交替模式计算中应用此平衡，这一条件是不必要的。此交替模式将在下面予以更详细的解释。

注意此实验的对象是温度。我们同样能用温度作为 CONDITION，成分作为 EXPERIMENT 来很好的描述该熔点，因为二者皆为测量量。选择哪个量作为 CONDITION 应基于实验技术。那些精确度最低的已知量应当作为 EXPERIEMENTS。

### 12.2.1.3 零变量平衡实验

零变量平衡是评估中需要提供的最重要的实验信息，这是 PARROT 的一个特性。因此推荐 POP 文件中应包含体系中所有的零变量平衡，即使其中一部分可能没有准确测定。现有的实验数据通常足够进行合理的评估。但我们应当谨慎地应用含限制性数据很少的拓扑相图。评估结束时，应当摒弃这些评估过的平衡，但他们可以帮助我们获得模型参数的一系列初始值。

以下是一个二元系中一个三相平衡的实例

```
CREATE-NEW-EQUILIBRIUM 1 1
CHANGE-STATUS PHASE FCC BCC LIQUID=FIX 1
SET-COND P=1E5
EXPERIMENT T=912:5
SET-ALTERNATE-CONDITION X(FCC,B)=0.1 X(BCC,B)=0.4 X(LIQ,B)=0.2
LABEL AINV
COMMENT Estimated compositions
```

交替模式计算要求实验用到交替条件。另外一个零变量平衡的例子是一个同质转变：

```
CREATE-NEW-EQUILIBRIUM 1 1
CHANGE-STATUS PHASE BCC LIQUID=FIX 1
SET-COND P=1E5 X(BCC,B)-X(LIQ,B)=0
EXPERIMENT T=1213:10
SET-ALTERNATE-CONDITION X(BCC,B)=0.52 X(LIQ,B)=0.52
LABEL AINV
COMMENT Estimated compositions
```

基于相图评估的一些经验，评估亚稳的零变量平衡是有可能的。这些评估的亚稳平衡对减少同时评估的相的数目特别有用。比如一种用途即，假设某一中间相不能形成，推测稳定三相平衡下的液相线，估计另外两相和液相间亚稳的三相平衡的温度和成分。

另外一个有用技巧是从一个包晶平衡推导液相线以估计某一化合物的共熔点。这比仅涉及两相的包晶平衡本身更为有用。

#### 12.2.1.4 三元及更高级实验

PARROT 模块能以二元系相同的方式优化三元系及多元系信息。唯一区别是每添加的一成分需要增加一个条件。

实际操作中，四元或更高级信息主要用于优化二元或三元参数。在三元系中，利用可能存在不确定度这一特点显得更为重要。如果一个二元系中的两个相、温度和压强已知，并且其中一个相的成分已测定，那么该二元系的共轭线就可以确定。对于三元系的一条共轭线，必须要测定出至少两个成分，且通常两者具有相同的不确定度。然后我们可以为此成分分配一个不确定度作为条件。例如：

```
CREATE-NEW-EQUILIBRIUM 1 1
CHANGE-STATUS FCC BCC=FIX 1
SET-CONDITION T=1273 P=1E5 X(FCC,B)=0.1:0.02
EXPERIMENT X(FCC,C)=0.12:.02
LABEL AFB
SET-ALTERNATE-COND X(BCC,B)=0.17 X(BCC,C)=0.07
```

以下将对交替的条件进行解释。

二元系评估中的一个问题是：迥然不同的模型参数可以几乎等价地描述其实验信息。这种情况下，通常将这些评估结果外推到三元系中来决定性的判断哪组模型参数最佳。但有时可能需要几个三元系信息来决定一个二元系的最佳描述。

### 12.2.1.5 二元系和三元系实验同步使用

PARROT 模块允许二元系和三元系（和更高阶系）信息的同时优化。以 COMPONENT 为关键字，使用 CHANGE\_STATUS 命令，我们可以在同一 POP 文件中调用二元系和三元系的实验数据。请注意，对于一个二元系实验信息，设置第三个成分的分数的分数为零并不合适；CHANGE\_STATUS COMPONENT C=SUS 命令是脆弱的。实际上需要手调才能顺利运行。以下是关于三元系(A-B-C)中二元(A-B)三相平衡(FCC-BCC-LIQ)的一个实例：

```
CREATE-NEW-EQUILIBRIUM 1 0
CHANGE-STATUS COMPONENT A B = ENTERED
CHANGE-STATUS PHASE FCC BCC LIQ=FIX 1
SET-COND P=1E5
EXPERIMENT T=1177:10
LABEL AAB
COMMENT from A-B
```

请注意 CREATE-NEW-EQUILIBRIUM 命令中初始编码 0 的使用。此命令是指所有组元的状态是 entered。

### 12.2.2 绘图实验文件：EXP 文件

结合实验数据绘制一份计算了的图表时，我们推荐您按照“DATAPOLT”格式将实验数据写入一个文件。详见《用户指南》第 15 章。一些情况下，POP 文件中的表格可轻松转换成 DATAPLOT 格式。DATAPLOT 文件的缺省扩展名为“.EXP”（Windows 界面下）或者“.exp”(UNIX/Linux 界面下)。

### 12.2.3 系统定义文件：SETUP 文件

第二步是创建一个“SETUP”文件，文件内容包括元素名称、物种名称、相名称及相模型名称的定义，以及所有已知信息，如“晶格稳定性”或者吉布斯形成能。

纯组元的大多数值可以在欧洲热数据科学团体 (SGTE)收集的出版物及 Alan Dinsdale 发表在 CALPHAD 杂志(1991, 317-425)上的论文中找到。这些数据也可在热力学计算软件包附带的《SGTE 纯元数据库》中提取出。GES 模块中，从 PURE 数据库提取数据后，通过 LIST-DATA 命令及选项 P 可以产生一个模板设置文件。此模板必须要进行编辑，添加新相及新参数。该 SETUP 文件的缺省扩展名是“.TCM”，它是 *Thermo-Calc* 宏 文件的缩写形式。

在 SETUP (TCM)文件的结束位置,应用 PARROT 中的 CREATE-NEW-STORE-FILE 命令将为评估体系产生一个工作文件。有关工作文件的细节请参阅 12.2.4 节。

### 12.2.3.1 相模型

为 POP 文件搜集的带有实验数据的文献通常包含建立相模型的有用信息。发表在 CALPHAD 杂志 (1997, 139-285) 的 *Second Ringberg Workshop* 报告中可以查阅描述各种相热力学的有用模型。目前用到的大部分晶体模型可用建立在 Sundman 和 Ågren (J Phys Chem Solids, 1981, 297-301)提出的亚点阵模型基础上的 *Compound Energy Formalism* (CEF)来描述,。

为了使评估与现用数据库兼容,需要从该数据库中选取大部分溶液相的模型。对于金属间相,确定某一个相在其他体系中是否具有相同结构,这点是很重要。

选择模型时应参照以下标准:

- ◆ 物理稳固性;
- ◆ 优化的参数越少越好;
- ◆ 合理推断模型;
- ◆ 与以前的评估一致。

### 12.2.3.2 模型参数

PARROT 模块储存了 99 个优化变量,且能处理单个评估体系中的 1000 个实验测量量。但对同时使用的变量和实验数目有一些限制。每个优化中程序会列出这些限制。

变量命名从 V1 到 V99,它们将在输入函数和优化参数时用到。例如:

```
ENTER-PARAM L(LIQUID,AU,CU;0) 298.15 V1+V2*T; 6000 N
ENTER-PARAM L(LIQUID,AU,CU;1) 298.15 V3+V4*T; 6000 N
ENTER-PARAM L(LIQUID,AU,CU;2) 298.15 V5+V6*T; 6000 N
```

这使得可以使用三个 Redlich-Kister 系数来描述液相的吉布斯能量,每个系数与温度成线性关系。然后优化变量 V1 到 V6 来描述实验信息。在设置文件中,我们通常引入比我们实际用到的更多的变量,以便使每个相的变量具有一定次序。

某些情况下,一个模型需要几个热力学参数相关联。我们可以通过对几个参数应用相同变量来方便的处理这种情况。例如,B2-有序相的参数可按如下描述:

```
ENTER-FUNCTION GAB 298.15 V10+V11*T; 6000 N
ENTER-PARAMETER G(B2,A:B) 298.15 GAB; 6000 N
ENTER-PARAMETER G(B2,B:A) 298.15 GAB; 6000 N
```

具有测定热容数据的一个化学计量化合物可能需要几个变量来描述其温度依赖性,例如:

```
ENTER-PARAMETER G(MG2SI,MG:SI) 298.15 V20+V21*T+V22*T*LN(T)+
V23*T**(-1)
+V24*T**2+V25*T**3; 6000 N
```

在 GES 系统中可以优化各类参数。这些参数可以是温度、压强和成分的函数。例如:标准形成焓,熵,热容,摩尔体积,热膨胀,可压缩性,磁性转变居里温度,波恩函数等。

## 12.2.4 工作文件或存储文件：PAR 文件

如 12.2.3 节所述，在 SETUP (TCM) 文件末尾，PARROT 中 CREATE-NEW-STORE-FILE 命令能为评估体系创建一个工作文件（或称作存储文件）。该工作文件也可在 PARROT 模块中由 CREATE-NEW-STORE-FILE 交互式地创建。存储在工作区并用于 GES, POLY 和 PARROT 模块的关于体系（元素、物种、成分、相）、符号（常量、变量、函数、表格）、参数等定义的所有数据，及部分实验信息，将自动保存在这样一个工作文件中。

该工作文件的缺省扩展名为“.PAR”（Windows 和 UNIX/LINUX 界面下）。请注意这种工作文件不能用任何编辑器直接编辑。此外，它们依赖硬件（与不同类型的 CPU 一一对应，因此一个 CPU 类型上保存的工作文件不能用于另一个类型的 CPU）。

## 12.2.5 各种文件名及它们的关系

当所有文件具有有不同的扩展名时，评估中的所有文件可以用同一个名称命名。因此对 Au-Cu 体系来说，可能存在 aucu.POP, aucu.EXP, aucu.TCM 和 aucu.PAR。特别的，评估过程中可能存在几个版本的工作文件(PAR)。但我们推荐更新新文本档，POP, TCM 和 EXP，以反映 PAR 文件中产生的交互式变化。

文本文件，如\*SETUP 文件、\*.POP 文件、\*.TCM 文件和\*.EXP 文件，是评估中重要的文档。评估结束，应对其更新，使\*SETUP 文件可直接编译实验和优化，以便能快速得到结果。这要求，在 POP 文件中输入最终权重，将最终参数作为参数的初始值。借助这样一系列的文件，使用新的实验数据或者新的模型就能够较容易的重评估体系。

工作文件(\*.PAR)使用时也应注意几点。工作文件中总是包含一套最后优化的参数和选定实验的权重。工作文件包含一个 POLY3 和 GES5 的工作区。当从当前的工作文件中计算一张图表时，将同时产生一个\*.POLY3 文件。该\*.POLY3 文件将拷贝一套现用参数。如果继续优化，并且用户偶然试图读取源\*.POLY3 文件，新的一套参数可能被破坏并被原来的参数所覆盖。因此当正在运行 PARROT 时，用户决不能同时读取\*.POLY3 和\*.GES5 文件。但是可以保存新的\*.POLY3 和\*.GES5 文件，如从当前参数中计算图表。

## 12.2.6 PARROT 模块的交互式运行

结合 POP, SETUP 和 EXP 这三个文件，用户可以交互式的开始运行 PARROT 了。这可分为几个最初单独的步骤。通常，因为需要循环修改权重，修改模型，增加新信息等，这些步骤需要重复。实际上很难确定评估何时完成。一般是由出版的截止时间来决定工作的期限。

SETUP 文件的命令由宏命令执行。通常会出现很多错误信息，SETUP 文件必须予以纠正并且要再运行直至无错。PARROT 模块中，我们能交互式的列出相的描述，参数表达和优化变量的值。SETUP 文件成功运行后，我们应检查所有的模型和参数是否已正确输入。

### 12.2.6.1 实验编辑

下一步是“编译”实验数据文件(POP)。操作命令为 `COMPILE`。由于语法错误编译常常也会导致很多错误信息。当检测到一个错误时编译通常会停止，同时给出一个可理解的信息。这种语法错误必须在 POP 文件中予以纠正，并且修改后的文件必须重新编译。此种情况下，同时使用几个窗口比较方便，一个用于编辑，一个用于编译。有时，错误信息比较难以理解，此错误可能在程序实际发现它之前的几行就已经出现了。解决这些类型的问题的最佳方式莫过于咨询此方面的专家，因为手动找到错误的确切位置很困难。SETUP 和 POP 文件为文本文件，可以很便捷的通过邮件发送给世界各地的 PARROT 专家。

### 12.2.6.2 设置交互模式

实验数据文件正确编辑后，第一个真正的大问题也就出现了。它就是设法从系统相模型中计算实验信息。起初，所有的模型参数都是零，且在许多情况下，除非参数已有一定的合理值，否则从一个模型中计算一个已测值几乎是不可能的。

近年来，在 PARROT 模块中引入交互模式已经简化了这个问题。SET-ALTERNATE-MODE YES 命令表示，涉及两个或更多相的实验平衡时，通过用一种近似技术来计算（此内容将在下面的单独章节中予以描述）。用户可以在 ED\_EXP 模块中通过设置权重来选择待用的实验信息。

PARROT 模块中的 OPTIMIZE 命令在实验点汇聚后与预备模块同时使用。通常需要几个 OPTIMIZE 命令，且用户可能需要更改选择的实验数据。这又需要在 ED\_EXP 模块中完成。优化的结果可以通过 LIST-RESULT 命令以一种可读形式显示。工作文件(PAR)不断更新，总是包含最后一套优化变量和计算结果。有时用户可能在尝试各种实验数据或模型时对保存现用工作文件感兴趣。这可通过复制工作文件并重新命名副本文件来实现。

### 12.2.6.3 绘制中间结果

要理解我们计算的结果究竟多好（坏），仅仅凭 LIST-RESULT 命令读出的输出文件是不够的。PARROT 模块作为 Thermo-Calc 软件包的一部分，可用 POLY/POST 模块直接计算相图和其他与热力学性能有关的图表，并且可以将这些图表和保存在 EXP 文件中的实验数据一起绘制出来。由于此操作运用很频繁，将计算和绘图的命令序列写在 MACRO 文件(TCM)上将使操作变得十分方便。当优化的变量距离最终值还很远时，计算并绘制出的相图可能会给出许多意外的结果。

### 12.2.6.4 实验数据的选择

具有交替模式的优化能提供一套参数的初始值。当会聚后，用户应当关闭交替模式，用标准模式来计算所有平衡。这可以在 ED\_EXP 模块中通过 CALCULATE-ALL 命令来实现。可能仍然有几个实验平衡不能会聚，用户就需要手工附初始值或者暂时抛弃一些平衡点（通过设定它们的权重为零）。在评估的稍后阶段，当优化变量比较接近它们的最终值时，用户可以恢复并计算全部实验平衡。

当选定的一系列平衡能在 ED\_EXP 模块中计算时，用户应当在 PARROT 模块中用 OPTIMIZE 命令迭代 0 次再次计算所有的实验点。

在输出文件中，不合适的实验信息会用一个星号“\*”在最右栏标出。在开始阶段，许多实验数据极其不合适，这并不是一个问题。但是应当注意那些 PARROT 优化自己不能解决一些误差。这种问题的一个典型例子是，当一个相存在同质共熔点，且在同质转变两侧均有实验信息。如果相的成分为实验信息，很可能计算的平衡在同质共熔点“错误”的一边，从而会给出一个严重的



误差。用户必须在 ED\_EXP 模块中手动纠正这类问题。相似的误差还可能出现间隙相中，实验信息来自间隙相的一边而计算给出另一边的成分。

#### 12.2.6.5 实验数据和参数的临界集

当找到实验数据的一个敏感权重时，它被称为“临界集”。决定这样一个集合时应考虑以下几点：

- 实验技术的可靠性；
- 同一量独立度量间的一致性；
- 不同实验方法得到的数据间的一致性；
- 应当只使用实验确定的性质，而不是经过修改了的量；
- 注意实验的评估精确性；
- 校正系统误差（如温标）；
- 应用以前的评估经验；
- 利用“负面”信息，比如，某相在某一成分或者某一温度区域内不稳定。

评估者必须确定一套合理的待优化的模型参数。用更多的参数，误差和通常会下降，但同时参数将变得更不能精确确定。对应每一个优化变量给出的“*相对标准差*”RSD 对参数给出了重要度量。RSD 的意思是，在没有改变误差的降低和多于 1 的前提下，参数可以在 $\pm$ 这个因子范围内改变。因此一个大的 RSD 意味着变量不能被恰当的决定。

只有当用户在一个 RESCALE 命令后运行了优化时和它几乎是瞬间汇聚于一点，即“范围因子”等同于“值”时，RSD 的价值才显得重大。如果存在变量，其 RSD 大于 1，这意味着用了太多的变量。

RSD 的值同样依赖于实验的权重。也可能通过改变重来降低 RSD。

如果存在一个或多个变量，其 RSD 大于 1，我们应当设法通过设定它们为零来删除一个或者多个正在优化的变量，或者设置为某一能通过其他信息决定的值，比如，通过半经验评估方法。

#### 12.2.6.6 优化和深度优化

有了随时可以修改的实验的临界集，当尝试各种待优化模型参数时，用户必须凭个人经验获得可能的最佳结果。误差和越小结果就越好。通过再次给出 OPTIMIZE, CONTINUE, RESCALE 和 OPTIMIZE 命令，在 PARROT 表明其不能改进正在优化的变量下，用户可能最终达到了一点。然而，这并不可信，应当再用几个 OPTIMIZE 命令。但如果 PARROT 会聚同样数量的迭代（有待优化的变量时），我们不得不接受这套参数。

使用 OPTIMIZE 优化数次使优化会聚的一个问题是，有时参数可能突然开始以几个数量级变化。这可能导致不可能的参数值，并且要求重新考虑实验临界集的权重和优化的参数。

参数值应该受限制有一个合理的范围。若发现独立于温度部分的相互作用参数值的数量基为  $1E7$  和与温度相关部分的相互作用参数值的数量基为  $1E3$ ，那么表明存在不合理的实验权重或使用了太多的参数。



用户如果仍然不满意所有的设定，就必须改变权重或添加更多的信息迫使优化按正确方向进展。此操作成功与否依赖于评估员的技术。

#### 12.2.6.7 几点线索

优化中可能出现许多问题和错误，关于如何处理它们，在此不可能给出简单解释。主要建议是，将所有给出奇怪结果的实验先排除在外，但要保证所有重要的零变量平衡计算合理。如果某些零变量平衡不能计算，最好将平衡中所含的中间相排除在外，首先优化液相和最重要的溶液相。当这些最重要的相已经得到合理结果时，固定液相参数和已经优化了固相参数，再将中间相包含进来进行优化。在此我们不能给与更多的综合性意见，详情请参阅 12.4 节（技巧和处理）。

#### 12.2.6.8 结果分析

很少有评估员在完成一项评估时，认为它不能再有改进。如上所述，评估何时应该完成常常受其他因素约束。但是应当对最终结果做以下分析：

- 对实验临界集的满意描述；
- 对临界集中不含数据的满意描述；
- 一套合理的参数值；
  - 热力学性质的合理外推，包括向更高阶体系；
  - 与使用其他临界集或者模型所得的结果的比较；
  - 对参数最终集的统计性能分析；

在评估的报告和出版物中也应进行这些分析。

### 12.2.7 参数的完善

所有的优化变量的相对标准偏差（RSD）低于 1 时，我们可以接受它作为最终评估参数。然而，所有参数都有许多位数，且它们在某些情形下必须进行完善处理。处理金属体系时最简单的完善处理方式是通常保存尽可能多的参数位数使体系在 1000k 时提供的误差小于 1J/mol。对于水体系或者评估温度范围差别很大的体系，需要使用其他标准。但是给出差别大于 1 J/mol 的舍入处理可能会导致相图或者其他实验数据出现可觉察的变化。

参数的完善处理还有另外一个原则。我们从具有最高 RSD（通常大于 0.1）的变量开始。基本上，这意味着此变量中只有一个重要的数字。因此我们可以把它完善为只有一个数字，结尾全为零。然而，这样做会改变误差和，且其余的变量必须在固定已经进行完善处理的变量基础上重新优化。我们应当使其余的变量保持几乎同样的误差和；否则，固定的变量就不是最好的进行完善的变量。第一个变量成功完善为一个数字后，我们可以继续完善在新集里具最大 RSD 的变量，并且把它设置为定值，重新优化余下的其他变量。这种做法可以一直持续直到只剩余一个变量为止。最后的误差和不应当与完善前的初始值偏差太大。完善的参数比用许多非零的数字完善的要更容易控制。第二类完善的有效评论是变量不是无量纲的。因此，如果阿伏加德罗数改变了，变量必须同时跟着变化，并且它们不能再在结尾带零。

## 12.2.8 交互式的改变需要重编译

从初始的 SETUP 和 POP 文件中交互式地改变几乎所有内容是很可能的。比如，我们可以增加更多的待优化参数，修改或者添加更多的实验信息。但是，有些改变会破坏数据结构，因此要求实验数据文件(POP)需要进行重新编译。进行这样改变的一个实例是，给一个相增加更多的成分设置。这样实际上改变了相的数量，并且会破坏实验数据和热力学模型之间的联系。因此 POP 文件必须进行重新编译，于是 POP 文件反映 ED\_EXP 模块中交互式的变化就显得很重要了。

重编译 POP 文件的一个实际问题可能也是实验平衡要用所有成分的缺省初始值进行计算。在一些体系中，平衡要求手动赋初始值，POP 文件的重编译可能要求仔细的对实验平衡推算使其再次会聚。为了简化重编译，推荐设置相的主要成分与缺省的初始值中的成分相同（详情请参阅 GES 用户指南的第 11.12.2 节）在 POP 文件中提供相成份的初始值是可能的。

## 12.3 交替模式

PARROT 模块使用的用来优化热力学模型参数的信息代表了体系中平衡的测量量。测量量可以在单相区，比如，活度或者焓，或在两相区中，比如，溶解度或者转变温度，抑或在涉及多于两相的区域中。在每个平衡中，除了决定平衡状态的那些必需的量之外，至少一个量必须已经测量。对于在一个单相区的二元体系来说，用户可能已经测量了温度，压强，成分和化学势。这些量中的三个对于确定平衡状态是必要的，第四个能用作实验信息用于相的模型确定。在一个给定了温度和压强的两相区中，我们可能已经确定了稳定相和一个或两个相的成分。温度、压强和相的集合对于决定平衡已经足够了，因此成分可以作为实验数据使用。

自从 TCCQ 出现以来，改进了的 ALTERNATE 模式就具有与交替计算一起评估的功能，并且能够为每个实验平衡选择 ALTERNATE 模式。

### 12.3.1 公切线构造

当相的模型参数确定很不合理时，计算两个或更多相的平衡可能会存在问题，这种情况是很容易理解的。平衡计算要求我们能够找出一个“公切线”，即，所有成分的化学势在所有相中都相同。这样一个公切线在初始的一套模型参数下的一个完全错误的成分或温度下并不存在。关于公切面和驱动力的具体细节，请参阅 3.2.15 节和图 3.1。

取代要求在两相或更多相之间计算平衡，现在 PARROT 支持一项“交替”技术来计算这些实验信息。这项交替技术分别计算每个相的热力学性质，并且程序将每个相成分中化学势的差别用作“实验信息”。调整模型参数以使所有成分的化学势都相同。这并不是一项新技术，在早期的 PARROT 中用这种方式来描述平衡已经成为可能，只不过比较麻烦和困难。在 BINGSS 软件中，IVERS=1 或者 IVERS=3 的选项从一开始就可以使用，这中选择使用与交替技术相同的技术分别计算每个相的化学势而不是整个平衡。

### 12.3.2 交替模式下 POP 文件的准备

具有两相或更多稳定相的实验平衡的交替计算，是由 PARROT 模块中的 SET-ALTERNATE-MODE Y 命令序列来设置的。POP 文件通常会要求额外的信息来处理此选项，因为必须有足够的信息来分别计算每个相。比如，如果一个二元共轭线的两个成分都已经测量，此实验信息可在 POP 文件中用以下的形式给出：

```
CREATE 1 1
CH-ST PH FCC BCC=FIX 1
SET-COND P=1E5 T=1000
EXPERIMENT X(BCC,B)=.2:.01 X(FCC,B)=.3:.01
```

以上的平衡可在无任何修改的前提下用交替模式进行计算。计算每个相的热力学性质时，PARROT 将以 EXPERIMENT 给出的数值作为条件。但是，如果只有共轭线的一侧已经测量，我们必须提供另外一个相的成分的估计值。这可以由 POP 文件中的 SET-ALTERNATE-CONDITION 命令添加。除非已经设定交替模式，否则 SET-ALT-COND 命令是忽略的。与上面相同的例子如下：

```
CREATE 1 1
CH-ST PH FCC BCC=FIX 1
SET-COND P=1E5 T=1000
EXPERIMENT X(BCC,B)=.2:.01
SET-ALT-COND X(FCC,B)=.3
```

当 PARROT 计算 BCC 相的热力学性质时，它会用 EXPERIMENT 命令提供的成分，当计算 FCC 时，它会利用 SET-ALT-COND 命令提供的成分。

交替模式应当只用在评估的开始阶段，是在得到合理参数足以用常规方式计算实验平衡以前。但是如果用该交替模式，将大大减轻初学者的负担，因为在常规模式下猜想初始值需要很多技巧和经验。

### 12.3.3 SET\_ALTERNATE\_CONDITION 命令的更多例子

一个三相平衡可能有某些实验决定的成分，另外一些可由提供为交替条件：

```
CREATE 1 1
CH-ST PH FCC BCC LIQ=FIX 1
SET-COND P=1E5
EXPERIMENT T=912:5 X(LIQ,B)=0.2:.02
SET-ALT-COND X(FCC,B)=0.1 X(BCC,B)=.4
```

然而，下面的实验不能转变为交替模式：

```
CREATE 1 1
CH-ST PH BCC LIQ=FIX 1
SET-COND P=1E5 T=1111
SET-REF-STATE B LIQ * 1E5
EXPERIMENT MUR(B)=-4300:500
```

原因是没有关于这两个相的成分信息，且即使这些成分信息可用 SET-ALT-COND 来添加，交替模式会为每个相保持 5 个条件，而不是正确的 4 个条件，因为交替模式会为这两个相都保留 MUR(B) 条件。Thermo-Calc 以后的发行中，交替模式可能能够处理这种情况。

一个化学计量相的成分必须精确到七位有效数字，比如：

```
CREATE 1 1
CH-ST PH LIQ A2B=FIX 1
SET-COND P=1E5 X(LIQ,B)=0.2
EXPERIMENT T=992:5
SET-ALT-COND X(A2B,B)=.6666667
```

注意，交替模式将忽略相状态为 ENTERED 或者 DORMANT 的平衡的实验信息。

## 12.4 技巧和处理

每个评估员将发展自己与 PARROT 的关系，因为该软件有很多特色。然而，即使在用户建立与 PARROT 的紧密 关系之前，仍然有某些可能有用的通常技巧。

- 1) 用尽可能少的实验获得一个合理而完全符合的值。特别是，对于零变平衡很有用，亚稳态可通过排除一些相来估计。评估的平衡在最终的优化中应当排除在外。
- 2) 如果在一个体系中有 100 个活度测量值，但是只有 10 个相图中的组分点，我们可能不得不降低实验活度的权重。
- 3) 起始阶段排除一些或者全部中间相，只优化液相和最终的（端组元）相（对于纯组分）可能会很有用。通常只用这些相计算亚稳相图或者在优化的较后阶段计算亚稳相图，是一件有意义的事情。亚稳溶解度线不应当有任何奇异扭结和转角。
- 4) 有溶解度间隙的相以及亚稳相通常是有疑问的。尽量用一些真实的或者估计的实验信息来控制这些溶解度间隙。不幸的是，要作为单个平衡来计算一个溶解度间隙的顶部是不可能的。
- 5) 含有有序/无序转变的相也是有疑问的。它们要求时不时的手动起始值，且有时有序的状态可能在优化过程中会消失。添加一个控制顺序状态的实验可能会有帮助。
- 6) PARROT 中的一大新特色是交替模式，从来还没有人在这方面有丰富的经验。它应只用于查找初始模型参数来用于在通常模式下，这些参数能够使实验平衡在正常模式中计算。
- 7) 液相和某些溶液相非常吻合后，描述这些相的优化变量可以固定，优化中间相的变量。
- 8) 包含所有变量和实验信息的最终优化以及合适的权重应当实现。
- 9) 应当不断的检验确保优化变量在一个合理的值域内。当一个变量在优化过程中开始以几个数量级的倍数变化时，我们必须重新考虑实验权重以及是否用了过多的参数。

### 12.4.1 矛盾数据

有些情况下，我们可能会碰到对于同样的量，其测量值却有很大不同。原则上，所有可用的实验数据应当输入到 POP 文件中，除非有明显的原因，例如，实验中用的不是纯样品，对于这样的数据，某些数据集合可被拒绝。

但在优化过程中,我们不当同时两套相矛盾的数据同时纳入我们的优化中而只用其中的一套数据与另外的数据。以下是来自 Bo Jansson 的一个简单规则:如果你有两套相冲突的数据库,那么其中只有一个是正确的或者两个都是错误的。不可能两个都正确。

希望,优化可以弄清哪组数据与体系中的其它信息最一致。

也有一些情况下,不能直接辨别出数据存在矛盾。比如,活度数据可能不能与相图中的溶解度数据相调和。这表现在优化中,即当两组数据都被拟合时,便显示很大的误差。因此有必要尽力用不包含这些不一致数据的数据库来进行优化。

## 12.4.2 缺少数据或者不合适的数据

有些体系中,数据很少。这并不意味着我们可以不考虑可能的误差而认为其高精度,不加鉴别的拟合现有数据。我们可以从有类似元素的体系中寻找数据来合理估计缺少的数据,也可以使用第一性原理计算或者半经验方法来估计。

## 12.4.3 估计时间

我们可以说,对于一个复杂的体系,我么几乎不可能获得一个十全十美的评估结果,特别是要考虑时间时。花费在评估上的时间可以粗略估计如下:

- ◆25%的时间用于收集现有的实验数据并创建 POP, SETUP 和 EXE 文件,校正并且对它们进行更新;

- ◆25% 的用于“优化权重”以找到各种实验信息间的正确平衡,同时还可以选择实验信息的一套临界集;

- ◆ 25% 的用于优化参数值;

- ◆ 25%的用于写报告。当我们发现优化过程中的一个选择或者决定不能在报告中给出解释或者辩护时,通常我们必须返回并且进行重新优化。

## 12.4.4 参数的数目

通常,得到相同水平的拟合程度所用的调整变量越少,优化结果被认为越好。当然,到底是需要 24 个还是 25 个参数的关系也不是太大。

但是如果能以 8 个参数来代替 12 个来获得几乎同样的拟合程度,那么这个用 8 个参数的评估就是一个更好的拟合。然而,一个评估中,我们可能对不同的信息给以不同的权重,从而导致很难比较不同的评估。比如,Fe-Al 体系可能是一个人结合 Al 数据库估计的,而另外一个人用的却是 Fe 的数据库。评估员很可能在哪个信息更应该来拟合的问题上持有不同的观点,从而可能得出一个迥乎不同的参数数目。

使用少量参数的另一个重要原因,就是评估要用于外推更高阶的体系。由经验可知,二元体系中用的参数越少,在更高阶体系中出现的问题就会越少。

## 12.5 命令结构

### 12.5.1 一些术语的定义

一个模型参数，即 GES 中的一个 TP-函数在 PARROT 模块中被称作一个“PARAMETER”。能被优化的实体必须有一个单个的数字值，称作“VARIABLE”。目前的 PARROT 模块版本中，99 个变量，从 V1 到 V99 都被预先定义了。变量被输入到 GESS 工作区的符号列中，从而可在 PARROT 工作区中用于模型参数的表达定义。变量也可以用 IMPORT 命令用于平衡描述。在一次优化中，用户可以为变量指定固定值，或者估计它们的“最佳”值。开始时，所有的变量的初始值都为零。

### 12.5.2 联系其他模块的命令

PARROT 工作区与 GESS, POLY3 和 DICTRA 工作区有很紧密的联系。一个 PARROT 工作文件 (\*.PAR)通常同时包含与 PARROT, GES, POLY 和 DICTRA 模块相关的部分。

系统定义(\*SETUP)文件通常会初始化 PARROT 工作区,以及与 PARROT 工作区关联的 GES5 和 POLY3 工作区。

因为 ED\_EXP 模块实际上是 PARROT 模块的一个子模块，因此任何 ED\_EXP 命令或实验数据 (\*.POP)文件命令的执行都会在 PARROT 工作区进行修正。

图形实验数据(\*.EXP)不会影响 PARROT 工作区。

为方便用户，GES 命令在 PARROT 模块中也是可用的。

### 12.5.3 用户界面

PARROT 模块的用户界面是分时计算机的交互式对话形式。其用户界面的主要特色是一个命令处理器，用户可以通过键入合适的命令来控制程序的运行。

PARROT 模块的命令通常由中间用连字符“-”或者下划线“\_”字符分开的几个字符组成。连字符和下划线在此是等价的。命令可用省略形式直至变得模棱两可，连字符或下划线之间的每一部分也可缩写。如果对命令间不需要区分，命令的结尾可以省略。

许多命令要求具体化一些参数。如果在命令后按下了<RETURN>键，程序会索要这个值。通常程序在“//”间给出建议的缺省值，用户可以只通过点击<RETURN>键接受这个值，或者用户指定另外一个值。如果用户知道一个命令需要的参数顺序，所有的参数值可以用命令的形式在同一行中输入。

## 12.6 常规命令



这些命令几乎在所有的 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件模块中都能找到。除了以转换模式显示信息的 INFORMATION 命令之外，所有这些命令在不同模块中一般执行的情况相同。

一般情况下有两个帮助命令。然而，最重要的帮助工具是键入一个问号——“？”，可在任何时候你不是彻底明白，需要问问题时用。然后程序会给我们一个关于输入程序的简明描述。有些情况下，通过键入两个问题标记，“？？”，可以获得更广泛的描述。

## 12.6.1 GOTO\_MODULE

**说明：** 此命令用于转换模块。必须键入所需模块的名字。为获得一系列可用模块，按下<RETURN>键（请参考第 5.4.11 节）。

**摘要 1：** GOTO\_MODULE <模块名>

**摘要 2：** GOTO\_MODULE

**接下来的提示：** MODULE NAME:

```
NO SUCH MODULE, USE ANY OF THESE:
SYSTEM_UTILITIES
GIBBS_ENERGY_SYSTEM
TABULATION_REACTION
POLY_3
BINARY_DIAGRAM_EASY
DATABASE_RETRIEVAL
REACTOR_SIMULATOR_3
PARROT
POTENTIAL_DIAGRAM
SCHEIL_SIMULATION
POURBAIX_DIAGRAM
TERNARY_DIAGRAM
MODULE NAME: <模块名>
```

**选项：** 模块名——接着要打开的模块的名称。

## 12.6.2 HELP

**说明：** 该命令列出可用的命令或者给出一个具体命令的解释。

**摘要 1：** HELP <模块名>

**摘要 2：** HELP

**接下来的提示：** COMMAND: <模块名>

**选项：** 命令名——获得帮助的命令的名字（PARROT 模块命令的一个）。

**备注：** 在不键入命令名情况下按下<RETURN> 键，会列出所有可用的 PARROT 命令。指定一个独特的命令，能在屏幕上打印出此命令的解释（通常能在 User's Guide 中找到相同的文本）。



键入一个不是唯一的命令的缩写会列出所有与之相关的命令。所需命令信息可通过键入一个独特的缩写或者其完整命令名获得。

### 12.6.3 INFORMATION

**说明:** 关于各种 PARROT 主题（概念和模型）的基本信息可以通过该命令获得，它们在本章的不同部分都有描述。

**摘要:** INFORMATION

接下来的提示: WHICH SUBJECT /PURPOSE/: <主题名>

必须给出主题名。各种主题的广泛信息，如下表所示（可通过键入“？”来看到此列表）:

---

|                          |                          |                      |
|--------------------------|--------------------------|----------------------|
| INTRODUCTION             | GETTING STARTED          | OPTIMIZING PROCEDURE |
| DATAMANAGEMENT AND FILES | DEFINITION OF SOME TERMS |                      |
| USER INTERFACE           | ALTERNATE MODE           |                      |

---

### 12.6.4 BACK

**说明:** 该命令切换回到最近的模块。请参看 GOTO\_MODULE 。

**摘要:** BACK

### 12.6.5 SET\_INTERACTIVE

**说明:** 该命令重新设置输入和输出单元回到其初始值，即，键盘和屏幕。要记得将其作为最后一个命令添加到你的 MACRO 文件中。

**摘要:** SET\_INTERACTIVE

### 12.6.6 EXIT

**说明:** 该命令终止程序，并返回到操作系统。除非已经执行了 SAVE 命令（无论在 GES,POLY 还是 PARROT 模块中），所有的数据和结果都将丢失。

**摘要:** EXIT

## 12.7 最常用的命令

### 12.7.1 CREATE\_NEW\_STORE\_FILE

**说明:** 用户必须在做任何优化之前创建一个文件，用作一个“工作”文件（或称为存储文件）。用于 GES, POLY 和 PARROT 模块的工作区会被自动的存储在此工作文件中，但不是任何的实验信息。这个工作文件在 Windows 和 UNIX/Linux 环境下有一个缺省扩展名“**.PAR**”。特别注意，此文件依赖硬件，且不能被任何文本编辑器阅读。

一个已在之前运行中创建了的工作文件通过另外一个命令 SET-STORE-FILE 用于 PARROT 模块中（请参看第 12.7.2 章节）。

**摘要:** CREATE\_NEW\_STORE\_FILE

**接下来的提示:** STORE FILE /ABCD/: <文件名>

在 UNIX 和 Linux 环境下，该提示应当用当前 PARROT/GES5/POLY3 工作区正写入的所要求的存储文件的名称来具体说明。如果个工作文件在之前已被创建（用这个命令），或者设置（用 SET-STORE-FILE 命令）或者打开过（用 READ\_WORKSPACE 命令），它的名字就会设置为缺省。Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 系统下，会突然出现如图 12.1 所示的一个“Save As”窗口。用户应当在“**File name**”一栏中给出文件名，并指定其保存路径。通常“**Save as type**”一栏中缺省的文件类型适合 PARROT 工作区格式（比如 PAR 文件）。

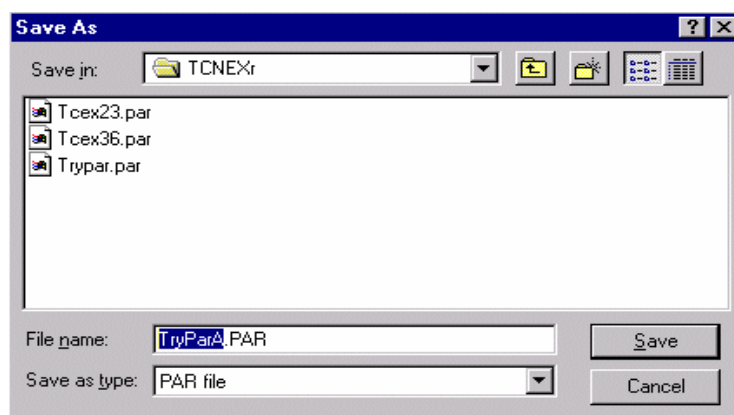


图 12-1. “Save As”窗口：创建一个存储工作文件。

如果已经有了一个名字相同的 PAR 工作文件存储在当前工作目录中，如图 12.2 所示的带有警告消息的一个小屏幕 会突然出现。用户需要选择 Yes 按钮继续执行替换以前 PAR 文件，或者选择 No 按钮取消当前保存。

对于后者，用户可以给出另外一个名字，或者改变保存路径以保存当前 PARROT 工作区到一个文件中。

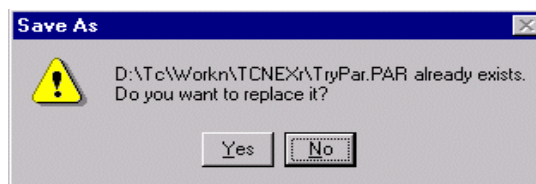


图 11-2. “Save As”警告窗口:继续或者取消当前创建。

## 12.7.2 SET\_STORE\_FILE

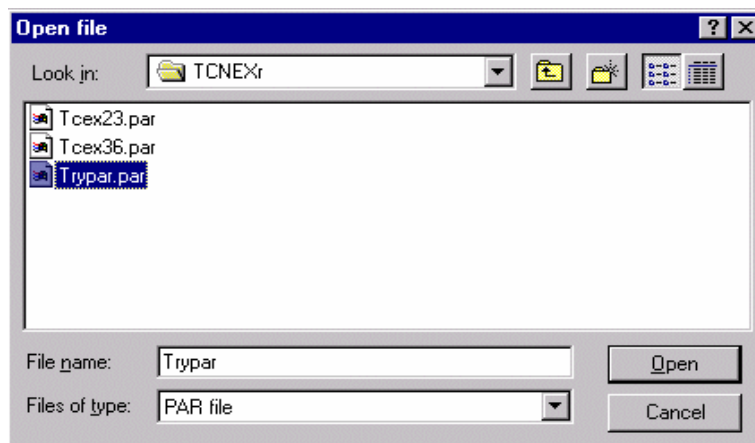
**说明:** 用户能用该命令确定一个用于编译和优化的存储文件（工作文件）。此文件必须作为存储文件已被创建，请参看 CREATE-NEW-STORE-FILE 命令。用于 GES, POLY 和 PARROT 的工作区是从确定的存储文件（缺省名为“.PAR”）中读取的。

**摘要:** SET\_STORE\_FILE

**接下来的提示:** STORE FILE /ABCD/: <文件名>

UNIX 和 Linux 系统下，此提示应当用之前 PARROT/GES5/POLY3 工作区读取的已存储的存储工作文件名详细说明。如果个工作文件之前已被设置（用此命令）或者被打开过（用 READ\_WORKSPACE 命令），它的名字将会设置为缺省。

Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下，会突然出现如图 12-3 所示的一个“对话”窗口。用户应当在“文件名”一栏中给出名字，以待在“浏览”一栏中保存此文件到目的目录时能进一步具体化此工作目录。通常“文件类型”一栏缺省的文件类型比较适合 PARROT 工作区格式（比如，



PAR 文件）。

图 11-3. “对话”窗口:设置一个存储 PARROT 工作区文件。

### 12.7.3 COMPILE\_EXPERIMENT

**说明:** 以 POLY 和 ED\_EXP 语法命令形式给出的保存在 POP 文件中的实验平衡的描述，将通过该命令编译成 PARROT 结构数据（也就是，存储在已被创建或者打开抑或设置优先于此命令的当前工作文件中）

注意，如果发现了命令中的一个语法错误，该编译将会终止，用户需要用一文本编辑器校正 POP 文件中的这个错误，并且将工作（存储）文件重新编译。

**摘要:** COMPILE\_EXPERIMENT

**接下来的提示:** INPUT FILE /ABCD/: <文件名>

UNIX 和 Linux 系统下，该提示应当用实验数据文件(POP) 名具体化，在这个文件中，该命令将读取和编译所有的实验平衡信息。如果一个 POP 文件之前已被编译（用该命令），它的名字会设置为缺省。

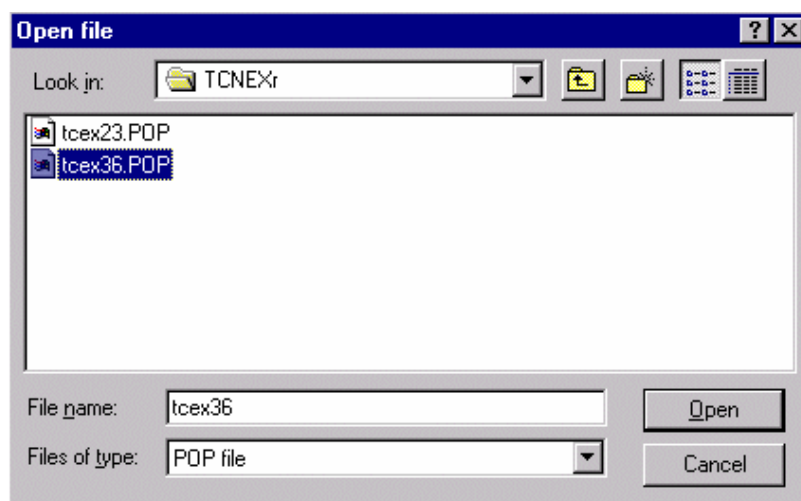
Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 系统下，会突然出现一个如图 12-4 所示的“*对话*”窗口。用户应当在“文件名”一栏中给出名字，以待在“浏览”一栏保存此文件到目的目录时能进一步的具体化此工作目录。通常“文件类型”一栏中缺省的文件类型很适合实验数据格式（比如，POP 文件）。

OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/: <文件名>

POP 文件中的一列源代码和编译中的错误消息将会显示在屏幕上（通过按下<RETURN>）或者保存在一个以后可以打开并且能用简单文本编辑器编辑的有具体文件名的目录文件中。

INITIATE STORE FILE /Y/: <Y 或者 N>

成功编译后，POLY3 工作区中的数据作为一个新的平衡数据块存储在当前工作（存储）文件中。如果用户确定此存储文件应当在编译之前初始化（Y），那么只有此编译数据块会被存储在当前工作文件中（因此，此 \*.PAR 文件会被更新）。如果这里选择了否定的答案（N），当前工作



文件不会被改变。

图 11-4. “对话”窗口: 打开一个实验数据\*.POP 文件。

## 12.7.4 SET\_ALTERNATE\_MODE

**说明:** 该命令可以打开或关闭交替模式。该交替模式在别处有详细的描述。它只应当在评估初始阶段用来优化模型参数的初始值。  
TCCQ 版本以来, 改进的交替模式可以包含与交替计算一起的待求值的函数, 并且为每个实验平衡选择交替模式。

**摘要:** SET\_ALTERNATE\_MODE

**接下来的提示:** On /Y/: <Y 或者 N>  
缺省的答案 Y 会打开该交替模式。其他的任何一个操作都关闭它。

## 12.7.5 SET\_OPTIMIZING\_VARIABLE

**说明:** 用户使用该命令能够指定优化时应该估计哪个变量值。这样一个变量, 其值可能为零或者另外一个起始值, 抑或可能由在之前的优化运行中的 SET-FIX-VARIABLE 命令确定了一个固定值(请参看第 12.7.6 章节)。在执行此命令之前, 对于一个好的参考而言, 所有变量列(预先输入到 SETUP 文件中, 或者在 GES 模块中交互式输入, 在优化系统中已用于定义各种相参数)可以通过使用 LIST-ALL-VARIABLE 命令来获得(请参看第 12.7.11 章节)。

**摘要:** SET\_OPTIMIZING\_VARIABLE

**接下来的提示:** VARIABLE NUMBER: <变量号>  
指定待设置的变量的号码。任何一个在此范围内的非零参数都会被优化。  
一个带有当前值等于零的参数必须明确指定后才能优化。  
我们可以通过给出由一个连字符连接的两个数指定一个范围(中间不能有空格), 比如, 2-8。这种情况下, 就不会再问初始值的问题了。  
START VALUE /xxxx.xxxxx/: <一个猜测值>

指定一个最佳值的起始猜测值(只是在一个变量号码在之前提示中已经予以指定时)。当前选定变量的数值将会以缺省的形式显示。  
请注意这个猜测非常关键, 因为所有参数的初始推测必须使选定的平衡有可能计算。  
如果变量号码的范围在之前的提示中已经给予确定, 这个问题就不必要提示了, 并且它们的当前值(作为起始值)不会再改变。

## 12.7.6 SET\_FIX\_VARIABLE

**说明:** 用户可以指定一个变量的固定值。这个变量会作为优化中的一个常量来考虑。通常，我们可以在一些具体变量（对于体系中的一些相）的成功优化的运行后，进行这种操作。这些固定的变量也可以用 SET-OPTIMIZING-VARIABLE 命令返回作进一步的优化。（请参看第 12.7.5 章节）

**摘要:** SET\_FIX\_VARIABLE

**接下来的提示:** VARIABLE NUMBER: <变量号码>

指定变量的号码。给出用连字符间隔的两个数字（不能有空格）可以给出一个范围。例如，2-8。范围内的参数将会被设置固定为它们当前的值。

START VALUE /xxxxx.xxxxxx/: <待确定的一个值>

为选定的变量指定一个待确定的数值（只是在之前提示中变量数目已经给予了详细说明时）。选定变量的当前值会以缺省的形式显示。

如果一个变量数目范围在之前的提示中已经予以了详细说明，就不会提示此问题了，并且它们的当前值会当作定值使用。

## 12.7.7 EDIT\_EXPERIMENTS

**说明:** 通过使用该命令，编辑实验平衡的子模块，即，ED\_EXP 模块，就变得可用了。POP 文件编译的所有实验平衡可以在 ED\_EXP 模块中访问。该 ED\_EXP 模块与通常的 POLY 模块相似，但是有些特殊的命令，一些 POLY 命令也不能在此使用。在 ED\_EXP 模块中，用户可以分别或者一起计算每个平衡，为不能收敛的平衡提供起始值，设置权重，修改实验值或者条件。详情请参阅 ED\_EXP 模块，第 13 章。

**摘要:** EDIT\_EXPERIMENTS

## 12.7.8 OPTIMIZE\_VARIABLES

**说明:** 该命令执行变量的优化。所有优化需要的体系定义数据将会从当前工作文件 (PAR) 中读取。优化的结果自动保存在当前工作文件中。

**摘要:** OPTIMIZE\_VARIABLES

**接下来的提示:** NUMBER OF ITERATION /n/: <叠加次数>

为重复的优化指定一个整数。之前指定的叠加次数作为默认值。PARROT 程序会尝试执行优化变量的这些不同值集，除非它提前聚集在一点，或者提早放弃了。注意此命令开始时会在每个变量处采取小的一步以找到最陡峭的斜坡。我们可以给出零重复来计算所有选定实验的误差，然后使用 LIST-RESULT 命令检测当前的拟合的好（坏）程度。

## 12.7.9 LIST\_RESULT

**说明:** 使用该命令，当前优化运行的结果会在屏幕或者一个具体的文件中列出。  
SET\_OUTPUT\_LEVELS 命令可以设定运用此命令列出的具体细节细节。（请参看第 12.8 章节）TCCQ 以来，LIST\_RESULT 命令有一个用两列创建实验数据文件的选项 G，一列是实验值，另一列是计算值。它允许绘制图表并观察拟合结果。

输出通常包括以下部分：

- ◆ 显示操作数据的标题；
- ◆ 带有在上次优化中的重复数目的成功优化消息；
- ◆ 优化条件的一段描述；
- ◆ 一列最后优化和固定的变量；
- ◆ 描述优化质量的一段说明（一些统计信息）；
- ◆ 所有优化变量（随机显示，SET\_OUTPUT\_LEVEL 命令预先设置）的相关系数矩阵；
- ◆ 所有参数的列表（包括它们的符号名，状态和当前值或者函数表达），以及为体系中每个相预先定义的相的描述（包括相名称，模型名，组成成分和相的 G/L/TC/BM 表达）。（这些随机显示，由 SET\_OUTPUT\_LEVEL 命令预先设置）；
- ◆ 一段对交替平衡（和优化过程中可能的误差）的描述；
- ◆ 当前优化中使用的所有平衡点的一个详细列表。如果在优化中使用过交替模式，那么只显示一个误差值。对于正常计算模式，会显示一列实验平衡号码（第一列）及相关原始实验数据（第二列，以“量=值”的形式显示），这些在优化中已经使用过（即，非零的权重点）。最后优化后这些实验数据在每个点都与计算值作了比较（第三列）。实验误差也会列出（第四列），计算值和原始实验数据之间的差异（第五列），以及对最小平方和的贡献（第六列）都会列出。

**摘要:** LIST\_RESULT

**接下来的提示:** FULL, CONDENSED OR GRAPHIC FORMAT: /C/: <F 或 C 或 G>

确定一个要求的格式（F 代表 Full，C 代表 Condensed，或者 G 代表 Graphical）。C 格式是默认的。完整格式(F) 现在已被淘汰，但是为保持以后的兼容性，这个问题依然保留着。G 格式，是 TCCQ 以后新出现的，创建一个包含两列的实验数据文件，一个带有实验值，另外一个带有计算值。如果拟合很好的话，它允许绘制一个图标，其中所有符号在对角线处，绘制图表。

OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/: <文件名>



当前优化结果的列表会显示在屏幕上（通过按下<RETURN>）或者保存在有详细文件名的目录文件中，以后可以打开并用一个简单的文本编辑器编辑）。

**输出例子:** 以下是基于 TCEX36a 和 TCEX36b.TCM 中予定义的第一次优化之后，但已经为优化设置了所有的变量后，TCEX36 例子中列出的结果，。

```
=====
OUTPUT FROM P A R R O T. DATE 2000. 8.17 17:10: 3
=====

*** SUCCESSFUL OPTIMIZATION. ***
NUMBER OF ITERATIONS: 10

== OPTIMIZING CONDITIONS ==

RELATIVE STANDARD DEVIATIONS FOR EXPERIMENTS: N
MINIMUM SAVE ON FILE: Y
ERROR FOR INEQUALITIES = 1.00000000E+00
RELATIVE STEP FOR CALCULATION OF DERIVATIVES = 1.00000000E-04
ARGUMENTS FOR SUBROUTINE VA05AD (HSL)
MAXFUN = 1 DMAX = 1.00000000E+02 H = 1.00000000E-04
ACC = (INITIAL SUM OF SQUARES) * 1.00000000E-03

== OPTIMIZING VARIABLES ==

AVAILABLE VARIABLES ARE V1 TO V00

VAR. VALUE START VALUE SCALING FACTOR REL.STAND.DEV
V1 2.03749463E+04 2.03729090E+04 2.03729090E+04 3.41455863E+00
V2 -2.94286372E+01 -2.94286372E+01 -2.94286372E+01 2.37944774E+00
V11 -2.17395673E+04 -2.17373936E+04 -2.17373936E+04 3.98405298E-02
V12 1.52107184E+01 1.52107184E+01 1.52107184E+01 5.82861832E-02
V15 2.42106560E+04 2.42082351E+04 2.42082351E+04 5.07239609E+00
V16 -8.38723972E+00 -8.38723972E+00 -8.38723972E+00 1.69546796E+01
V17 3.08947424E+03 3.08916533E+03 3.08916533E+03 9.85220694E+00
V19 2.20314615E+04 2.20292586E+04 2.20292586E+04 4.16329629E+01
V20 -7.04217974E+00 -7.04217974E+00 -7.04217974E+00 1.03161466E+02

NUMBER OF OPTIMIZING VARIABLES : 9
ALL OTHER VARIABLES ARE FIX WITH THE VALUE ZERO
THE SUM OF SQUARES HAS CHANGED FROM 8.00002719E+04 TO 8.00002709E+04
DEGREES OF FREEDOM 45. REDUCED SUM OF SQUARES 1.77778380E+03
```

## Thermo-Calc 用户指导书

Number of alternate equilibria 14

| SYMBOL  | STATUS   | VALUE/FUNCTION   |
|---------|----------|------------------|
| 1 R     | 80000000 | 8.3145100E+00    |
| 2 RTLNP | 20000000 | +R*T*LN(1E-05*P) |
| 3 V1    | 48000000 | 2.0374946E+04    |
| 4 V2    | 48000000 | -2.9428637E+01   |
| 13 V11  | 48000000 | -2.1739567E+04   |
| 14 V12  | 48000000 | 1.5210718E+01    |
| 17 V15  | 48000000 | 2.4210656E+04    |
| 18 V16  | 48000000 | -8.3872397E+00   |
| 19 V17  | 48000000 | 3.0894742E+03    |
| 21 V19  | 48000000 | 2.2031462E+04    |
| 22 V20  | 48000000 | -7.0421797E+00   |

### LIQUID

EXCESS MODEL IS REDLICH-KISTER\_MUGGIANU

CONSTITUENTS: A,B

$$G(\text{LIQUID},A;0)-G(\text{BCC},A;0) = 500.00 < T < 2000.00: +14000-10*T$$

$$G(\text{LIQUID},B;0)-G(\text{BCC},B;0) = 500.00 < T < 2000.00: +18000-12*T$$

$$L(\text{LIQUID},A,B;0) = 500.00 < T < 2000.00: +V11+V12*T$$

$$L(\text{LIQUID},A,B;1) = 500.00 < T < 2000.00: +V13+V14*T$$

### A2B

2 SUBLATTICES, SITES 2: 1

CONSTITUENTS: A : B

$$G(\text{A2B},A:B;0)-2 G(\text{BCC},A;0)-G(\text{BCC},B;0) = 500.00 < T < 2000.00: +V1+V2*T+V3*T*LN(T)$$

### BCC

EXCESS MODEL IS REDLICH-KISTER\_MUGGIANU

CONSTITUENTS: A,B

$$G(\text{BCC},A;0)-G(\text{BCC},A;0) = 500.00 < T < 2000.00: 0.0$$

$$G(\text{BCC},B;0)-G(\text{BCC},B;0) = 500.00 < T < 2000.00: 0.0$$

$$L(\text{BCC},A,B;0) = 500.00 < T < 2000.00: +V15+V16*T$$

$$L(\text{BCC},A,B;1) = 500.00 < T < 2000.00: +V17+V18*T$$

### FCC

EXCESS MODEL IS REDLICH-KISTER\_MUGGIANU

CONSTITUENTS: A,B

## Thermo-Calc 用户指导书

```

G(FCC,A;0)-G(BCC,A;0) = 500.00<T< 2000.00: 408
G(FCC,B;0)-G(BCC,B;0) = 500.00<T< 2000.00: +3300-3*T
L(FCC,A,B;0) = 500.00<T< 2000.00: +V19+V20*T
L(FCC,A,B;1) = 500.00<T< 2000.00: +V21+V22*T

===== BLOCK NUMBER 1

DEFINED CONSTANTS
 DX=2E-2, P0=101325, DH=500, DT=10
DEFINED FUNCTIONS AND VARIABLES%
 HTR=HM(LIQUID)-HM(A2B)
1 Alternate equilibrium calculation 0.4183
2 Alternate equilibrium calculation 0.1932
3 Alternate equilibrium calculation 0.1016
4 Alternate equilibrium calculation 1.4354E-03
5 Alternate equilibrium calculation 2.5063E-02
6 Alternate equilibrium calculation 8.3929E-03
10 Alternate equilibrium calculation 141.4
11 Alternate equilibrium calculation 141.4
12 Alternate equilibrium calculation 141.4
13 Alternate equilibrium calculation 141.4
20 Alternate equilibrium calculation 1.2532E-03
21 Alternate equilibrium calculation 5.4781E-04
22 Alternate equilibrium calculation 1.5404E-03
23 Alternate equilibrium calculation 1.2702E-03
100 ACR(B)=9.4E-1 0.9397 2.85E-02 -2.7745E-04 -9.7472E-03
101 ACR(B)=8.4E-1 0.8395 2.82E-02 -4.9038E-04 -1.7396E-02
102 ACR(B)=7.4E-1 0.7407 2.81E-02 7.3804E-04 2.6305E-02
103 ACR(B)=6.4E-1 0.6424 2.81E-02 2.3935E-03 8.5272E-02
104 ACR(B)=5.4E-1 0.5434 2.82E-02 3.4449E-03 0.1220
105 ACR(B)=4.4E-1 0.4428 2.85E-02 2.8265E-03 9.9024E-02
106 ACR(B)=3.4E-1 0.3394 2.90E-02 -5.8174E-04 -2.0040E-02
107 ACR(B)=2.3E-1 0.2320 2.97E-02 2.0260E-03 6.8208E-02
108 ACR(B)=1.2E-1 0.1194 3.06E-02 -6.4192E-04 -2.0981E-02
110 HMR(LIQUID)=-1964 -1957. 5.00E+02 7.439 1.4878E-02
111 HMR(LIQUID)=-3500 -3478. 5.00E+02 21.67 4.3338E-02
112 HMR(LIQUID)=-4588 -4565. 5.00E+02 22.69 4.5382E-02
113 HMR(LIQUID)=-5239 -5217. 5.00E+02 21.50 4.3008E-02
114 HMR(LIQUID)=-5454 -5435. 5.00E+02 19.11 3.8216E-02
115 HMR(LIQUID)=-5233 -5217. 5.00E+02 15.50 3.1008E-02
116 HMR(LIQUID)=-4575 -4565. 5.00E+02 9.691 1.9382E-02
117 HMR(LIQUID)=-3481 -3478. 5.00E+02 2.669 5.3385E-03
118 HMR(LIQUID)=-1950 -1957. 5.00E+02 -6.561 -1.3122E-02

```

---

## 12.7.10 CONTINUE\_OPTIMIZATION

**说明:** 此命令通过使用同一个海赛矩阵继续优化。  
 注意在某些情况下，试图继续优化是不合法的。比如，如果优化已经会聚了，或者当前优化中的优化参数或使用的实验平衡集在运行中已经改变了。如果用户在可能已经做了一些改变后，仍试图继续，程序就会给出一个警告信息。

**摘要:** CONTINUE\_OPTIMIZATION

**接下来的提示:** Are you sure? /N/: <N or Y>  
 在这个问题之前，以下消息会出现在屏幕上提示用户是否确信安全继续(Y)或者否(N):

```
It is safe to CONTINUE only after TOO MANY ITERATIONS
and no change in variables and experiments ...
Now anything can happen ...
```

我们可以总是接受此缺省的答案(N)，以取消此特殊尝试。  
 迭代次数/n/: <重复的次数>  
 指定重复优化的迭代次数。之前已经指定的迭代次数以缺省的形式显示。  
 PARROT 程序会在不停止优化的前提下，即使它可能已经提前会聚了或者是提前放弃了，仍准确尝试这些不同值的集。

## 12.7.11 LIST\_ALL\_VARIABLES

**说明:** 该命令会在屏幕上或者一个文本文件中，产生一个 PARROT 工作区中所有变量值的列表和状态。优化后同时写入了一些统计信息。若已选定此选项，相关系数矩阵也同时写入，详情请参看 SET\_OUTPUT\_LEVELS 命令（第 12.8.1 章节）。

**摘要:** LIST\_ALL\_VARIABLES

**接下来的提示:** OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/: <文件名>  
 所有变量的一列当前值和状态及统计信息（如果优化已结束），和相关系数矩阵（随机），都将会显示在屏幕上（按下<RETURN>）或者存入有确定文件名的目录文件中，以便可以在以后打开和用简单文本编辑器编辑。

**输出示例:** 以下是已经设置了可用于优化的所有变量的第一次优化后的 TCEX36 例子中的列出的变量。

---

```
== OPTIMIZING VARIABLES ==
```

AVAILABLE VARIABLES ARE V1 TO V00

| VAR. | VALUE           | START VALUE     | SCALING FACTOR  | REL.STAND.DEV  |
|------|-----------------|-----------------|-----------------|----------------|
| V1   | 2.03729090E+04  | 2.03688352E+04  | 2.03688352E+04  | 3.41524152E+00 |
| V2   | -2.94286372E+01 | -2.94286372E+01 | -2.94286372E+01 | 2.37944771E+00 |
| V11  | -2.17373936E+04 | -2.18095983E+04 | -2.18095983E+04 | 3.97086303E-02 |
| V12  | 1.52107184E+01  | 1.51660547E+01  | 1.51660547E+01  | 5.84552327E-02 |
| V15  | 2.42082351E+04  | 2.45139169E+04  | 2.45139169E+04  | 5.00914471E+00 |
| V16  | -8.38723972E+00 | -8.83460472E+00 | -8.83460472E+00 | 1.60961318E+01 |
| V17  | 3.08916533E+03  | 3.15802558E+03  | 3.15802558E+03  | 9.63738108E+00 |
| V19  | 2.20292586E+04  | 2.21385673E+04  | 2.21385673E+04  | 4.14274011E+01 |
| V20  | -7.04217974E+00 | -7.22424882E+00 | -7.22424882E+00 | 1.00561540E+02 |

NUMBER OF OPTIMIZING VARIABLES : 9

ALL OTHER VARIABLES ARE FIX WITH THE VALUE ZERO

THE SUM OF SQUARES HAS CHANGED FROM 8.00002729E+04 TO 8.00002719E+04

DEGREES OF FREEDOM 45. REDUCED SUM OF SQUARES 1.77778382E+03

## 12.7.12 RESCALE\_VARIABLES

**说明:** 使用该命令，所有参数的当前值可以复制作为其进一步优化的初始值和比例系数。因此应当时不时的进行此操作，特别是如果用户认为之前运行后优化结果得到了改进，或者存在变量的变化因子超过 10。

**摘要:** RESCALE\_VARIABLES

## 12.8 其他命令

### 12.8.1 SET\_OUTPUT\_LEVELS

**说明:** 用户可以使用该命令选择优化过程中和结果列出时，PARROT 模块应给出信息的类型。

**摘要:** SET\_OUTPUT\_LEVELS

**接下来的提示:** LIST INCREMENT /1/: <迭代数的增量>  
为优化过程中显示在屏幕上的信息确定迭代数的增量。给出较大的数值，将对应列表的缩短。

LIST SUM OF SQUARES: /Y/:

用户可以选择平方和在优化过程中是否在屏幕上列出，是（Y）或者否(N)。

LIST SCALED VARIABLES: /Y/:

用户可以选择优化过程中，有范围的变量值是否在最后列出，是(Y)或者(N)。

LIST WEIGHTENED RESIDUALS: /N/:

用户可以选择优化过程中是否在最后列出剩余权重，是(Y)或者否(N)。

LIST ALL PARAMETERS: /N/:

用户可以选择是否在 LIST-RESULT 命令中列出模型中的所有参数 (Y) 或者否 (N)。

LIST CORRELATION MATRIX: /N/:

用户可以选择是否在 LIST-RESULT 和 LIST-ALL-VARIABLES 命令中列出变量的相关系数矩阵，是(Y)或者否(N)。

## 12.8.2 SAVE\_PARROT\_WORKSPACES

**说明:** 如果用户对运用各种 PARROT/GES/POLY 命令所作的最近改变不满意，那么，他可以使用该命令保存 PARROT 程序(也包括当前的 GES5 和 POLY3 工作区)使用的当前工作区（即，数据区间），目的地址是 SET\_STORE\_FILE 命令已经打开了的或者 CREATE\_NEW\_STORE\_FILE 命令（PARROT 模块中交互式的或者通过宏打开一个 SETUP TCM 文件）创建的当前工作文件。请注意此 PARROT/GES5/POLY3 工作区会在每一个 PARROT/GES5/POLY3 命令后更新，并运用该命令与最近命令，SET\_STORE\_FILE 或者 CREATE\_NEW\_STORE\_FILE，相关联的最近的工作文件中。

不像其他模块中的 SAVE 命令一样（比如，GES 或者 PLOY 模块），此命令不会索要保存当前 PARROT/GES5/POLY3 工作区的文件名，这些都是鉴于以上阐述的原因。如果没有打开的或者是之前创建的工作文件，我们不能使用此命令。

**摘要:** SAVE\_PARROT\_WORKSPACE

## 12.8.3 READ\_PARROT\_WORKSPACES

**说明:** 如果用户对运用各种 PARROT/GES/POLY 命令做的最近的改变不满意，可以返回读取以前的 PARROT/GES5/POLY3 工作区，以替换当前 PARROT/GES5/POLY3 工作区。之前的 PARROT/GES5/POLY3 工作区总是与最近的操作相关联，可以用 SET\_STORE\_FILE 命令打开一个工作文件，或者用 CREATE\_NEW\_STORE\_FILE 命令创建一个工作文件（PARROT 模块中

交互式的或者通过宏打开一个 `SETUP.TCM` 文件），抑或用 `SAVE_PARROT_WORKSPACE` 命令更新此工作文件。

不像其他模块（如，GES 或者 PLOY 模块）中的 `READ` 命令，此命令不会索要文件名来决定在何处读取之前的一个打开过\创建过\更新过的 `PARROT/GES5/POLY3` 工作区，原因如上所述。如果没有打开或之前创建的文件，我们不能使用此命令。

摘要: `READ_PARROT_WORKSPACE`

## 12.8.4 MACRO\_FILE\_OPEN

说明: `MACRO` 是一个在简单文本文件中（通常在 `TCC` 带有缺省的扩展名“`TCM`”，或者在 `DICTRA` 是“`DCM`”）预先定义各种 `TCC`（和 `DICTRA`）命令的极其便捷和简单的方式，然后用这个命令执行这些命令。在各种模块中都可以执行此命令（`SYS`, `POLY`, `PARROT` 和 `TCC` 软件中的 `TAB` 模块，`SYS`, `POLY`, `PARROT` 和 `DICTRA` 软件中的 `DICTRA_Monitor` 模块）。

在只用一些小的改变（在系统定义，条件，绘图设置等方面）实现相同/相似计算时，这就显得异常有用了。应用此特色的一个很好的例子是计算评估中的相图。所有类型的合法 `TCC`（和 `DICTRA`）命令可以存储在 `MACRO` 文件中，且只需要在此文件名之前键入 `MACRO` 命令。

`MACRO` 文件可以包含任何一个合法 `TCC`（和 `DICTRA`）命令。`MACRO` 必须以 `EXIT` 命令结束，或者在 `SYS`, `GES`, `POLY`, `PARROT` 或 `POST` 模块中以 `SET_INTERACTIVE` 命令中断。

`MACRO` 一个有趣的功能是允许与用户的某些互动。因此你可以以以下方式输入：

```
GO POLY-3
SET AXIS VAR 2 T
@?Low-temperature-limit
@?High-temperature-limit
```

`MACRO` 会在“@?”处停止，在“?”后在屏幕上写出文本，等待用户输入。它使用用户的输入作为 `Thermo-Calc` 程序的输入；此种情况下对较低和较高的值都有限制。

我们能得到用#1, #2,等指示的 `MACRO` 变量。最大的 9 个是可变化的。这些能通过以下方式赋值：

```
@#3First element?
```



这会在“@#3”后写出，作为对用户的提示，等待用户输入。这时的输入值会赋给变量 3。我们可以在 宏的不同部分使用这些变量。比如，

```
DEFINE-SYSTEM ##3
```

MACRO 变量 3 内容的原文拷贝会在“##3”处插入。我们可以在更为复杂的命令中使用它。

```
SET AXIS VAR 1 x(##3) 0 1,,,
```

这会设置宏变量 3 的摩尔分数为坐标轴 1。

请再次注意在 POLY, POST, SYS, GES 或 PARROT 模块中，MACRO 命令必须用 SET\_INTERACTIVE 命令终止。

一个 MACRO 文件可以在“@&”处暂停，但是我们可以通过在 MACRO 文件名后键入任意字符（除了 Y）阻止其停止。

MACRO 文件也可以有尽可能多的以“@@”标志开始的注释行。这些注释行会对证明 MACRO 文件提供很大帮助，但不会将它们考虑为命令，因此不会影响所有正常 Thermo-Calc 命令的继续执行。

如果 SYS 模块中使用了 SET\_LOG\_FILE 命令，且在其他任何一个 SYS/TDB/TAB/GES/P OLY/POST/PARROT/ED-EXP 命令或者是特殊模块命令之前给出\*.LOG file 文件名，MACRO 文件可以由 TCC 软件自动生成。这种\*.LOG 文件是一个简单的文本文件，能够用任何一个简单的文本编辑器（比如 Notepad, Wordpad, PFE, Emacs 文本编辑器等等）做更进一步的编辑；比如，删除不必要的命令行，修改一些命令，设置和定义，添加一些驻点，增加一些以“@@”开头的有用的注释行，等等。然后可以保存为 MACRO 文件，标准扩展名为“TCM”。

有经验的用户也可以用 TCC（和 DICTRA）程序以外的任何简单的编辑器为需要的计算/模拟编写一个合适的 MACRO 文件。

TCC 版本 N 以来，MACRO 文件可以有 5 个嵌入级别，即，MACRO 文件可以响应另外一个 MACRO 文件，如果一个子标准 MACRO 由 SET\_INTERACTIVE 命令终止，将会在之前的 MACRO 中的下一个命令中继续。如果是被文件末尾终止的，TCC 程序会异常中断。可以利用这种特色实现很多不同的目的，某个阶段（比如，晚上），用户需要很多（可能上百个）在相似物质体系/过程（在很多不同但合适编排的 MACRO 文件中予以了详细说明，这些文件组织到了五个等级）的计算/模拟来完成合金设计尤为重要，用户可以在某个时间（比如下班之前）只运行主要的 MACRO （在高级阶段上），之后（比如第二天上午），用户可以系统而且有效的检测/比较/分析结果（这些已经以各种图形文件，和/或者是 EXP/TXT/XLS/...文件的格式存储起来了）。

值得一提的是：在每个 MACRO 文件（或者如果任何一个 MACRO 文件的子标准已经使用，在开始的 MACRO 文件的高级标准中）的开始仅添加 SYS\_Module 命令 SET\_ECHO，能够很方便和实用地自动在屏幕上显示由

MACRO 文件强迫的 TCC（和 DICTRA）所有顺序操作中各种命令的完整细节。

纲要 1: MACRO\_FILE\_OPEN <Macro 文件名 >

纲要 2: MACRO\_FILE\_OPEN

接下来提示: Macro 文件名: <Macro 文件名>

用 MACRO 命令指定文件名。缺省扩展为“TCM”。

注意: Windows NT/2000/95/98/ME 环境下，如果该命令后没有给出一个合适的 MACRO 文件，屏幕上会弹出一个对话框，要求指定路径（在 **Look in** 工具条中）和文件名（**File name** 工具条中），如 *Figure 8-6*所示。文件类型（即，**Files of type** 工具条中的 TCM）不可改变。点击 **Open** 按钮，程序继续执行各种 Thermo-Calc 命令。用户也可以取消这种 **Open file** 窗口对话，这样的话就不会打开当前的 MACRO 文件。

如果 MACRO 文件包含一些设置 \*.LOG 文件，保存 / 读取 GES5/POLY3/PARROT 工作区，切换 USER 数据库，编译实验（来自 \*.POP 文件），创建新的 \*.PAR 文件，为实验数据 \*.EXP 文件设置路径，绘制/堆砌相图等的 SYS/TDB/TAB/GES/POLY/POST/PARROT/ED\_EXP 模块命令，屏幕上会突然跳出一个相关窗口（如，*Save As, Open file, Print* 等）。用户如果需要的话（如果在 MACRO 文件中用户明确对某一点做何操作），可以通过给出文件名（带有文件类型扩展则更合适；如果此文件不在当前 MACRO 所在位置的工作区，还应当确定合理且完整的文件路径），有些时候还需要相关命令后的选项或者参数/选项，来避免这个窗口的弹出。详情请参看相关的命令和模块。

更多注意: 使用要在屏幕上绘制图形的 MACRO 文件，但 SET\_PLOT\_FORMAT 命令已经用于从缺省值中改变了绘制环境时，首先再次使用 SET\_PLOT\_FORMAT 命令来改变回到缺省值，这一点很重要，比如，1（Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME）或者 9（Linux 以及所有类型的 UNIX 平台）。请参考 TCC 安装区\TCEx\和 **TCCR Examples Book** 中的 TCEx36.TCM，以获得更多实例。更多 MACRO 构造详情请参考第 8.10.26 和 14.2.8 章节。

## 12.8.5 RECOVER\_VARIABLES

描述: 该命令可以使所有变量返回至其初始值。

纲要: RECOVER\_VARIABLES

## 12.8.6 REINITIATE

描述: 该命令可以重新初始化 PARROT 程序用过的工作区。全部输出和优化条件将变为其缺省值。所有变量被固定为零。请注意，除非你确实想破坏当前的 PARROT

工作区，否则千万不要使用此命令。然而，该 PARROT 命令不会重新初始化 GES5/POLY3 工作区。

纲要: REINITIATE

## 12.8.7 LIST\_CONDITIONS

描述: 该命令将输出的当前值和优化条件显示在屏幕上或者是在以后可以打开用文本编辑器编辑的简单文本文件中。

纲要: LIST\_CONDITIONS

接下来的提示: OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/: <文件名>  
 一系列优化条件的当前值，以及 PARROT 工作区中的列表的当前状况 将显示在屏幕上(按下<RETURN>)或者在有具体文件名以备以后打开和用简单文本编辑器编辑的列出文件中。

输出实例 t: 如下所示:

---

```

== OPTIMIZING CONDITIONS ==

RELATIVE STANDARD DEVIATIONS FOR EXPERIMENTS: N
MINIMUM SAVE ON FILE: Y
ERROR FOR INEQUALITIES = 1.00000000E+00
RELATIVE STEP FOR CALCULATION OF DERIVATIVES = 1.00000000E-04
ARGUMENTS FOR SUBROUTINE VA05AD (HSL)
MAXFUN = 1 DMAX = 1.00000000E+02 H = 1.00000000E-04
ACC = (INITIAL SUM OF SQUARES) * 1.00000000E-03

== LIST STATUS ==
LIST INCREMENT = 1
LIST STATUS
SUM OF SQUARES: Y
SCALED VARIABLES: Y
WEIGHTED RESIDUALS: Y
ALL PARAMETERS: Y
CORRELATION MATRIX: Y

```

---

## 12.8.8 LIST\_STORE\_FILE

描述: 该命令可以在屏幕上写出存储文件的名字以及其完整路径。

纲要: LIST\_STORE\_FILE

## 12.8.9 SET\_SCALED\_VARIABLE

**描述:** 该命令在确定优化变量初始值方面与 SET\_OPTIMIZING\_VARIABLE 命令相似(请参看 Section 12.7.5), 但该命令一次只对一个优化变量有效。此外, 它还规定变量的最小和最大值。在接下来的优化运行中, 该变量值会被限制在最小到最大区域内。

这样一个变量可能会有零值或者另外一个初始值, 也可能在先于之前优化运行时已被 SET-FIX-VARIABLE 命令固定了 (请参看 Section 12.7.6)。建议执行此命令之前, 通过使用 LIST-ALL-VARIABLE 命令获取所有变量列表 (这些已经在为优化系统中的相定义各种参数时使用过, 在 SETUP 文件中提前输入或者在 GES 模块中交互输入) (详情请参看第 12.7.11 章节)。

**纲要:** SET\_SCALED\_VARIABLE

**接下来的提示:** VARIABLE NUMBER: <变量号>

给出待设置的优化变量的号码。允许优化任何一个非零参数, 具有值等于零的参数在这儿必须明确指定, 以便优化。

START VALUE /xxxx.xxxxx/: <一个猜测值>

指定该最优值的一个猜测值。当前选定变量的数值将以缺省形式显示。

请注意, 此猜测至关重要, 因为所有参数的初始猜测值必须能计算选定的平衡。

MIN VALUE /xxxx.xxxxx/: <一个猜测值>

指定该最优值的一个最小猜测值。它必须小于等于选定变量的当前初始值。

MAX VALUE /xxxx.xxxxx/: <一个猜测值>

指定该最优值的一个最大猜测值。它应当大于等于选定变量的当前初始值。

## 12.8.10 SET\_OPTIMIZING\_CONDITION

**描述:** 用户使用该命令可以指定优化的条件。PARROT 程序已经自动选定了缺省值, 并附带一些注意事项, 除非用户确实知道自己在做什么, 否则不要改变它们。

**纲要:** SET\_OPTIMIZING\_CONDITION

**接下来的提示:** RELATIVE STANDARD DEVIATION FOR EXPERIMENTS? /N/: <Y 或 N>

用户可以选择此实验测定值的标准偏差是否为绝对值(N)或者它们是否作为相对权重因子(Y)。优化变量的估计标准偏差对于两种情况而不同。

MIN SAVE ON FILE? /Y/: <Y 或 N>

用户可以指定优化过程中此程序是否应当最小化进行与当前工作文件间的数据传输。

- 如果是 (Y), 会加速优化。优化后, 我们可以用 SAVE\_PARROT\_WORKSPACE 命令更新此进程到当前工作文件。

- 如果没有具体说明(N)最小化保存到文件,工作区将会在优化程序的每次迭代后存储到当前工作文件。

ERROR FOR VARIABLE BOUNDS: /1/: <回车>

此特色尚未实现。只需在此按下<回车>即可。

RELATIVE STEP FOR CALCULATION OF DERIVATIVES: /1E-04/: <xxx>

含有精确度的独立状态变量的平衡相关系数矩阵的计算中,可能必须计算一些派生数值。用户可以为这些派生值的计算指定相关步骤(xxx)。

MAXFUN (VA05AD): /100/: <n>

优化中的迭代的最大数目。由 OPTIMIZE 命令设置的同一个数值。

DMAX (VA05AD): /100/: <n>

变量的起始值和最终值间最大距离的一个估计值。较小值能使该程序将参数和较小因子区分开来。

H (VA05AD): /1E-04/: <xxx>

这一步用于计算优化中的数值偏差的等级变量。

ACC/(INITIAL SUM OF SQUARES) (VA05AD): /.001/: <xxx>

优化结束条件。接受值为“真实”最小值和计算结果间的差异。注意,当此值降低误差和时,即使仍可能用一个新的 OPTIMIZE 命令可以进一步提高,优化在此也会停止。

## 12.9 来自吉布斯自由能系统(GES)的命令

以下命令实际上属于吉布自由能系统 (GES 模块)。当服务于用户时,也可以从 PARROT 模块中直接给出这些命令。我们可以参考第 11 章 (GES Module) 的相关部分以获取这些命令的细节。然而,为了您的方便,我们在此对其进行描述。

### 12.9.1 LIST\_PHASE\_DATA

**描述:** 某具体相的所有数据都用可读的方式写在屏幕上。为每个相列出的热化学参数总是以 SI 单位。详情请参看 11.11.2 节。

**纲要:** LIST\_PHASE\_DATA

**接下来的提示:** PHASE NAME: <相名称>  
具体指出一个相的名称。

### 12.9.2 ENTER\_PARAMETER

**描述:** 用户可以使用该命令交互式地键入 `TP-function(s)` 作为一个相的一个具体参数。该命令等价于 GES 模块中的 `ENTER_PARAMETER` 命令(请参见 11.10.5 节)。

为参数输入的温度-压强函数应当在之后由 `AMEND_PARAMETER` 命令定义。(请参考 11.12.4 节)。

参数名称为(更多详情请参照 11.4 节):

`<identifier>(<phase>,<constituent array>;<digit>)`

参数名称举例:

`G(GAS,C1O2)` 气体中一个 CO<sub>2</sub> 分子的形成吉布斯自由能。

`G(FCC,Fe:VA)` 有间隙的 fcc Fe 的形成吉布斯自由能。

`L(FCC,Fe,Cr;0)` fcc 中 Fe 和 Cr 的常规溶液参数。

`L(FCC,Fe,Cr;1)` 亚常规溶液参数。

`TC(BCC,Fe:Va)` bcc Fe 的居里温度。

一个参数名称包含几个部分。首先是一个类型标识符。以下的类型标识符是合法的: `G` (Gibbs 能量), `TC` (磁性有序温度), `BM` (玻尔磁子数)。我们也可以在吉布斯自由能参数中使用 `L`。输出中 `L` 用于表示相互作用参数。请注意, `BM` 类型标识符也用于水溶液类型的波恩方程。

该标识符后面必须有一个开始半括号, 相名称, 一个逗号和一个成分阵列。随意地, 该成分阵列可以后跟一个分号和一个数字。参数名称以结束的半括号终止。

成份阵列由一系列成分名称组成。交互作用参数含有两个或者多个来自相同亚点阵的成分, 成份间用逗号隔开。如果该相包含亚点阵, 每个亚点阵中至少要指定一个成分。不同亚点阵中的成分必须按亚点阵的顺序给出, 并且亚点阵间用冒号分开。

在成份阵列后, 可以在分号后给出一个次标。这个数字必须是在 0 到 9 的范围内。该次标的解释依赖于用于该相的过剩模型。如果没有给出分号和数字, 设定此自索引的值为零。

我们可以用一个星号“\*”来表示参数独立于一个具体亚点阵的成分。比如, `L(L12,AL,NI:*)`, 意味着该相互作用参数表示第一个亚点阵中成分 `AL` 和 `NI` 间的二元相互作用, 然而它独立于第二个亚点阵中的所有组分。

当索要参数名或者如果你输入的整个参数名不合适时, 如果按下<回车>, 程序会要求你输入名称中的每一项。

**摘要:** `ENTER_PARAMETER`

**接下来的提示:** `PARAMETER: <参数名>`

指定一个正确的参数名。如果参数名称不能被接受, 或者用户只按下了<回车>, 会出现以下警告信息:

\*\*\* ERROR, PLEASE RE-ENTER EACH PART SEPARATELY

且程序会在之后逐一显示参数名的每一部分。

`Identifier (/X/): <G 或 L, 或 TC, 或 BM>`

指定以下合法标识符类型中的一个:

`G` 或 `L` 能量参数 (形成吉布斯自由能或交互作用参数);



TC 磁性有序温度参数；

BM 波尔磁子数参数（或水溶液类的波恩方程）。

请注意这些量，如 H（焓），S（熵），V（体积），F（亥姆霍兹能）等，必要的话，能够从吉布斯自由能中计算。

如果这个命令已经用过一次或者更多次了，该提示会将之前设定的值作为缺省值。一旦我们可以接受该值。我们可以按下<回车>来获得相同的类型标志符或者重新指定一新的类型。

Phase name (/ABCD/): <相名称>

每个参数只对一个具体的相有效。必须提供这个相的名称。名称可以是缩写形式。

如果此命令已经用过一次或者更多次了，该提示会将之前设定的值作为缺省值。一旦我们可以接受该值，我们可以按下<回车>来获得相同的相名称或者重新指定一新的相名称。

Constituent (在 SUBLATTICE # /abc/中): <物种名称>

参数等于组分的分数乘上参数。组分名称可以省略。请注意，这里需要的是物种名称，而不是化学计量公式。

如果此命令已经使用过一次或者更多次了，该提示中会将之前设定的值作为缺省值。如果组分名称一致，一旦我们可以接受该值，那么我们可以按下<回车>来获得相同的组分名称或者重新指定一新的组分名称。

对于含有几个亚点阵的相，程序会要求每一个亚点阵的一个组分。

过剩参数，比如，常规参数或者三元参数，与来自同一个相的相同亚点阵的两个或者更多的成分分数相乘。这些额外的成分必须以交互成分（如下面的提示所示）的形式给出。请注意，带有亚点阵的相可能在每个亚点阵中都存在交互成分。一个星号“\*”，可以用来表示参数是独立于一个亚点阵成分的。

INTERACTING CONSTITUENT (IN SUBLATTICE # /xyz/): <类型名>

用于描述一个量的过剩部分的参数必须有两个或者更多交互作用的成分。哪个成分首先给出以及哪个成分以交互作用成分给出，这是任意的。程序通常会将这些成分按照字母表的顺序进行分类（在每个亚点阵中）。对于一些参数符号可能依赖于次序的参数来说这一点是很重要的。

如果此命令已经使用过一次或者更多次了，该提示会将之前设定的值作为缺省值。如果组分名称一致，一旦我们可以接受该值，那么我们可以按下<回车>来获得相同的组分名称或者重新指定一新的组分名称。

注意！要取消此交互成分的缺省值，你必须键入 NONE 或者另外一个成分的名字。

直到一个具体亚点阵中所有的感兴趣的交互成分已经确定，并且最后执行了<回车>，这个问题才会停止重复。

Degree /#/: <等级>

等级的含义依赖于模型。对于二元交互作用参数，等级通常是 Redlich-Kister 表达式中的密。对于三元交互作用参数，它通常是 Hillert 三重索引。

如果此命令用于输入一个纯组元的 G 参数，可能不会提示此问题。

出现此提示后，程序会在屏幕上显示所需相的参数的完整定义。

Low temperature limit /298.15/:: <用 K 表示的最低温度界限>确定参数函数的最低温度界限。格式与输入函数一样。

Function: <一个函数的定义>

一个函数由 T 和 P 的多项式组成。格式同输入函一样。



& <当前函数定义的补充>

函数定义的补编。格式同输入函数时一样。

High temperature limit /6000/: <用 K 表示的最高温度界限>

指定参数函数的最高温度界限。格式同输入函数时一样。

Any more ranges /N/: <Y 或者 N>

选用 Y(YES)输入更多函数，或者选择 N(NO)以终止此命令。格式同输入函数时一样。

### 12.9.3 AMEND\_PARAMETER

**描述:** 用户可以交互式地用该命令修改一个相的一个具体参数的 TP 函数。这一点对于校正输入错误是很有用的，因为原来的函数在终端进行交互编辑时仍然可用。该命令与 GES 模块中的 AMEND\_PARAMETER 命令是等同的。请参考 ENTER\_PARAMETER 的有关描述以获得参数定义的细节（11.10.5 或者 12.9.2 节），或者 GES 模块中的 AMEND\_PARAMETER 命令（请参看 11.12.4 节），抑或如果您对这个问题不是很清楚，在 GES 模块中使用该命令。

**摘要:** AMEND\_PARAMETER

**接下来的提示:** PARAMETER: <参数名>

指定一个正确的参数名。如果参数名不被接受，或者用户只是按下了 <RETURN>，会出现以下的警告消息：

\*\*\* ERROR, PLEASE RE-ENTER EACH PART SEPARATELY

且程序会在参数名称的每一部分分别再次出现。

Identifier (/X/): <G 或 L, 或 TC, 或 BM>

指定以下合法标识符中的一个（G 或 L, 或 TC, 或 BM）。同 ENTER\_PARAMETER 命令一样。

Phase name (/ABCD/): <相名称>

确定相的名称。同 ENTER\_PARAMETER 命令一样。

Constituent (在 亚点阵# /abc/中): <物种名称>

具体指出组分名。与 ENTER\_PARAMETER 命令一样。

INTERACTING CONSTITUENT (在亚点阵# /xyz/): <物种名称>

确定交互作用成分的名称；如果没有交互作用成分，只需按下<回车>。同 ENTER\_PARAMETER 命令一样。

INTERACTING CONSTITUENT (IN SUBLATTICE # /xyz/): <类型名>

如果存在几个交互作用成分，确定它们；如果没有交互作用组分，只需按下<回车>。与 ENTER\_PARAMETER 命令一样。

Degree /#/ : <等级>

为相参数的等级指定为 Y 或者 N。与 ENTER\_PARAMETER 命令相同。

正确的确定参数名称后，程序会在屏幕上列出其当前定义（或者是数据库中预设置的或者是由 ENTER\_PARAMETER 命令之前定义的），比如：

```
L(PHASE2,AL,MG;1)=
 298.15<T<2000.00: +5000
 2000.00<T<4500.00: +4500
 4500.00<T<6000.00: +4000
```

然后程序会提示参数定义的改变，如下所示：

DO YOU WANT TO CHANGE THE NUMBER OF RANGES /NO/: <Y 或者 N>

如果用户想改变选定函数的范围数值，或者改变定义中的一些温度界限，通过键入 Y(YES)，它必须重新输入低/高温界限和函数（请在 ENTER\_PARAMETER 命令中了解余下的细节。很抱歉在此不能作更详细讲述）。

如果用户不想改变范围数值，但是又想改变一个或者更多范围内的函数，通过按下<RETURN> 接受缺省答案 N(NO)，所有范围内（如果有的话）的选定参数的整个定义会在屏幕上列出，比如：

DIFFERENT FUNCTIONS IN THESE RANGES

```
7 298.15<T<2000.00
8 2000.00<T<4500.00
9 4500.00<T<6000.00
```

且会提示以下信息：

DO YOU WANT TO CHANGE RANGE LIMITS /NO/: <Y or N>

如果有多于一个的范围，会出现这种问题。但是，很抱歉此选项（缺省时指定答案为 Y）还没有生效。因此你只需在此处按下<RETURN>!

RANGE NUMBER (0 TO EXIT) /0/: <范围号码>

如果一个参数的函数在两个或者更多的温度范围内不同，你必须具体指出哪一个函数你想修改。否则我们可以按下<回车> 或者键入 0 不做任何修改而退出此命令。

函数：

以前的函数可用于编辑。编辑是在一个普通的子程序 FOOLED 中执行的，在 AMEND\_SYMBOL 命令中已经做了阐述。此程序会以以下方式提示用户：

1:+:>

此提示包含字符串的当前位置和介于冒号“:”之间的字符。

可能会给出以下命令：

```
Help ?
Move CP to last or first character <+/-> A
Delete characters from CP <+ -#characters> D
```

|                |                          |
|----------------|--------------------------|
| Exit           | E                        |
| Find           | <#occurences> F<string>@ |
| Insert         | I<string>@               |
| Move           | <+-#positions> M         |
| Restore string | R                        |
| Substitute     | S<OLD>@<NEW>@            |
| Type string    | T                        |

其中，CP 表示出在字符串中的当前位置，# 意思是其数目，@是输入或寻找字符串的终止符。

注意，当输入字符串时，当前位置的字符已被下划线”\_”代替。这个帮助也可以通过键入 “?”在线获得。

我们必须在提示中键入 E 以完成当前函数的编辑。

RANGE NUMBER (0 TO EXIT) /0/: <范围数目>

给出范围数目以编辑此函数，否则按下<回车>，抑或键入 0 退出该命令。

## 12.9.4 LIST\_PARAMETER

**描述:** 该命令为一个相的一个具体参数在屏幕上列出 TP 函数。你必须提供相的名称。  
与 GES 模块中的 LIST\_PARAMETER 命令是一样的。(请参照第 11.11.3 节)

**摘要:** LIST\_PARAMETER

**接下来的提示:** PARAMETER: <参数名>

确定一个正确的参数名。如果参数名不被接受，或者用户只按下了<回车>，会出现以下的警告信息：

\*\*\* ERROR, PLEASE RE-ENTER EACH PART SEPARATELY

且程序会在参数名的每一部分再次出现提示。

Identifier (/X/): <G 或 L, 或 TC, 或 BM>

确定以下合法标识符类型中一个(G 或者 L,或 BM)。与 ENTER\_PARAMETER 命令中情况相同。

Phase name (/ABCD/): <相名称>

确定相的名称。与 ENTER\_PARAMETER 命令相同。

Constituent (在亚点阵# /abc/中): <物种名称>

确定组元名称。与 ENTER\_PARAMETER 命令一样。

INTERACTING CONSTITUENT (在亚点阵# /xyz/中): <物种名称>

确定交互作用的组分名称；如果没有相互作用组分，只需按下<回车>。与 ENTER\_PARAMETER 命令相同。

INTERACTING CONSTITUENT (在亚点阵# /xyz/中): <物种名称>  
如果有多于一个的相互作用组分，对它们一一确定；否则只需按下<回车>。  
与 ENTER\_PARAMETER 命令相同。

等级 /#/ : <等级>  
通过选择 Y 或者 N 确定相参数等级。与 ENTER\_PARAMETER 命令相同。

## 12.9.5 LIST\_SYMBOL\_IN\_GES

**描述:** 该命令在屏幕上列出体系中各相的输入模型参数的 TP 函数。在许多情况下，优化变量是 TP 函数的一部分，而 TP 函数反过来是在 GESS 工作区输入各种相的模型参数时输入的。该命令为查找此函数如何依赖于优化变量提供了一种途径。

该命令与 GES 模块中的 LIST\_SYMBOL 命令几乎等价(请参看第 11.11.4 节)，但再 PARROT 模块中此列只会在屏幕上显示，而不写入任何文件中。

**摘要:** LIST\_SYMBOL\_IN\_GES

**接下来的提示:** NAME: <符号名称>  
确定符号名称。注意，只有与这个名称匹配的那些符号才会列出。否则按下<回车>以获得体系中输入的所有符号列表。

## 12.10 与其他模块和接口的联系

在内部，Thermo-Calc 和 DICTRA 软件中的 PARROT 模块与其他许多模块有紧密而又平稳的联系。我们的软件/数据库/接口包未来的发展中，会在绘图用户接口中执行 PARROT 模块。

### 12.10.1 与 ED\_EXP 模块的联系

如上所述以及将要在本指南中的下一章给出的详细阐述，EX\_EXP 模块作为 PARROT 程序的子模块运行。通过 PARROT 模块中的 COMPILE\_EXPERIMENTS 命令，所有类型的实验信息(平衡或者动力学数据)可以编译到 PARROT 工作区。特殊评估过程中，用户需要在 PARROT 和 EX\_EXP 模块之间来回切换，以对实验选择(如数据包含，相对权重，测量误差等)和优化设置(如优化或者固定变量，初始值等)做出合适的调整。

## 12.10.2 与 GES 和 POLY 模块的联系

如以上部分阐述，PARROT 数据结构与 GES5, POLY3 和 DICTRA 工作区有很密切的联系。无论何时，关键评估强迫的优化运行，PARROT 程序将调用 GES 模块来存储体系定义数据和模型参数，以及 POLY 或者 DICTRA 模块来计算平衡或模拟动力学，然后将计算结果与实验数据比较。我们可以在 PARROT, GES, POLY 和 DICTRA 模块中来回切换，但是必须小心千万不要破坏 PARROT 工作区。

因此，从一个存储的 PARROT 文件 (PAR) 中，我们可以跟踪体系的 GES, POLY 和 DICTRA 数据域，以及如果需要的话，能够保存这样的数据到一些个别的 GES 或 POLY 或 DICTRA 文件中（比如，\*.GES5/\*.TDB/\*.DAT, 或者 \*.POLY3 或者 \*.DIC 文件）。此外，归功于作为 POLY 和 DICTRA 模块子模块的 POST 后处理程序的可用性，我们能在任何时候方便地调用 POST 模块，以绘制优化体系中的相图，性质图表或组分分布；结果，我们添加各种实验数据（一般用在当前优化练习中）和描述文本到这些绘制图中。

## 12.10.3 与 DICTRA 软件的联系

DICTRA 软件利用 PARROT 模块，与 Thermo-Calc 软件是相同的，PARROT 工作区也共享 DICTRA 数据空间一些部分。因为 DICTRA 使用 Thermo-Calc 作为其引擎来处理所有热力学数据，并计算热力学性质，稳定或者亚稳定平衡，以及动力学过程模拟中的局部和部分平衡，热力学和动力学模型参数的优化过程可以与相图或者性质图表抑或组分分布的计算并行。更多详情请参考 DICTRA 手册。

## 12.10.4 TCW 软件的实用性

目前，PARROT 工具在 Thermo-Calc 软件中的绘图用户界面不可用。然而，随着以后软件的发展，我们会将 PARROT 模块在 Windows 环境下整合到 TCW 软件中。

# 13 Edit-Experiment 模块 (ED-EXP)

## 13.1 简介

**ED\_EXP** 模块 ⇨ 实际是 PARROT 模块的子模块，而且是 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件中，关键性地评估热力学和动力学模型参数时用于编辑各类实验数据的一种必不可少而又有力的

---

⇨ 关于 **ED\_EXP** 模块用户手册的修订

Feb 1984      First release (Edited by Bo Jansson)

工具。它总是与 PARROT 模块相连并要通过 PARROT 模块进入。在评估进程中, 为了对优化中实验点作出恰当的选择及设置来使用最优的初始值。通常要频繁的在 PARROT 和 ED\_EXP 模块之间切换。

ED\_EXP 模块以一种非常特别的方式使用 POLY 模块, 这样可以把每个实验数据点都当作一个平衡来计算。因此, 许多 ED\_EXP 命令和 POLY 模块中的一样, 只是在执行时略有不同。(详见第 13.2 节)一些 POLY 命令在此模块中不存在, 而一些新的命令加入到了 ED\_EXP 模块中。

在运行 Thermo-Calc 或 DICTRA 时, 第一次进入 ED\_EXP 模块前(通过 PARROT 模块中的 EDIT\_EXPERIMENTS 命令), 通常已经成功地编辑了实验数据文件 (Thermo-Calc 用 \*.POP 或 DICTRA 用 \*.DOP 文件)

与在 Thermo-Calc 及 DICTRA 软件中集成的其他模块一样, ED\_EXP 模块会给用户提供一个带有用户界面的应用程序, 而这个界面带有一些简单概括性的命令用于在最优化过程中的实验数据编辑和平衡的计算, 通过这样的界面, 可以很容易的交互式的进行所有任务的编辑(详见第 13.2 到 第 13.4 节功能说明), 而这对于一个好的优化是必须的。

ED\_EXP 模块 所利用的 POLY3 工作空间是 PARROT 文件正使用文件(\*.PAR)的一部分。READ\_WORKSPACE 和 SAVE\_WORKSPACE 这两个 POLY 命令, 与 POLY3 工作空间部分相互作用, 因此他们仅与当前的 PARROT 工作文件有关而与其他特定\*.POLY 文件无直接联系。通过 SAVE 命令, 它可以迅速的把所有已计算的实验平衡点或动力学步骤转存入 POLY3 (然后是 DICTRA) 工作空间。在 DICTRA 软件, 一些 DICTRA 命令 在 ED\_EXP 模块中也是可行的, 关于 DICTRA 功能详情请参考 *DICTRA 用户手册*。

以下是在 Thermo-Calc 软件的 ED\_EXP 模块中可用的命令

---

ED\_EXP: ?

|                        |                     |                         |
|------------------------|---------------------|-------------------------|
| BACK                   | HELP                | SELECT_EQUILIBRIUM      |
| CHANGE_STATUS          | IMPORT              | SET_ALL_START_VALUES    |
| COMMENT                | INFORMATION         | SET_ALTERNATE_CONDITION |
| COMPUTE_ALL_EQUILIBRIA | LABEL_DATA          | SET_CONDITION           |
| COMPUTE_EQUILIBRIUM    | LIST_ALL_EQUILIBRIA | SET_NUMERICAL_LIMITS    |
| CREATE_NEW_EQUILIBRIUM | LIST_CONDITIONS     | SET_REFERENCE_STATE     |
| DEFINE_COMPONENTS      | LIST_EQUILIBRIUM    | SET_START_CONSTITUTION  |
| DELETE_SYMBOL          | LIST_STATUS         | SET_START_VALUE         |
| ENTER_SYMBOL           | LIST_SYMBOLS        | SET_WEIGHT              |
| EVALUATE_FUNCTIONS     | MAKE_POP_FILE       | SHOW_VALUE              |
| EXPERIMENT             | READ_WORKSPACES     | SPECIAL_OPTIONS         |
| EXPORT                 | REINITIATE_MODULE   | STORE_ALL_WEIGHTS       |

---

Oct 1993      Second revised release (Edited by Birgitta Jönsson and Bo Jansson)

Sept 1998     Third revised release (Edited by Bo Sundman)

Jun 2000      Fourth revised and extended release (Edited by Pingfang Shi)

Nov 2002      Fifth revised and extended release (Edited by Pingfang Shi)

Jun 2004      Sixth revised release (Edited by Pingfang Shi); *with minor changes in 2006*

FLUSH\_BUFFER  
GRAPHICS\_PLOT

RESTORE\_ALL\_WEIGHTS  
SAVE\_WORKSPACES

TABLE\_HEAD  
TRANSFER\_START\_VALUES

ED\_EXP:

注意: GRAPHICS\_PLOT, LIST\_ALL\_EQUILIBRIA, RESTORE\_ALL\_WEIGHTS, 及 STORE\_ALL\_WEIGHTS 命令是自 TCCP 开始新加入的 ED-EXP 命令, 然而自 TCCQ 开始 GRAPHICS\_PLOT 命令仅能在 POP 文件中。

## 13.2 POLY 命令在 ED\_EXP 模块中

表 13-1. 关于在 ED\_EXP 模块中 POLY 命令性能的概述

| 命令                     | 功能                       | 性能                                                                 |
|------------------------|--------------------------|--------------------------------------------------------------------|
| HELP                   | 得到特定命令的帮助。               | 所有列出的在模块中可行的命令。                                                    |
| INFORMATION            | 得到特定的主体信息。               | 所有 POLY 和 ED-EXP 主体类型。                                             |
| BACK                   | 回到 PARROT 模块。            | 始终是回到 PARROT 模块。<br><b>注意:</b> 不要忘记在使用这个命令之前前执行 SAVE_WORKSPACE 命令。 |
| DEFINE_COMPONENT       | 定义新组分。                   | 当前实验点。                                                             |
| ENTER_SYMBOL           | 定义符号 (常数, 变量, 函数或表)。     | 当前工作文件所有实验点。                                                       |
| DELETE_SYMBOL          | 删除已存在的符号 (常数, 变量, 函数或表)。 | 当前工作文件所有实验点。                                                       |
| LIST_SYMBOLS           | 列出已存在的符号 (常数, 变量, 函数或表)。 | 当前工作文件所有实验点。                                                       |
| CHANGE_STATUS          | 改变相, 元素或组分的状态。           | 当前实验点。                                                             |
| LIST_STATUS            | 在显示屏上列出相, 元素或组分的状态。      | 当前实验点。                                                             |
| SET_REFERENCE_STATE    | 设置成分的参考状态。               | 当前实验点。                                                             |
| SET_CONDITION          | 设置平衡条件 (设置相同条件给已选的实验平衡)。 | 当前实验点。                                                             |
| LIST_CONDITION         | 列出当前试验点的平衡条件。            | 当前实验点。                                                             |
| SET_START_VALUE        | 设置初始值。                   | 当前实验点。                                                             |
| SET_START_CONSTITUTION | 设置初始条件。                  | 当前实验点。                                                             |



## Thermo-Calc 用户指导书

|                      |                                     |                                                                                                                          |
|----------------------|-------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| SET_ALL_START_VALUES | 设置所有初始值及条件。                         | 当前实验点。                                                                                                                   |
| SET_NUMERICAL_LIMITS | 为平衡计算过程设置多种数值限制                     | 当前工作文件的所有实验点。                                                                                                            |
| SELECT_EQUILIBRIUM   | 在当前工作文件的当前读取的和可能修改的数据块中选择一个已确认的实验点。 | 选择的实验点成为当前实验点由 ED-EXP 模块递交<br><b>注 意：</b> 在 使 用 COMPUTE_ALL_EQUILIB 命令后，实验数据点会变成当前实验点，这种情况下，应使用 SELECT_EQUIIB 命令进行进一步编辑。 |

|                        |                                                                                                                                                           |                                                                                                                                  |
|------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| COMPUTE_EQUILIBRIUM    | 计算某个实验点的平衡。                                                                                                                                               | 当前实验点；<br>对一个范围内或所有权重不为零的实验点使用 ED_EXP 模块命令 COMPUTE_ALL_EQUILIB。                                                                  |
| LIST_EQUILIBRIUM       | 列出所有当前实验点的已计算的平衡状态。                                                                                                                                       | 当前实验点                                                                                                                            |
| CREATE_NEW_EQUILIBRIUM | 创建新的平衡点。                                                                                                                                                  | 基于当前实验点，但会赋给在系统定义及条件值等方面不同的设置。                                                                                                   |
| EVALUATE_FUNCTIONS     | 求已定义的函数值。                                                                                                                                                 | 当前实验点；                                                                                                                           |
| SHOW_VALUE             | 显示一个状态变量或已定义的函数或变量的值。                                                                                                                                     | 当前实验点                                                                                                                            |
| READ_WORKSPACES        | 从在当前工作 *.PAR 文件的或先前保存的 POLY3 工作空间读取一个实验数据块。<br>事实上，这个 ED_EXP 模块的命令以前是 READ_BLOCK，而且它总是从进行实验数据编辑的数据块中产生快速请求。<br>详见第 13.3.6 节（READ_BLOCK 或 READ_WORKSPACE）。 | 当前工作文件指定数据块的所有实验点<br><b>注意：</b> 在以下情况，这个命令应优先于其他 ED-EXP 模块命令：模块是第一次进入或模块被恢复，或者所有实验数据块已从被实验数据 *.POP/DOP 文件编辑的工作空间中读取或用户想去其他数据块编辑。 |
| SAVE_WORKSPACES        | 保存编辑中的改变到在当前工作文件的 POLY3 工作空间。                                                                                                                             | 当前工作文件所有实验点。<br><b>注意：</b> 回到 PARROT 模块前要给出这个命令。                                                                                 |
| SPECIAL_OPTIONS        | 为溶体相指定一个特定选项。                                                                                                                                             | 当前工作文件所有实验点。                                                                                                                     |
| REINITIATE_MODULE      | 恢复 ED_EXP 及 POLY 模块到刚进入时的状态。                                                                                                                              | 当前工作文件所有实验点。所有已读的实验数据块，已定义的成分和条件，指定的初始值，改变的状态，定义的符号，计算及创建的平衡等会被删除。                                                               |
|                        |                                                                                                                                                           |                                                                                                                                  |

### 13.3 仅在 ED\_EXP 模块中可行的特殊命令

以下列出的是一些只为 ED\_EXP 模块设计的特殊命令，在随后的章节中将详细说明这些命令。这些特殊命令也可以在 \*.POP 或 \*.DOP 文件中使用。

```

COMPUTE_ALL_EQUILIBRIA
EXPERIMENT
EXPORT
IMPORT
LABEL_DATA
MAKE_POP_FILE
READ (例, READ_BLOCK 或 READ_WORKSPACE)
SET_ALTERNATE_CONDITION
SET_WEIGHT
TRANSFER_START_VALUES
LIST_ALL_EQUILIBRIA
STORE_ALL_WEIGHTS
RESTORE_ALL_WEIGHTS
GRAPHICS_PLOT

```

注 意 GRAPHICS\_PLOT, LIST\_ALL\_EQUILIBRIA, RESTORE\_ALL\_WEIGHTS, 和 STORE\_ALL\_WEIGHTS 命令是自 TCCP 开始新加入 ED-EXP 模块的命令。

GRAPHICS\_PLOT 命令在 TCCQ (及最近的子版或修订版) 中被完全重写, 现在有了一种完全不同的功能; 虽然在 ED-EXP 模块中它仍然是存在的, 但是仅作为一种特殊命令在 POP 文件中使用。详情请参考第 13.4.4 节。

关于运行 ED-EXP 模块的提示:

- ❖ 第一次进入 ED\_EXP 模块 (通过 PARROT 模块中的 EDIT\_EXPERIMENTS 命令) 后的第一个必要的命令必须是 READ(READ\_BLOCK) 命令, 以便从当前工作的 \*.PAR 文件中装载用于编辑的实验数据块。此外, 以下情况中, READ 命令应该优先于 ED\_EXP 模块的其他命令: 模块被初始化, 或者没有实验数据块从已被编译好的实验数据 \*.POP/\*.DOP 文件工作空间中读取或用户想换到其他数据块来编辑。
- ❖ 如果 ED\_EXP 模块中有改变, 在返回 PARROT 模块时不要忘记使用 SAVE-WORKSPACE 命令。

注意: 虽然 TABLE\_HEAD, COMMENT 和 FLUSH\_BUFFER 命令在 ED\_EXP 模块存在 (介绍中已列出, 见第 13.1 节), 但是它们不能在 ED\_EXP 模块中使用, 它们仅能在 \*.POP 或 \*.DOP 文件中使用。

### 13.3.1 COMPUTE\_ALL\_EQUILIBRIA (计算所有平衡)

说明: 在 ED\_EXP 和 PARROT 模块中, 每个实验都被当作含有一些已测值的独立平衡来处理, 它们都是由 CREATE-NEW-EQUILIBRIUM 命令来建立 (见第 8.11.2 节) 实验, 存入一个实验数据文件 \*.POP 中, 然后编程并存入 PARROT 模块中工作的 \*.PAR 文件中的 POLY3 工作空间。

COMPUTE-ALL-EQUILIBRIA 命令会计算出所有当前到最后的实验点的平衡。如果一个平衡计算失败，计算将停止于这个平衡。权重为零的平衡将被跳过。

注意当前实验点表示最近被选择过的或计算过的实验点。如果用户已经使用过这个命令，当前实验点会转向数据块的最后一个实验点；这时用户首先必须使用 SELECT\_EQUILIBRIUM 命令(见第 8.11.10 节)，这样当前实验点会转换到一个所期望的实验点。

概要: COMPUTE\_ALL\_EQUILIBRIA

注意: 在 COMPUTE-ALL-EQUILIBRIA 命令中，显示屏上会输出一个列表，由六列在当前数据块所有的实验点组成。第一列是由 CREATE-NEW-EQUILIBRIUM 命令分配的平衡的标识符（一个数字，即第几个平衡），第二列是由 LABEL-DATA 命令分配的数据标签，第三列是数据迭代的次数，第四列是当前权重，第五列是当前温度。第六列是确定的稳定相以及在\*.POP 或\*.DOP 文件中用 COMMENT 命令给出的注释（见第 11.4.2 节）。

如果一个平衡的权重为零，第 3 到第 5 列会被文本 “< unused >”替换。

如果一些实验点使用了交互模式，这些实验点的清单会略微不同。第 3 到第 4 列会被“\* alt \*”代替。如果在一个实验点的交替计算失败，实验点会被自动设置其权重为 0，而且数据行上会显示警告信息（所有的六列）。

清单举例: 下面是当交互式运行 ED\_EXP 模块时命令后列出信息的举例，这是在运行了 TCEX36a.TCM 和 CEX36b.TCM 文件及 PARROT 和 ED\_EXP 模块中的一些相关的命令之后得到的：

---

| Eq                                             | Lab  | Iter | Weight     | Temp   | Fix phases or comments |
|------------------------------------------------|------|------|------------|--------|------------------------|
| 1                                              | AINV | 1    | 1.         | 1189.1 | LIQUID A2B BCC         |
| 2                                              | AINV | 1    | 1.         | 1340.1 | LIQUID A2B             |
| 3                                              | AINV | 1    | 1.         | 1052.6 | LIQUID A2B BCC         |
| 4                                              | AINV | 1    | 1.         | 1207.9 | LIQUID BCC FCC         |
| 5                                              | AINV | 1    | 1.         | 718.1  | A2B BCC BCC#2          |
| 6                                              | AINV |      | < unused > |        | BCC BCC#2              |
| Failed using alternate, setting weight to zero |      |      |            |        |                        |
| 10                                             | ALF  | 1    | 1.         | 1594.0 | LIQUID FCC             |
| Failed using alternate, setting weight to zero |      |      |            |        |                        |
| 11                                             | ALF  | 1    | 1.         | 1548.0 | LIQUID FCC             |
| Failed using alternate, setting weight to zero |      |      |            |        |                        |
| 12                                             | ALF  | 1    | 1.         | 1499.0 | LIQUID FCC             |
| Failed using alternate, setting weight to zero |      |      |            |        |                        |
| 13                                             | ALF  | 1    | 1.         | 1438.0 | LIQUID FCC             |
| 20                                             | ATIE | 1    | 1.         | 1413.0 | LIQUID FCC             |
| 21                                             | ATIE | 1    | 1.         | 1337.0 | LIQUID FCC             |
| 22                                             | ATIE | 1    | 1.         | 1213.0 | LIQUID FCC             |
| 23                                             | ATIE | 1    | 1.         | 1100.0 | LIQUID BCC             |
| 100                                            | AA   | 2    | 1.         | 1573.0 | LIQUID                 |

|     |    |   |    |        |        |
|-----|----|---|----|--------|--------|
| 101 | AA | 2 | 1. | 1573.0 | LIQUID |
| 102 | AA | 2 | 1. | 1573.0 | LIQUID |
| 103 | AA | 2 | 1. | 1573.0 | LIQUID |
| 104 | AA | 2 | 1. | 1573.0 | LIQUID |
| 105 | AA | 2 | 1. | 1573.0 | LIQUID |
| 106 | AA | 2 | 1. | 1573.0 | LIQUID |
| 107 | AA | 2 | 1. | 1573.0 | LIQUID |
| 108 | AA | 2 | 1. | 1573.0 | LIQUID |
| 110 | AA | 1 | 1. | 1773.0 | LIQUID |
| 111 | AA | 1 | 1. | 1773.0 | LIQUID |
| 112 | AA | 1 | 1. | 1773.0 | LIQUID |
| 113 | AA | 1 | 1. | 1773.0 | LIQUID |
| 114 | AA | 1 | 1. | 1773.0 | LIQUID |
| 115 | AA | 1 | 1. | 1773.0 | LIQUID |
| 116 | AA | 1 | 1. | 1773.0 | LIQUID |
| 117 | AA | 1 | 1. | 1773.0 | LIQUID |
| 118 | AA | 1 | 1. | 1773.0 | LIQUID |

---

### 13.3.2 EXPERIMENT （实验值）

**说明:** 这个命令主要用于 POP 或 DOP 文件, 但也可以交互式的使用, 来改变实验值或其误差范围, 或者添加更多实验信息。

一个“实验”通常由两部分组成: 第一部分是特征量的关系式, 第二部分是特征量的值的不确定度, 用冒号“:”隔开。特征量的关系式部分可以是 POLY 模块中普通的条件 (见第 8.3.5 节和第 8.7.1 节) 或一个不等式 (条件类似但是特征量及已给值的关系不等。例, “<”或“>”)。不确定度可是一个绝对值或一个近似值 (百分数, x%)。

注意: 当“实验值”使用不等式表示, 那么在用 PARROT 模块优化时, 如果计算值是在不等式正确的这一步, 那么它将对误差和这一项没有共享; 如果计算值在不等式相反的那一边, 那么冒号后面的值就决定了误差随计算值增大的程度。

**概要:** EXPERIMENT <experiment>

“实验值: 必须在 EXPERIMENT 命令之后输入。一些实验可以在同一行给出。

Experiment 的语法与 condition 的类似。在最简单情况下, 一个状态变量等于一个值, 在值后面的冒号“:”之后有一个不确定度。例如:  
T=1273.15:5,

一个不等式: “<”或“>”, 同样适用于 experiment 语法, 例如,  
ACR(C) < -0.01:0.001, W(BCC, AG) > 0.05:10%.

**注意:** 一个典型的“实验值”是交互式加入的，用来指出一个相在某个实验中是不稳定的，因为一个相可能会出现在某个温度或成分范围内，但这是在优化过程中观察不到的。当一个相驱动力为负值时，它是不稳定的，重要就可以使用这个命令添加一个实验信息来确保它的存在。如下面的例子所示，可以用这样的命令来抑制一个已经存在的 HCP 相：

```
CHANGE-STATUS HCP=DORMANT
EXPERIMENT DGM(HCP)<-.001:.0001
```

注意 DGM 是 POLY 模块中的变量，它代表驱动力除以 RT，它是一个无量纲量。只有处于 DORMANT 状态的相的驱动力可以大于零，因为在这种情况下，如果允许它们形成，它们是稳定的。以上情况的“实验值”会试图修改模型参数而使 HCP 相不稳定。

跟多的关于给定实验值的例子：

```
EXPERIMENT X(LIQ, PB)=.10:.01 X(FCC, PB)=0.02:.01
EXPERIMENT ACR(PB)=0.8:5%
EXPERIMENT T=700:5
```

上面的第一个实验条件给定了一条共轭线，共轭线上 PB 相在液相中的摩尔分数为 0.1，在 fcc 相中的摩尔分数为 0.02，测量误差均为 0.01。第二个实验条件为 PB 活度为 0.8，误差是 5%。要注意的是组分 PB 的参考态必须由 SET-REFERENCE-STATE 命令设置。最后一个实验值的温度为 700 K，误差度为 5 度。

必须说明状态变量函数是已定义函数，例，

```
ENTER_FUNCTION HTR=HM(LIQUID)-HM(FCC);
EXPERIMENT HTR=7000:1000
```

### 13.3.3 EXPORT （导出）

**说明:** 这个命令能在 PARROT 工作空间将一个平衡计算值出来的值赋值给一个优化变量(“v”变量)。因此这个值可以用在如一个相的吉布斯能的表达式中等。当然这个变量不能再被优化(例如：在 PARROT 中必须将它设为一个固定变量)，而且这个选项要甚用。

**概要 1:** EXPORT <函数名>#<n>

**概要 2:** EXPORT

**提示:** : FUNCTION NAME: <函数名>#<n>

给定要赋值给变量“v”的函数名，变量“v”的编号应在函数名后给出，用“#”字符隔开。

注意: 函数名要分大小写, 通常要大写, 例如 ,

```
ENTER_FUNCTION STRNGY=GM(FCC).X(CU);
EXPORT STRNGY#6
```

这将把FCC相吉布斯自有能对Cu在其中所占摩尔分数的偏导数赋值给优化变量 6 (例如, “v6”)。

### 13.3.4 IMPORT (导入)

**说明:** 这个命令与 EXPORT 相反。它能使一个优化变量的值转为常量。通常它直接在实验数据文件(POP 或 DOP)中使用。

一种情况是: 如果在某一组分的相同活度下做了很多实验, 但是这个活度是未知的, 这时该命令是有用的。该活度必须被优化, 而且在相同活度下的所有平衡应取相同的值。这时活度应该设成一个优化变量并且必须给定一个初始值。在优化过程中, PARROT 程序会设法找到最合适的活度。注意如果该活度的近似值已知, 它可作为一个实验值来输入。

另一种情况是: 这个命令可在在 Thermo-Calc 安装目录中的/TCEx/子目录中例 23 中的\*.POP 文件给出的情况中使用, 并在 *Thermo-Calc Examples Book* 中有说明。

**概要 1:** IMPORT <常量名>#<n>

**概要 2:** IMPORT

**提示:** CONSTANT NAME: <constant name>#<n>  
变量“v”的值必须为一个符号化的常量。变量“v”的编号必须在常量名后给出, 并用#字符隔开。注意: 函数名要分大小写, 通常要大写, 例如,  
ENTER\_CONSTANT ACU=0.1  
IMPORT ACU#2

这会把变量 2 (例, “v2”) 的值传递给常量 ACU 。

### 13.3.5 LABEL\_DATA

**说明:** 这个命令会给实验平衡点一个标签, 这些点可以是一个点或者单独给出的一些点或列于表中的点。标签最多有四个字符并以 A 开始。这个命令通常可在一个实验数据文件 (\*.POP) 中使用。



一些实验平衡可以使用同一标签，标签可以在 SET-WEIGHT 命令中使用，给所有具有相同标签的平衡设置相同的权重。

概要 1: LABEL\_DATA A<bCd>

概要 2: LABEL\_DATA

提示: Label? /A1/: A<bCd>

为当前实验平衡点定义一个文本标签（以最大字符并以 A 开始）。

### 13.3.6 MAKE\_POP\_FILE

说明: 在 ED\_EXP 模块中可以交互式的对初始实验数据文件 (\*.POP 或 \*.DOP 文件) 进行修改或添加新的数据。为了存档或转换当前或最后的编辑好的实验数据到一个 \*.POP/\*.DOP 文件，可以用这个命令将实验数据存入新的 \*.POP/\*.DOP 文件，或在旧的 \*.POP/\*.DOP 文件上重新存入实验数据。  
**注意:** 这个实验数据文件 (\*.POP/\*.DOP 文件) 是一个简单的文本文件，而工作文件 (\*.PAR 文件) 不是文本文件，而且这是由计算机硬件决定的。这个输出并不总是没有错误，应该仔细检查。原始 \*.POP/\*.DOP 中的表作为单独的实验点存入。

输出可在屏幕上显示或存为一个新的 \*.POP 文件，已编辑的实验信息以简单文本格式存入或覆盖入这个文件。**注意:** 如果一个已有的 \*.POP 文件的名字被指定，它将被覆盖。在 DICTRA 模块中，\*.DOP 文件被保存或覆盖。

概要 1: MAKE\_POP\_FILE <POP/DOP 文件名>

概要 2: MAKE\_POP\_FILE

提示: OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/: <POP/DOP 文件名>  
指出新的 \*.POP/\*.DOP 文件的名字，已编辑的实验信息以简单文本格式存入或覆盖这个文件。

### 13.3.7 READ (READ\_WORKSPACE = READ\_BLOCK)

说明: 这个命令（之前为 READ-BLOCK 现在叫 READ-WORKSPACE）与 POLY 模块中 READ-WORKSPACES 命令相同，但它只从由 PARROT 模块中的 SET-STORE-FILE 命令设置的工作文件中读取 POLY 工作空间。

注意:每次进入 ED\_EXP 模块时必须使用这个命令, 如果在 ED\_EXP 模块中还没有使用过这个命令, 就不能使用 PARROT 模块中 LIST-RESULT 和 OPTIMIZE 命令。

概要: READ

提示: Block number /#/ : <n>  
必须给出要编辑的数据块的编号。如果在初始 POP 或 DOP 文件中没有 FLUSH\_BUFFER 命令, 就会只有一个编号为 1 的数据块。

### 13.3.8 SET\_ALTERNATE\_CONDITION

说明: 这是一个特殊的主要用于实验数据 \*.POP/\*.DOP 文件的命令, 但是在 ED\_EXP 模块中也能使用。它仅用于已在 PARROT 模块中开启交互模式时。交互模式的意义在 PARROT 模块的用户手册中有说明(见 第 12.3 节和 第 12.7.4 节)。

这个命令的语法与 POLY 命令中的 SET-CONDITION 相同(见第 8.7.1 节), 同时也要给定误差。

概要 1: SET\_ALTERNATE\_CONDITION <alternate condition(s)>  
每个交互条件(包括普通 POLY 模块下的条件和误差, 如下所示)必须明确地给出, 但可以与命令同行或隔行给出。详情见第 8.3.5 节的条件说明

例:

```
SET_ALT_COND T=1273:5, W(C)=.0015:.0001, X(LIQ,CR)=.22:5%
```

*or*

```
SET_ALT_COND T=1273:5
```

```
SET_ALT_COND W(C)=.0015:.0001, X(LIQ,CR)=.22:5%
```

在这个例子中,用户把温度设为 1273 K, 误差范围为 5 K, C 的质量分数(重量)设置为.0015, 误差范围为 0.0001 wt%, Cr 的摩尔分数设置为 0.22, 误差为 5%。

概要 2: SET\_ALTERNATE\_CONDITION

随后提示: State variable expression: <state variable name or linear expression>

这个问题很模糊, 但希望用户能仅仅给出一个状态变量或状态变量的线性表达式。

一些可作为条件的状态变量:

|   |      |
|---|------|
| T | 体系温度 |
| P | 体系压力 |

|               |           |
|---------------|-----------|
| N             | 体系大小 (摩尔) |
| B             | 体系重量 (克)  |
| W(<成分>)       | 体系成分质量分数  |
| X(<成分>)       | 体系成分摩尔分数  |
| ACR(<成分>)     | 体系成分活度    |
| MUR(<成分>)     | 体系成分的化学势  |
| W(<相>,<成分>)   | 相成分质量分数   |
| X(<相>,<成分>)   | 相成分的摩尔分数  |
| ACR(<相>,<成分>) | 相成分活度     |
| MUR(<相>,<成分>) | 相成分的化学势   |
| H             | 体系焓       |
| HM(<状态>)      | 某一相焓(每摩尔) |

还有更多的状态变量可作为条件，想获得更多信息，可以在 POLY 模块中使用 INFO STATE\_VARIABLES 命令。

一个条件通常就是一个值或单个状态变量的值，例如：

```
T=1273.15
P=1E5
X(C)=.002
W(CR)=1.5
ACR(CR)=0.85
X(FCC,C)=.001
H=-250000
HM(BCC)=-225000
```

一个条件也能是包含多个状态变量的线性表达，例如：

```
X(LIQ,S)-X(PYRR,S)=0
```

这表示一个条件，S 的摩尔分数在液相和磁黄铁矿相中是相同的。事实上，它应为一致共熔的熔点。注意等号后只能有一个数值。

Factor: <a factor for the state variable, or a continuation>

这个问题更模糊，它表示用户没回答之前的问题。这时程序期待一个单个状态变量或一个完全状态变量表达式或表达式的常数因素只能有一个状态变量。在一个状态变量表达式之前必须加上一个常数因素。如：

```
2*MUR(Fe)+3*MUR(O)=-35000
```

这表示 Fe 化学势的两倍和 O 化学势的三倍之和为 -35000 J/mol 应作为一个条件。

State variable: <a specified state variable, or a continuation>

如果“State variable expression”或“Factor”提示中没有给出一个单个状态变量名，或给出一个未完成的状态变量表达式，例如，“T-”或“2\*MUR(Fe)+”，这个问题就会出现，这时程序期待继续输入这个未完成的表达式。这里用户需说明一个状态变量或一个已完成的状态变量的表达式，或完成未完成的状态变量表达式。如果一个数值因子在提示前给出，只能说明一个状态变量；此外，程序只能使用第一个状态变量来完成表达式(如系数乘以状态变量)。

Value /x/: <a numeric value, a constant or a variable>

条件的值。这可以为一个数值，一个常数或变量。建议设为默认值。特殊值 NONE 表示这个条件已被清除。

Uncertainty /NONE/: <uncertainty of the condition>

条件的不确定度。这可以为一个数值，一个常数或变量。预设值 NONE 表示上面已说明的值的确定度为零。不确定度既可是个确定值也可为一个近似值（百分数，x%）

### 13.3.9 SET\_WEIGHT

说明:

每个实验值有一个不确定度，会在 EXPERIMENT 命令中冒号后说明(见第 13.3.1 节)。在优化中实验值与计算值的绝对误差会增加误差的和。

使用 SET-WEIGHT 命令，可以改变一个单独实验点或一组平衡条件的不确定度对误差和的影响。

默认权重都是 1。一个较小的值表示实验应有较小的权重。一个较大值表示实验应有较大的权重。特殊值零表示一组在平衡 ED\_EXP（尤其是 COMPUTE\_ALL\_EQUILIBRIA 命令给出后）中编辑和 PARROT 模块中优化时将被忽略。

注意不同类型的实验值的权重必须达到均衡。例如，如果在相图中只有 5 个成分的实验值却有 500 个焓值或活度值，这 5 个成分点会被给出比 1 更大的权重，否则他们不会被优化程序很好的描述。

概要 1:

SET\_WEIGHT <weight value> <selection>

概要 2:

SET\_WEIGHT

提示:

Value /1/: <weight value>

在特定的平衡中说明“experiments”权重（下一步提示中会被问到）这些实验值对误差和的影响将乘以该权重。值得注意的是这个权重会被平方，因此应使用 0.7 使误差变成一半(0.49)，用 1.4 使其变成两倍(1.96)大。

Equilibria (range) or label(s) /PRESENT/: <selection>

给定学要设置为上面指定的权重的,并在当前文件中已读取的数据块中的平衡。

选项可以以一个范围给出,但平衡数之间必须用一个减号连接起来。注意开始和结束的平衡数必须在当前工作文件已读取的数数据块中存在的。例如, 5-101, 表示所有从 5 开始到 101 结束的平衡。这两个标志符间的一些数字可能在数据库中不存在。

选项可以以一个或多个说明标签给出(要用空格隔开),所有在已读取的数据库中带指定标签的平衡将设置为给定的权重。

按<RETURN> 接受默认值/PRESENT/, 已定义的权重只会被分配到当前实验点(通过 POLY 命令 SELECT\_EQUILIBRIUM 选择)。注意: 使用了如果 COMPUTE\_ALL\_EQUILIBRIUM 命令, 但在后面没选择特定平衡点, 读取区的最后一个点仍是当前点。

### 13.3.10 TRANSFER\_START\_VALUE

说明:

ED\_EXP 模块中一个困难问题是当优化对相中成分初始值敏感而又要计算所有的平衡。通常在某一数据块中都是一些同类型的平衡实验点, 每个实验点设置了一初始值。当已成功计算这样的平衡实验点时, 这个命令能用于把已计算好的平衡位置分数传递给当前实验点。

<平衡数> 为平衡的数字标志符, 这里给定的平衡的初始值会复制给当前实验点, 或按<RETURN>选择前一个平衡。

概要 1:

TRANSFER\_START\_VALUE <equilibrium number>

概要 2:

TRANSFER\_START\_VALUE

提示:

From equilibrium /PREVIOUS/: <equilibrium number>

指定需要将其初始条件复制给当前平衡的平衡数, 默认为前一个平衡, 如果不取默认值, 则需在这里指定你想要的平衡数。

### 13.3.11 STORE\_ALL\_WEIGHTS

说明:

这个命令用于存储新的权重设置, 它是已说明的权重的当前情况, 用于从实验数据块的当前选项读取的所有不同实验点的评估。当用户希望给一些实验点或所有点使用多种权重设置, 然后与不同权重设置的评估结果相比较时, 这是非常有用的。这样已存储的实验设置可以通过连续使用 RESTORE\_ALL\_WEIGHTS 命令调回或重新存入。

概要 1: STORE\_ALL\_WEIGHTS <weight-set name>

概要 2: STORE\_ALL\_WEIGHTS

提示: Command line: <weight-set name>  
给出为所有实验点的当前权重设置的权重设置名（注释行文本）。.

### 13.3.12 RESTORE\_ALL\_WEIGHTS

说明: 这个命令用于恢复一个特定权重设置（已被 STORE\_ALL\_WEIGHTS 命令保存）  
和在当前数据块中的已相继评估过的实验的权重设置。

概要 1: RESTORE\_ALL\_WEIGHTS <weight-set number>

概要 2: RESTORE\_ALL\_WEIGHTS

提示: Set number (0 for list) /0/: <weight-set number>  
为所有不同的实验点指定一个已存储的权重设置。默认值 0 是屏幕上的列表。

### 13.3.13 LIST\_ALL\_EQUILIBRIA

说明: 这个命令用于在屏幕列出从当前到最后的所有平衡点的详情（包括平衡指示物，  
坐标,迭代数目,权重,确定相或成分）。用户可以使用 SELECT\_EQUILIBRIUM  
命令来选择一个特定的点作为这个列表的当前实验点。

提示: LIST\_ALL\_EQUILIBRIA

## 13.4 实验数据文件的其他命令 (POP 或 DOP)

为了对体系进行评估，用确定的语法来描述实验数据，这与在 POLY 模块中计算一个平衡或在 ED\_EXP 模块中编辑实验点用的方法一样。与 Thermo-Calc 宏文件(\*.TCM)类似，实验数据文件(例如 \*.POP 或 \*.DOP 文件)是一个简单的文本文件而且能被任何文本编辑器打开或编辑。由于这个原因，\*.POP 或\*.DOP 文件不依赖于计算机硬件，因此能被 Thermo-Calc 或 DICTRA 在任何 CPU 平台使用。

POP 或 DOP 文件由各种 POLY 和 ED\_EXP 中的命令组成，以及一些特殊的只能在这种实验数据文件中使用的命令。许多实验数据可在\*.POP 或\*.DOP 文件中输入不同的表格；相同类型的实验数据记入同一表格（如下）。

\*.POP 或 \*.DOP 文件在 PARROT 模块中为优化过程提供实验信息，当 PARROT 命令 COMPILE\_EXPERIMENT 开始时由语法检查器来检查。

许多 POLY 和 ED\_EXP 命令可以在 POP 或 DOP 文件中直接使用。但与 POLY 模块或 ED\_EXP 模块命令有一些设置上的不同，而且在此部分已说明的(见第 13.3.1 到第 13.3.3 节)一些特别设计的命令只能在\*.POP 或 \*.DOP 文件中使用。

大部分实验数据文件中的命令与 POLY 模块中的相同。以下列出最常用的命令：

CREATE-NEW-EQUILIBRIUM

CHANGE-STATUS

SET-CONDITION

SET-REFERENCE-STATE

ENTER-SYMBOL

SAVE-WORKSPACE

注意：作为\*.POP 或\*.DOP 中的最后一个命令，应使用 SAVE 命令。

其它 POLY 模块中不常用的可用命令：

DEFINE-COMPONENTS

EVALUATE-FUNCTION

SET-ALL-START-VALUES

SET-NUMERICAL-LIMITS



SET-START-VALUE

SPECIAL-OPTIONS

注意 DEFINE-COMPONENTS 命令应在\*.POP 或\*.DOP 文件中第一个使用，它会自动初始化整个工作空间。

大部分用于 ED\_EXP 模块中的特殊命令也可在 POP 或 DOP 文件中使用。例如：

EXPERIMENT

EXPORT

IMPORT

LABEL-DATA

SET-ALTERNATE-CONDITION

SET-WEIGHT

然而，下面的 ED\_EXP 中的特殊命令是不合法的且不能在\*.POP 或 \*.DOP 文件中使用：

COMPUTE-ALL-EQUILIBRIA

MAKE-POP-FILE

READ (例如, READ-BLOCK 或 READ-WORKSPACE)

TRANSFER-START-VALUES

特殊注释标记，*例如*，一行开始的美元符号“\$”，用于在\*.POP 或 \*.DOP 文件中任何注释的数据行。应记住这个特征在 Thermo-Calc/DICTRA 软件中的几乎所有文件中都相同，*例如*，在 \*.TDB, \*.DAT, \*.TCM, \*.POP/\*.DOP 和 \*.EXP 文件中。这样的符号及同行注释后的信息会被句法检查者跳过忽略。因此，用户会觉得能自由在这些类型的文件上写出注释行。

只有小部分的命令只能在 POP 或 DOP 文件使用。这些命令下面会说明。

### 13.4.1 TABLE\_HEAD, TABLE\_VALUES and TABLE\_END

*说明：* 这些命令只能在\*.POP/\*.DOP 文件中使用。它可以很方便的以表格格式输入相同类型的实验数据点。.

*概要：* TABLE\_HEAD <n>

TABLE\_VALUES

TABLE\_END

注释:

这些命令必须按次序一同使用,表示一个表格起始于 TABLE-HEAD 命令,然后是 TABLE-VALUES 命令,最后由 TABLE-END 命令结束。注意在 TABLE-HEAD 和 TABLE-VALUES 命令之间要有一些定义行(例如,状态变量,参考状态,条件,实验,标记,等)给当前信息类型的实验测定。

在 TABLE-HEAD 命令之后,要有一个类似于单个实验点一样的平衡描述。然后会有一个 TABLE-VALUES 命令,在其后当前实验数据以列的形式给出后。每个表的最后会有一个 TABLE-END 命令。

TABLE-HEAD 命令后必须接一个数值。这用于给表格中所有的平衡生成一个唯一的数字标识符。对于表中每个实验(平衡)点,这个数字标识符会依次增加。这里有一个关于液体中焓测量值的表格的用法。可以使用更精细的表格。

---

```
$ Enthalpies of mixing, Topor and Kleppa, Met Trans 1984
TABLE-HEAD 1
CREATE-NEW @@ 1
CHANGE-STATUS PHASE LIQ=FIX 1
SET-REFERENCE-STATE AU LIQ * 1E5
SET-REFERENCE-STATE CU LIQ * 1E5
SET-CONDITION P=1E5 T=1379 X(LIQ,AU)=@1
LABEL ALH
EXPER HMR=@2:5%
TABLE-VALUES
0.0115 -322
0.0563 -1520
...
0.8499 -2976
0.9002 -2114
TABLE-END
```

---

在 TABLE-HEAD 和 TABLE-VALUES 之间的平衡说明与一个单独实验的平衡说明类似,除在以下方面有所不同:

@@ 这个可用在 CREATE-NEW-EQUILIBRIUM 命令中来自动生成一系列识别的数,代替只生成一个识别的数。这表示在 TABLE-HEAD 命令后的数字给出后,程序会自动生成识别的数。(这时是 1)

@1 表中的值会在@后以列数被指定。在上面的情况,液相中 Au 的摩尔分数为表中的第一列(见 SET-CONDITION 行)。这些列除了数值外可能还有其他信息,可使用相的名称或其它任意文字。如果文件包含

空格或特殊字符，要用被双引号括住在表中，例如，“ABC DEF&ghi”。

语法检查器的一个特点是所有在 TABLE-HEAD 命令之后对平衡的说明的命令要用大写。

在 TABLE-VALUES 命令之后，这里应该有一行对于每个实验测定的相同类型数据或文字复制入条件或由@1, @2 等定义的实验数据。可以有一些未用的列，但每行列数要相同，否则语法检查器会在 PARROT 模块中给出一个错误信息。

### 13.4.2 COMMENT

**说明：** 这个命令只能在\*.POP/\*.DOP 文件中使用，用于在表格中给出的一组实验点或新建的平衡（实验）数据点写入简要的注释或记录型信息。

**概要：** COMMENT <命令>  
这个命令后的注释最多可以有 60 个字符，要写在同一行中。

### 13.4.3 FLUSH\_BUFFER

**说明：** 这个命令只能在\*.POP/\*.DOP 中使用。当实验数据数目需要的空间超出已有的空间时，需要增加缓冲空间。PARROT 程序编译实验数据时，它会报告是否需要 FLUSH 命令。FLUSH 命令会终止当前数据块，把它存入工作文件并开始一个新的数据块。使用 EDIT-EXPERIMENT 模块中的 READ 命令，可以选择不同的数据块来编辑。

在 FLUSH 命令后，工作空间初始化，\*.POP 文件中所有的函数或常数必须重新输入。我们可以利用这一点，例如，在一个\*.POP 文件中使用 FLUSH 命令可以得到含有不同成分数据块。

**概要：** FLUSH\_BUFFER

### 13.4.4 GRAPHICS\_PLOT

**说明：** 预先在 TCCP 中（仅是一些早期版本），这个命令在 ED-EXP 可用于直接绘图，而且与 POLY 模块的 STEP\_WITH\_OPTIONS 命令作用相同，能够进行基于当前选择平衡点的 STEPPING 计算和绘制想要的性质图。详情请参考 *TCCP 用户手册*。

自 TCCQ (TCCP 后的版本)开始, 这个命令被完全改写, 现在的功能也与之前完全不同。现在它可以在 PARROT 模块进行编译的同时帮助直接从 POP 文件创建一个实验数据文件。根据用户指定, 而可以设置很多的数据组以及不同的符号。当 POP 文件在 PARROT 模块中编辑时, 这个命令会自动执行。

*概要 1:* GRAPHICS\_PLOT <Dataset#> <X 值> <Y 值> <Symbol index>

*注释:* 注意: 这个命令现在与 ED-EXP 模块无关, 而且不能在这个模块中使用, 尽管它仍列在命令目录中。

## 14 System Utility Module (SYS)

### 14.1 简介

Thermo-Calc 和 DICTRA 的经典版本都含有一个所谓的系统效用模块（在 SYS 提示下），此模块对模块之间交流，MACRO-文件的创建和操作，工作和绘图环境设置，以及命令信息搜寻提供（实施）主要控制。它们在正确的执行普通计算，获得理想的计算结果，以及轻松管理（引导）各项任务等方面是必不可少的。

它同样能够促进一些奇异功能的实施，如用户界面设置，命令集合设置，错误报告优先权，终端特征定义，工作空间列表，通过一个单位打开或关闭一个文件，交互式计算器，信息检索等。有些奇异命令是针对用户对命令执行的不同偏好设计的，而有一些是为程序员排除故障设计的。少量的奇异命令是为一些特殊目的设计的，可能在最近的版本已经过时了。

SYS 模块中存在以下命令：

---

```

SYS: ?
BACK HP_CALCULATOR SET_INTERACTIVE_MODE
CLOSE_FILE INFORMATION SET_LOG_FILE
EXIT MACRO_FILE_OPEN SET_PLOT_ENVIRONMENT
GOTO_MODULE OPEN_FILE SET_TERMINAL
HELP SET_COMMAND_UNITS STOP_ON_ERROR
SYS:

```

---

自 TCCR 该注意的事项：

- ✎ 5 个 SYS 命令已从 SYS-模块监视器中删除（相应的，在 TCCR 用户手册中有关这些命令的说明也从本章删除），因为它们通常仅用于排除系统故障，或已经过时，或完全不相干。这样的命令有：NEWS，LIST\_FREE\_WORKSPACE，PATCH，SET\_ERROR\_MESSAGE\_UNIT 和 TRACE。
- ✎ 14.3 小节（普通信息展示）已完全从 TCCR 用户手册的这一章中删除。然而，为了获取 SYS 模块中的有关各种主题的信息，用户可以使用 TCCR 软件的在线帮助功能，例，在 SYS 模块中输入 INFORMATON <SUBJECT>命令序列，程序随即会在屏幕上显示一些有关某一特定主题的简短信息，该主题往往与 Thermo-Calc 软件/数据库/接口程序包有关。
- ✎ FOP 模块（FUNC\_OPT\_PLOT, 简单函数优化器和绘图设备；用于函数/参数的数学填充以及绘图）已从 TCCR 软件中完全删除。用户应使用 PARROT 模块代替该模块，以进行关键性的热力学评估。
- ✎ 与此同时，SYS 命令 SET\_ECHO（很长一段时间里，此命令在 TCC 和 DICTRA 软件中不完全存在）被本章在 TCCR 用户手册中的现行（最新）版收录（记录）。参见 14.2.6 和 14.2.8 小节。

↔ *Revision History of the SYS Module User's Guide:*

|           |                                                                 |
|-----------|-----------------------------------------------------------------|
| Mar 1985  | First release (Edited by Bo Sundman)                            |
| Oct 1993  | Second revised release (Edited by Bo Sundman)                   |
| Sept 1996 | Third revised release (Edited by Mikael Schalin and Bo Sundman) |
| Jun 2000  | Fourth revised and extended release (Edited by Pingfang Shi)    |
| Nov 2002  | Fifth revised release (Edited by Pingfang Shi)                  |
| Jun 2004  | Sixth revised and extended release (Edited by Pingfang Shi)     |
| Aug 2006  | Seven revised and simplified release (Edited by Pingfang Shi)   |

## 14.2 一般命令

### 14.2.1 HELP

**说明:** 此命令列出所有可用命令或解释某一指定命令。指定命令的扩充解释将会被给出。

要查看的命令可以是缩写形式。下划线或连续字符可用于隔开命令字符。命令以空格终止，用户可以在命令的同一行输入任何语句对命令进行解释。用户也可在命令后点击<RETURN>键，程序会自动提示用户输入解释语句。语句必须按照程序的提示所确定的顺序输入。

**概要 1:** HELP <command name>

**概要 2:** HELP

**提示:** COMMAND: <command name>

**选项:** command name --要获取帮助的 SYS 模块命令名称。.

**注意:** 在不输入任何命令名称情况下，按<RETURN>键，程序可以列出所有可用的 SYS 命令。

指明一个特定 SYS 命令，程序就会在屏幕上打印出该命令的详细信息（内容通常与用户指导手册保持一致）。

输入非特定（唯一）的命令缩写，程序将会列出所有符合命令缩写的命令，通过输入命令特定缩写或命令全称可以获得想要命令的信息。

### 14.2.2 INFORMATION

**说明:** 此命令给出 Thermo-Calc 软件系统的功能信息。当各种（多种）主题（概念和模块）在手册的不同部分被描述时，可以获得有关它们的基本信息。想要阅读此命令展示的简短信息的用户，请参见 14.4 小节。

**概要:** INFORMATION

**提示:** WHICH SUBJECT /PURPOSE/: <subject name>

主题的名称必须给出。关于各种模块的更详细的信息如下表所示(输入问号“?”，程序就会显示这个目录):

---

|                                                                  |                                   |
|------------------------------------------------------------------|-----------------------------------|
| PURPOSE (Introducing the THERMO-CALC Software Package)           |                                   |
| COMPUTATIONAL THERMODYNAMICS                                     |                                   |
| TCC - THERMO-CALC CLASSIC                                        | TCW - THERMO-CALC WINDOWS         |
| TC4A - THERMO-CALC FOR ACADEMIC                                  | TC4U - THERMO-CALC FOR UNIVERSITY |
| MODELS IN THERMO-CALC                                            | MODULES OF THERMO-CALC            |
| DATABASES IN THERMO-CALC                                         | FUNCTIONALITY OF THERMO-CALC      |
| STATE VARIABLES                                                  | DERIVED VARIABLES                 |
| PHASE DIAGRAMS                                                   | PROPERTY DIAGRAMS                 |
| TDB (DATABASE RETRIEVAL)                                         | GES (GIBBS_ENERGY_SYSTEM)         |
|                                                                  |                                   |
| POLY (EQUILIBRIUM CALCULATIONS)                                  | POST (POST_PROCESSOR)             |
| PARROT (ASSESSMENT)                                              | ED_EXP (EDIT_EXPERIMENT)          |
| BIN (BINARY_DIAGRAM)                                             | TERN (TERNARY_DIAGRAM)            |
| POT (POTENTIAL_DIAGRAM)                                          | POURBAIX (POURBAIX_DIAGRAM)       |
| TAB (TABULATION)                                                 | CHEMICAL EQUATION                 |
| SCHEIL (SCHEIL_SIMULATION)                                       | REACTOR (REACTOR_SIMULATOR)       |
| SYS (SYSTEM_UTILITY)                                             | FOP (FUNCTION_OPT_PLOT)           |
| USER INTERFACE OF THERMO-CALC                                    | GUI (GRAPHICAL USER INTERFACE)    |
| APPLICATIONS OF THERMO-CALC                                      | THERMO-CALC ENGINE                |
| API - PROGRAMMING INTERFACE                                      | TQ/TCAPI INTERFACES               |
| TC-TOOLBOX IN MATLAB SOFTWARE                                    | TCMI MATERIALS INTERFACE          |
| DICTRA (Diffusion-Controlled Transformation Simulation Software) |                                   |
| HELP (How to get on-line help in the TCC software)               |                                   |
| NEWS (Revision History and New Features of the TCC Software)     |                                   |

---



### 14.2.3 GOTO\_MODULE

**说明:** 此命令用于模块间的切换，而且必须要输入目标模块名称。按<RETURN> 键，程序会给出一列可用模块（参见 5.4.11 小节）。

**概要 1:** GOTO\_MODULE <module name>

**概要 2:** GOTO\_MODULE

**提示:** MODULE NAME:  
NO SUCH MODULE, USE ANY OF THESE:  
SYSTEM\_UTILITIES  
GIBBS\_ENERGY\_SYSTEM  
TABULATION\_REACTION  
POLY\_3  
BINARY\_DIAGRAM\_EASY  
DATABASE\_RETRIEVAL  
REACTOR\_SIMULATOR\_3  
PARROT  
POTENTIAL\_DIAGRAM  
SCHEIL\_SIMULATION  
POURBAIX\_DIAGRAM  
TERNARY\_DIAGRAM  
MODULE NAME: <module name>

**选项:** module name -- 随后打开的模块的名称

### 14.2.4 BACK

**说明:** 此命令将控制转向最近使用过的模块。在某些情况下，程序需要在 Thermo-Calc 软件中的两个模块间反复切换，而且这个命令比一般命令 GOTO\_MODULE 更简单。

**概要:** BACK

### 14.2.5 EXIT

**说明:** 此命令用于终止程序，并回到操作系统。如果一个 SAVE 命令未被执行（在 GES，POLY3，PARROT 或 REACTOR 模块中），所有数据和结果将会丢失。

概要: EXIT

## 14.2.6 SET\_ECHO

说明: 此命令是为在 TCC（和 DICTRA）软件的 MACRO 文件中使用而专门设计的，通过在 MACRO 文件（如果 MACRO 文件还要调要子 MACRO 文件的话，也可以在主 MACRO 文件）的开始处添加此命令，程序能够极其便捷的，并且是非常有用的自动在显示屏上显示 TCC（和 DICTRA）软件根据 MACRO 文件实施的各种命令序列操作的所有细节。当不是使用 MACRO 文件，没必要使用这个命令。

概要: SET\_ECHO

## 14.2.7 SET\_LOG\_FILE

说明: 此命令能够将用户输入到 Thermo-Calc 软件中的所有信息保存在一个简单的文本文件中。当执行命令序列出现问题时，此命令可用于将输入的命令保存在一个 log 文件上。随后用户可以检查出错误是什么。

此命令也能使系统重复所有已输入的命令。此功能在系统演示时十分有用，因为命令的缩写形式对于一个新用户来说很难掌握。

已保存的 log 文件可以使用一个简单的文本编辑器编辑为一个 MACRO 文件。这对运行 MACRO 文件进行相似计算（同一系统，但温度-压力-组成条件稍微改变）或者运行 Thermo-Calc Examples MACRO 文件很有用。详见 14.2.7 小节。

概要: SET\_LOG\_FILE

提示: OUTPUT FILE: <file name>  
必须给定命令序列所保存的目标文件的文件名。

注意: 在 Windows NT/2000/XP 或 Windows 95/98/ME 环境下，如果执行命令后，文件名没有在命令后给出，屏幕上会自动弹出一个如图 14-1 所示的另存为的窗口，这样用户就可以指定保存路径（在保存位置窗口中）和文件名（在文件名窗口中）。如果在当前工作目录下存在一个同名的\*.LOG 文件，此文件将会被替换。

文件类型（如 LOG，当在**另存为类型** 窗口）不能被改变。通过点击保存按钮，程序就会继续将所有命令序列保存到指定的\*.LOG 文件中。

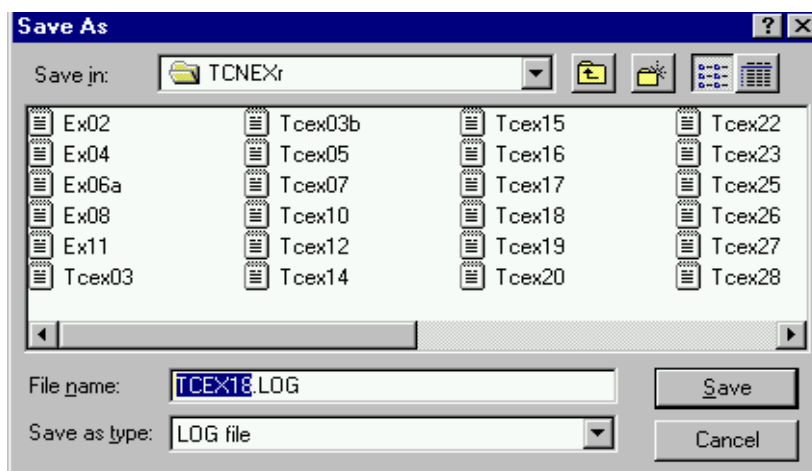


Figure 14-1. “另存为” 窗口：将所有命令保存到一个 \*.LOG 文件中。

## 14.2.8 MACRO\_FILE\_OPEN

说明:

在一个简单的文本文件（一般在 TCC 中默认扩展名为“TCM”，在 DICTRA 中为“DCM”）中，使用 MACRO 预定义一系列的命令并随后使用该命令执行这些命令的操作是十分方便和容易的。此命令可在多种模块中运行（TCC 软件中的 SYS, POLY, PARROT 和 TAB 模块；DICTRA 软件中的 SYS, POLY 和 DICTRA\_Monitor 模块）。

在做仅有稍微变化（在系统定义，条件，图形绘制设置方面）的相同/类似计算时，这是十分有用的。一个很好的例子就是在评估一个体系时使用这一功能。有了 MACRO 文件，各种合法的 TCC（和 DICTRE）命令都可存储在该文件中，你只需要在文件名前输入 MACRO 命令就可以完成此操作。

MACRO 文件可含有任意合法的 TCC（和 DICTRE）命令。MACRO 必须以 EXIT 命令终止，或者使用 SET\_INTERACTIVE 命令中断到 SYS, GES, POLY, PARROT 或者 POST 模块中。

MACRO 的一种有趣功能：能和用户进行交互式的处理，因此你可以通过以下方式输入：

```
GO POLY-3
SET AXIS VAR 2 T
@?Low-temperature-limit
@?High-temperature-limit
```

MACRO 将会在“@?”处停止，在屏幕上会显示出“?”后的文字，然后等待用户输入。它会把用户输入作为 Thermo-Calc 程序的输入。在上面这种情况下，要输入的是温度轴的最低值和最高值。

用户也可以定义 MACRO 变量，记作#1，#2，等等，最多 9 个变量。他们可以通过以下命令赋值：

```
@#3First element?
```

这会将内容写在“@#3”后面作为对用户的提示，并等待用户输入，输入的内容将会赋给 MACRO 变量 3，你可在 MACRO 的不同地方使用这些变量，例如：

```
DEFINE-SYSTEM ##3
```

MACRO 变量 3 内容的文本拷贝将被插入到“##3”，你也可以在更复杂的命令中使用它。

```
SET AXIS VAR 1 x(##3) 0 1,,,
```

命令将 MACRO 变量 3 的摩尔分数设定为轴 1。

再次注意，当程序处在 POLY, POST, SYS, GES 或 PARROT 模块中时，必须使用 SET\_INTERACTIVE 命令来终止 MACRO 命令。

MACRO 文件可以在“@&”处有暂停，但通过在 MACRO 文件名后输入非 y 字母可以阻止文件中的任何暂停。

MACRO 文件中可能含有很多以“@@”符号开头的注释行。这些注释行在处理 MACRO 文件时提供了很大帮助，但它们不被当作是命令行，因此也不会被 TCC 所调用的 Thermo-Calc 命令的运行产生影响。

MACRO 文件可由 TCC 软件自动生成，如果在 SYS 模块中使用 SET\_LOG\_FILE 命令，并且 \*.LOG 文件名在任何 SYS/TDB/TAB/GES/POLY/POST/PARROT/ED-EXP 命令或特殊的模块命令之前已经给定，这样一个 \*.LOG 文件是一个简单的文本文件，使用任一简单文本编辑器（如 Notepad, Wordpad, PFE, Emacs, vi 等等），都可以对它进行进一步的编辑。如删除一些非必须的命令行，修改一些命令，设定和定义，增加一些暂停点，增加一些以“@@”符号开头的注释行，等等。然后可将它保存为标准扩展名为“TCM”的 MACRO 文件。

有经验的用户也可以简单的文本编辑器而不依赖与 TCC（和 DICTRA）软件简单的编写合适的 MACRO 文件来进行合适的计算或模拟。

自 TCCN 版本开始，一个 MACRO 文件可以有 5 级嵌套，如一个 MACRO 文件可以调用另一个 MACRO 文件，而且如果一个次级的 MACRO 被 SET\_INTERACTIVE 命令终止，它会还会到它的上级 MACRO 文件调要它的地方并继续执行后面的命令。如果是被 end-of-file 命令终止，则 TCC 程序会终止。这个功能的好处能在很多不同的方面得到利用，特别是当用户进行合金设计时，在一确定的时期中（*比如说在傍晚*），这个设计需要在类似的材料体系/过程中（指定一些已经准备好的最多 5 级调用的 MACRO 文件）进行很多（上百的）计算/模拟时，用户可以在离开工作室前简单的通过运行 MACRO 文件（最顶层的），然后（*例*，第二天早上）用户可以系统地，高效地检查/对比/分析结果（已作为绘图文件或 EXP/TXT/XLS/... 文件保存）。

值得提醒的是：通过简单的在 MACRO 文件[或是最顶层的主 MACRO 文件，当有次级 MACRO 文件正在被使用的情况下]开始处添加 SYS 模块命令 SET\_ECHO，它能够极其便捷的自动的在显示屏上显出在 TCC（和 DICTRA）软件中所有相继运行的已完结的各命令执行的详情，这是由 MACRO 文件强制执行的。

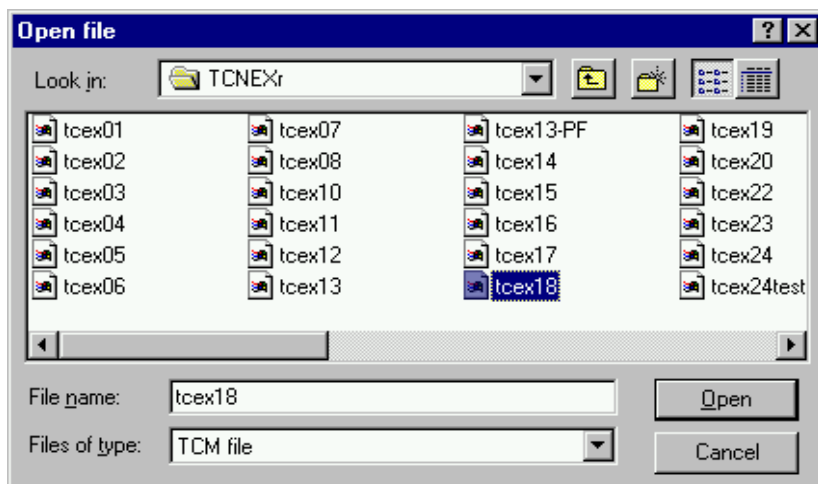
概要 1: MACRO\_FILE\_OPEN <name of a Macro file>

概要 2: MACRO\_FILE\_OPEN

提示: Macro filename: <name of a Macro file>  
和 MACRO 命令一起指定文件名。默认扩展名为“TCM”。

注意: 在 Windows NT/2000/95/98/ME 环境下，如果在命令后没有给出一个适当的 MACRO 文件名，那么会弹出一个如图 14-2 的 **打开文件** 对话框，这样路径（在**查找范围**对话框）和文件名（在**文件名**对话框）可以正确的指定。

文件的类型（如在**文件类型**窗口中的 TCM 类型）不能改变。通过按下“**打开**”键，程序会开始执行各 Thermo-Calc 命令。用户也能取消这个“**打开文件**”窗口，这样的话，当前 MACRO 文件将不会被打开。



**Figure 14-2. 打开一个已有的 TCM 文件时的“打开文件”对话框**

如果 MACRO 含有 SYS/TDB/TAB/GES/POLY/POST/PARROT/ED\_EXP 模块的命令用于设置\*.LOG 文件, 读取/保存 GES5/POLY3/PARROT 工作空间, 切换用户数据库, 编译实验数据文件(从已有的\*.POP 文件), 创建新的\*.PAR 文件, 绘制/备份图表, 等等, 会在屏幕上弹出一个对应的窗口(如 **另存为**, **打开文件**, **打印**等)。如果用户希望不弹出该类对话框的话(或是用户知道在一个 MACRO 文件中的一个确定的点上该做什么的话), 通过在命令后紧跟着输入文件名(最好带有文件扩展名; 如果文件不在 MACRO 当前工作目录下, 需要给出正确而完整的文件路径)且有时在相应的命令后给出相关参数/选项后, 就将不会有这个弹出窗口。详见相关的命令和模块。

**注意:** 当使用一个 MACRO 文件在屏幕上绘图时, 而默认的绘图环境已经用命令 SET\_PLOT\_FORMAT 改变过了, 首先要使用 SET\_PLOT\_FORMAT 将绘图环境返回到默认值将很重要。例如, 1 (Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME) 或 9 (Linux 和 UNIX 平台的所有类型)

更多举例, 请参考 TCC 安装目录下\TCEx\和 **TCCR Examples Book** 中的各 TCM 文件

## 14.2.9 SET\_PLOT\_ENVIRONMENT

**说明:** 这个命令允许用户在初始文件 tc.ini 上设置一个他通常使用的绘图设备, 因为在不同的 Thermo-Calc 安装环境中, 这个可能不同。  
**注意:** 这个命令必须是使用一个空行或两个逗号终止。

**概要:** SET\_PLOT\_ENVIRONMENT

**提示:** DEFAULT PLOTDEVICE NUMBER /default number/: <device number>

这里给出的数字与每个绘图设备都必须是唯一对应的。为了在屏幕上标绘 Thermo-Calc 图, 通常要选择默认值, 例如, 在 PC Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 平台上的 MS-Windows 或 IBM-VGA 为 1 而在 PC-Linux 和 UNIX 平台所有类型上的 X-Windows 为 9。其他可用的设备号是 (如 PostScript portrait mode, PostScript landscape mode, HP7550 plotter 等。)用于硬拷贝的。

使用问号“?”通常会给出在 Thermo-Calc 中可用的绘图设备的列表。

PSEUDO FILE NAME: <Pseudo-file name>

这里给出的名字是一个当用户需要图表输出文件时可用于参考物理绘图设备的符号。

PLOTDEVICE NUMBER /1/: <device number>

这个数字指定绘图设备的类型。

PLOT FILE NAME: <file name or printer name>

系统水平的图形设备名。（文件名或打印机名）

输出举例:

SET\_PLOT\_ENVIRONMENT 1 lasp 5 a0tr,,

这个例子设置默认的设备号为1(通常PC-Windows为1,及 PC-Linux 和 UNIX 所有平台类型为 9), 且定义一个别名为 lasp 的绘图设备 5 并连接在名为 a0tr 的打印机上。

## 14.3 Odd Commands

### 14.3.1 SET\_INTERACTIVE\_MODE

说明:

这个命令重新将输出输入值设定为初始值,例如键盘,屏幕。记住加入这个命令作为你的 MACRO 文件的最后一个命令,这样当运行 MACRO 命令时你能与交互式的与软件对话了。

概要:

SET\_INTERACTIVE\_MODE

### 14.3.2 SET\_COMMAND\_UNITS

说明:

这个命令对于读取已经由文本编辑器准备好的输入文件的结果是很有用的。这些输入结果可以是一个表格里的数值或大量的参数值。文件必须由 OPEN\_FILE 命令打开(见第 14.3.8 节)  
注意:在从一个输入文件读取任何输入值之前,输入文件的第一和第二行会被跳过。

概要:

SET\_COMMAND\_UNIT

提示:

INPUT UNIT NUMBER /5/: <input unit number>

指定从 OPEN\_FILE 命令返回的输入单元数值。下一个命令会从连接在这个单元数值的文件中读取。为了返回到从键盘读入数值,当你是在



POLY, POST 或 SYS 模块中时, 文件中的最后指令必须是 EXIT 或 SET\_INTERACTIVE。默认值为当前的输入单元。

OUTPUT UNIT NUMBER /6/: <output unit name>  
指定由 OPEN\_FILE 命令中返回的输出单元数值。

### 14.3.3 STOP\_ON\_ERROR

**说明:** 这个命令对于在进行批处理时, 为了防止不正确的指令程序对电脑造成的不必要的时间浪费是很有用的。如果使用选项 ON 开启该功能, 程序会在一个非法的或不明确的命令后终止。如果使用选项 OFF 就可能重设这个命令的作用 (关闭该功能)。这命令的默认值为 ON。

**概要:** STOP\_ON\_ERROR <argument>  
在 STOP 命令后给出你想要的选项 (ON 或 OFF)。

### 14.3.4 OPEN\_FILE

**说明:** 用户可以使用该命令打开一个文本文件, 并且必须指定一个单元值, 程序会自动分配一个单元值。

**概要:** OPEN\_FILE

**提示:** FILE NAME: <file name>  
必须指定一个合法文件名。

### 14.3.5 CLOSE\_FILE

**说明:** 一个已打开的文本文件可用这个命令关闭。

**概要:** CLOSE\_FILE

**提示:** UNIT NUMBER: <unit number>  
一个已被程序用 OPEN\_FILE 命令的给出的单元值必须被指定。

### 14.3.6 SET\_TERMINAL

**说明:** 这个命令已经过时。之前它用于定义终端的属性。现在，通过包交换网络连接的用户通常有 PAD 提供的在屏幕上显示批处理命令行，因此他们就对由主机提供的在屏幕上显示批处理命令行不会感兴趣。

**概要:** SET\_TERMINAL

**提示:** Number of lines shown before stop on full screen /0/:  
<number>

指定退出前你所希望全屏显示的那些行的数值。

XON/XOFF enabled? /Y/: <YES or NO>

给出回答 (Y 或 N)。

Use EMACS like line editor? /N/: <YES or NO>

请注意这个编辑器仅在 VMS 机器上可使用。因此你需要按<RETURN>键接受默认值 NO。

Are you using packet-switched networks "X.25"? /N/: <Y or N>

给出回答 (Y 或 N)。

## 14.3.7 HP\_CALCULATOR

**说明:** 这是一个简单的 QBA 交互式计算器，使用逆波兰表示法:

---

```

REVERSE POLISH CALCULATOR
 0.0000000E+00
HPC>?
This is a calculator with HP flavour
Input are numbers, + - * / and ^ and OPCODEs.
Use HELP to list OPCODEs.
Several numbers an operations can be given on one line.
The content of the X register is displayed after each
operation

Example input: 30000 8 / 1273 / chs 1.5 3 ^ + exp 2 *
Computes 2*EXP(1.5**3-30000/(8*1273))

```

---

**概要:** HP\_CALCULATOR

**注意:** 所有可用的 OPCODEs (HPC 代码) 在下面列出:

HPC>HELP

|       |           |            |         |            |           |
|-------|-----------|------------|---------|------------|-----------|
|       | BACK      | CLX        | HELP    | RCL_REG    | SQRT      |
| [ACOS |           |            |         |            |           |
|       | CHSIGN    | COS        | LN      | ROT_STACK  | STO_REG   |
| [ASIN |           |            |         |            |           |
|       | CLEAR_REG | DISPLAYREG | LOG     | SHOW_STACK | SWITCH_XY |
| [ATAN |           |            |         |            |           |
|       | CLSTACK   | EXP        | POWER_2 | SIN        | TAN       |
|       | HPC>      |            |         |            |           |

必须使用 BACK 命令离开 HP\_CALCULATOR 而回到 SYS 模块中。

## 17 附录和索引

本章包括以下附录：

**附录 A：经典 Thermo-Calc 的文件类型和联系**

**附录 B：经典 Thermo-Calc 的快速参考卡片**

**附录 C：状态变量和派生变量的单位**

**附录 D：关于参考态和标准态**

本章给出了所有 Thermo-Calc 命令的两个索引目录（分别通过各种 TCC 模块和各种类型的文本文件来使用），以及 TCCR User's Guide 各部分中的一些数据和表格的列表（和从 TCC User's Guide 中摘录出来并移至四个独立的文件的那些章节中的数据和表格）

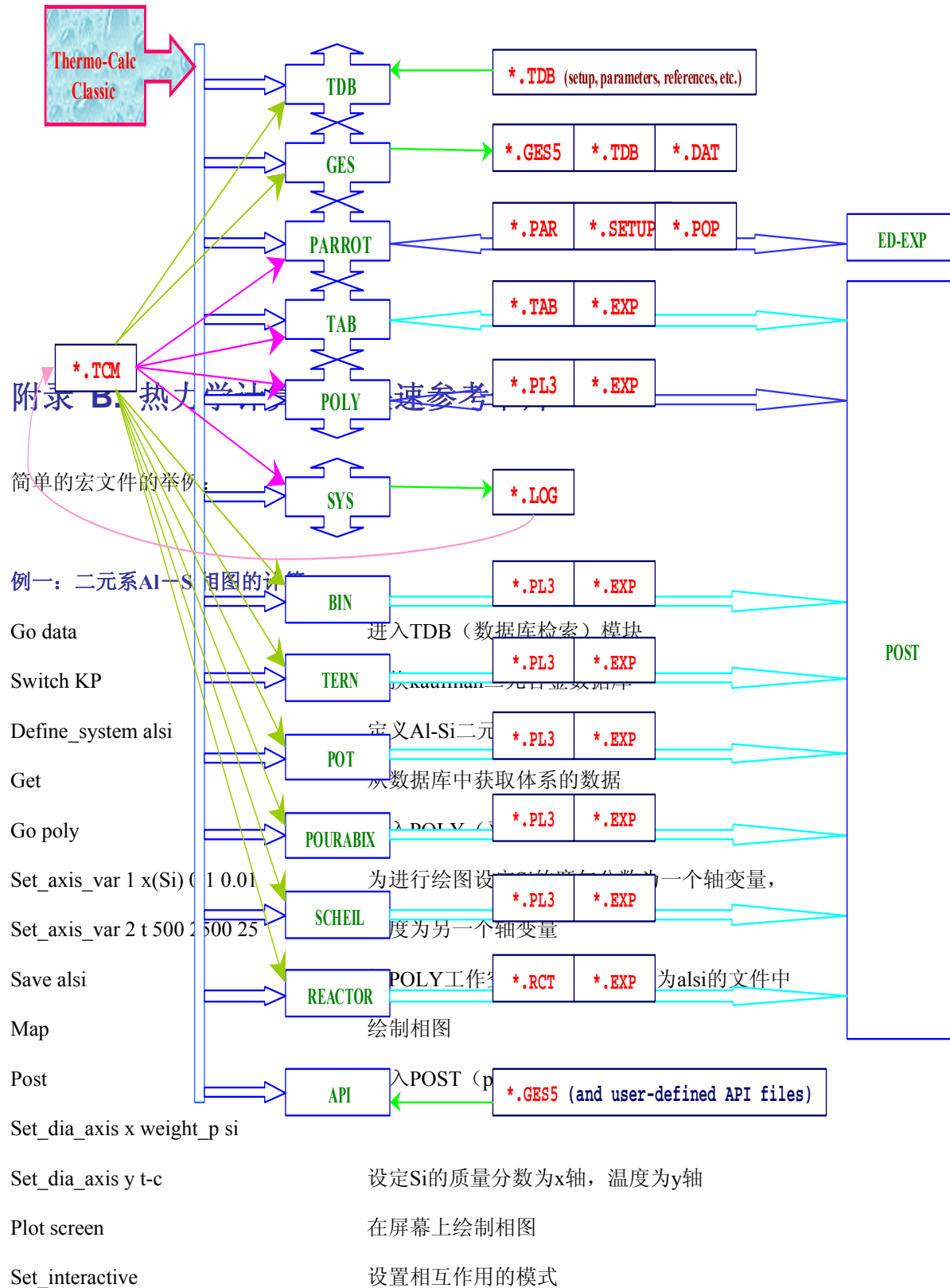
（过去曾在 TCCP/TCCQ User's Guides 中出现）一些名词的索引已经从本版本中删除。

其它一些表格（比如：TCC/TCW/DICTRA 课程应用表格，TCS 订单选项表格和许可保证）已经发表在我们的网站（[www.thermocalc.com](http://www.thermocalc.com)）。如果你感兴趣和愿意的话，你可以下载这些表格，将它们填好后返回给我们。

如果你需要其他表格，请以联系我们：

|                                                                  |                             |
|------------------------------------------------------------------|-----------------------------|
| <a href="mailto:info@thermocalc.se">info@thermocalc.se</a>       | 关于各种软件/数据库 /接口程序以及他们的应用的信息； |
| <a href="mailto:support@thermocalc.se">support@thermocalc.se</a> | 对于技术 问题和故障问题 的报告、建议或意见；     |
| <a href="mailto:consult@thermocalc.se">consult@thermocalc.se</a> | 对详细情况的咨询；                   |

## 附录 A. 热力学计算软件代表文件类型和联系



## 例二：不锈钢氧化层相图的计算和绘制

|                                   |                                  |
|-----------------------------------|----------------------------------|
| go data                           | 进入 TDB(数据库修改) 模块                 |
| switch SSOL                       | 切换到SGTE溶液数据库获取钢铁的数据              |
| define_system fe c cr v mn si     | 定义Fe-C-Cr-V-Mn-Si钢铁体系            |
| rej ph / all                      | 排除所有的相                           |
| res ph fcc bcc hcp cem m23 m7 gra | 恢复一些相                            |
| get                               | 从SSOL数据库获取钢铁数据                   |
| append SSUB                       | 从SGTE物质数据库中添加工氧化物/气体数据           |
| define_system fe c cr v mn si     | 定义Fe-C-Cr-V-Mn-Si钢铁体系            |
| get                               | 从SSUB 数据库中提取消化物 /气体数据            |
| go poly                           | 进入 POLY(平衡计算)模块                  |
| s-c t=973 p=1e5 acr(o)=1e-16      | 设定平衡条件T-P和acr(o)                 |
| s-c b(cr)=16 b(c)=1 b(v)=0.1      |                                  |
| s-c b(si)=0.3 b(mn)=0.3           | 设定钢炉中 Cr-C-V-Mn-Si各合金元素的质量百分比    |
| s-c n=1                           | 其余的成分设定为 Fe,平衡时 b(Fe)=82.3       |
| set_ref_state o gas *1e5          | 将当前的温度T和1bar设定为气相中O的参考态          |
| c-e                               | 计算平衡态                            |
| l-e                               | 列出计算好的平衡态                        |
| s_axis 1 acr(o) 1e-17 1e-10 2*    | 把acr(o)设定为逐步变量,( 2*表示一个以2为因子的步长) |
| save oxides                       | 把POLY 工作空间保存到一个名为 oxides的文件中     |
| step normal                       | (通过对几个平衡态自动计算的 NORMAL 选择)        |
| 推进相图                              |                                  |
| post                              | 转至POST(post-processor)模块         |
| set_dia_axis x acr o              |                                  |
| set_dia_axis y bp(*) *            | 把 acr(o)作为 X轴,所有平衡相的质量分数作为另一轴    |
| set_lable_curve d                 | 打开曲线标定选项D                        |

|                     |              |
|---------------------|--------------|
| set_axis_type x log | 用常用对数缩放X轴的比例 |
| plot screen         | 在屏幕上绘制相图     |
| set_interactive     | 设置交互模式       |

要想获取更多信息,请咨询 TCC User's Guide,Examples Book 和技术服务,通过以下方式:

电话: +46-8-7909718; 传真: +46-8-6733118;

电子邮件: [support@thermocalc.se](mailto:support@thermocalc.se);

网址: <http://www.thermocalc.se>

### 经典Thermo-Calc快速参考卡片

#### 模块, 用户界面和命令

Thermo-Calc由几个模块组成, 其中最重要的是数据库模块, 平衡态计算的POLY模块, 绘图的后处理器和列举和操作数据的吉布斯能系统(GES)。

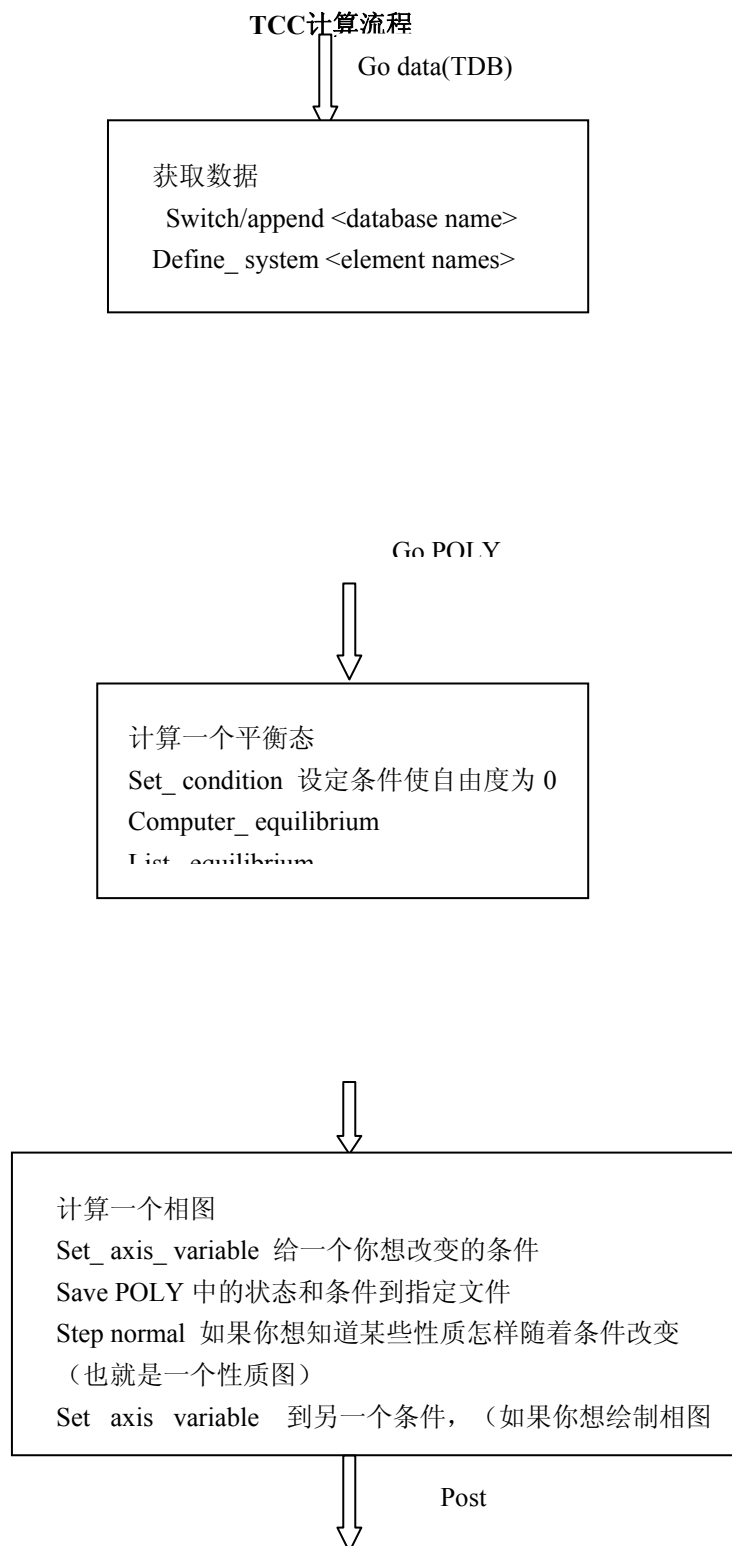
在所有的模块中有一个HELP命令用来描述各种命令和INFORMATION命令来给出大致的信息。大多数命令很长而且可能是由连字符或下划线连接的几个词组成。(下划线和连字符具有相同含义)。命令也可能被缩写, 而且各个单词也可独立地被缩写。命令可以提出问题, 通过按"?"可以提供在线帮助。GOTO和BACK 命令用于在各个模块间来回切换。

#### 设定条件

使用Thermo-Calc 整个秘密所在就是学习和理解设定条件的灵活方法。各个条件是相互独立的, 而且是通过具体指定状态变量的值而进行设定的。Thermo-Calc有大量可以使用的状态变量(见下一部分)。在一些便于使用的高级模块中, Thermo-Calc也提供了以预定义的方式来计算一些具体的东西, 像二元和三元系相图, 势的相图, Pourbaix 相图, Scheil-Gulliver凝固通道等。在一般情况下, 你必须自己为每个计算设定合适的条件。然而, 你可以用进行特定的计算所需要的命令来创建宏文件, 在后边的两个例子就是简单的宏文件。

需要设定的条件个数是由吉布斯相律给出的, 即组元的个数加二(温度和压强)。如果是两个组元你就必须设定四个条件。最简单的条件就是温度, 压强和各种组元的量。在某些情

况下，人们更愿意去使用次要组元的分数，而不是总量,然后他可以通过给定这个体系总的摩尔数或质量来将体系规定为封闭的。





绘制相图

Set\_diagram\_axis 给你想绘图性质

Set\_plot\_format 给你使用的绘图设备

Set\_label\_curve 给你想要确认曲线的选择

Plot 相图，你可以用不同

.....

但是你可以使用任何种类的在反应，化学势及焓等不同条件上的化合。注意除非你自己定义了成分，否则体系中的成分就是要素。你可以通过set\_input\_amount命令来设定其它成分的量。你也可以通过设置条件值为NONE来删除一个条件。

### 状态变量

在Thermo-Calc 中你用热力学状态变量来设定条件比如set\_condition t=1273。在post\_processor中它们也被用来绘制结果并且可以通过显示命令来获得它们的值。状态变量是根据一般公认的标准来命名的。最重要的状态变量有：温度T，压强P (Pa)，摩尔数N，活度ACR (<component>)，化学势MUR(<component>) (J/mol)。一种成分总的摩尔分数x(<component>)，一种成分总的质量分数w(<component>)。注意，不能把摩尔分数或质量分数作为一个条件来详细说明，但它可以通过输出set\_diagram\_axis命令或一个功能函数来得到。

任何一个热力学量的值都可被设定或通过使用一个象征名来的得到。例如(SI单位中的所有值)：吉布斯能G，熵S，焓H，体积V，亥姆霍兹能A。

状态变量G，H等是整个体系的值。你可以通过使用每摩尔，单位质量或每单位体积离开常化这些量，比如某种成分单位摩尔的吉布斯能用GM表示，单位质量体系的吉布斯能用GW，单位体积体系的吉布斯能用GV，你可以通过使用当前某一定量的某相的吉布斯能G(<phase>)来设定或获得单相的各个值（注意，如果相的量为零，则G(<phase>)为0）。一个常化后的量是独立的，所以GM(<phase>)就是每摩尔成分的吉布斯能，GW(<phase>)就是单位质量的吉布斯能，GV(<phase>)就是对每相单位分子的吉布斯能。

一种成分的量可通过摩尔数N(<component>)或成分的质量B(<component>)给出。N或B代表了整个体系的大小。

某相的量可被设定或获得，就像用状态变量NP(<phase>)来获得相中成分的摩尔数或用BP(<phase>)来得到相中成分的质量一样。NP的值是与相的分子 单位独立的，但可能依赖你已经确定了的成分。BP和NP都可归一化，BPV(<phase>)就是某相的密度。

某相的驱动力 可通过状态变量DGM (<phase>)或DGF(<phase>)来获得。它的值是RT的倍数，而且是没有范围的。注意DGM和DGF不能被当作条件使用。

相中不同成分的比例是一个模型依赖量，但可以和状态变量Y(<phase>,<component>)一起设定或获得。当你必须要说明添加的格子数时，用一个“#”，后面写上你要添加的格子数目。

Thermo-Calc的一个特征就是它通过给出独个相的量来设定条件的能力。除了上面给出的热力学量，你可能用到如：相中某一成分的质量分数W(<phase>,<component>)，相中某一成分的摩尔分数x(<phase>,<component>)。

你可以通过使用点号来计算部分状态变量的衍生量。例如：H.T代表热能。你也可以计算更复杂的衍生量，例如BP(LIQUID).W(C)给出了液体的质量怎样随着碳的质量分数的改变而改变。状态变量可被作为条件使用或在post-processor中作为轴使用。在那种情况下，用“\*”来表示所有的相或成分通常很有趣。你可以确定状态变量函数然后在post-processor中把它们作为轴使用。

### 提示和经常被问到的问题 (FAQ)

问：为什么在我保存文件之后就不能绘制相图了呢？

答：你一定不要在step或map命令之后使用SAVE命令，如果那样做，你会得到一个警告。事实上，SAVE命令在它保存文件当前状态之前就已经从文件中删除了所有的东西。

问：为什么我只得到了相图中一半的曲线？

答：在绘制相图的时候，你不能把状态变量x(<component>)或w(<component>)作为post-processor中set\_diagram\_axis 命令中的变量来使用。合适的变量是成分摩尔分数或质量分数（或相同的百分比）。

问：当我想要计算CaO-SiO<sub>2</sub>体系的时候，我怎样处理我所得到的多余的自由度？

答：这是一个类似二元系，你必须告知POLY模块，氧没有自由度。你可以使用define\_component, 命令来设定成分为CaO，SiO<sub>2</sub>和O<sub>2</sub>，还可将氧的活度设为任意值。注意这仅仅在相的模型是CaO-SiO<sub>2</sub>部分时才有可能。否则这就不是一个类似二元系而且氧的活化学势是一个有趣的量。

**问：我怎样计算一个合金的熔化温度？**

答：首先根据已知成分计算熔化前的那个温度下的平衡。然后给出命令`change_status phase liquid=fix 0,set_condition t=none`和 `computer_equil`.就可通过`show T`或`list_ equilibrium`命令获得熔化温度。

问：我怎样得到一种成分的各种分量值？

答：以Fe熔合金为例，成分铁的各种量可通过`SHOW<VALUE>`命令得到，一并得到的值有偏吉布斯能`MUR(Fe)`，偏熵`MUR(Fe,T)`和偏焓`H(Fe)`（注意你首先要通过`ENTER VARIABLE HFE=MUR(Fe)-T*MUR(Fe,T)`来规定`HFE`的值）。

问：我怎样得到一种气体成分的分压？

答：你可以输入一个函数`P*Y (GAS,<species>)`，如果该气体是稳定的，那就是该成分的分压。如果气体不稳定，你必须输入一个函数`P*Y (GAS,<species>)*EXP (DGF(GAS))`.任何一种成分的活度，如 $H_2O$ 都可通过输入如`ACR (H)**2*ACR (O)`的函数而得到。记得对于H和O成分要使用`set_reference_state`命令。注意`ACR`只能对成分使用。

问：当我在相图中得到交叉结线时，为什么没有可调和的缺口？

答：交叉结线是可调和缺口的标志。但是，你必须事前告知Thermo-Calc你知道或怀疑相图中有可调和缺口。当为相设定两种或更多成分时，可通过`POLY`命令`special_option`（有`set_miscibility_gap`选项）或`GES`命令`amend_phase_description`(有`composition_sets`选项)来完成。然后你必须在可调和缺口稳定时才可以具有不同的初始成分。

问：怎样获得超越吉布斯能的值？

答：从`POLY`上无法获得超越吉布斯能，这是因为这是一个模型依赖量，你可以获得混合吉布斯能，而且对于一个取代的常规解决模型那是一回事。为了获得，例如：一个三元系A-B-C与液相混合的焓变，给出以下命令：

```
SET_REF_STATE A LIQUID*1E5
```

```
SET_REF_STATE B LIQUID*1E5
```

```
SET_REF_STATE C LIQUID*1E5
```

```
SHOW HMR(LIQUID)
```

后缀R要求用户规定应该使用的参考态，但是如果你有两种或更多成分混合的情况，那混合吉布斯能呵超越吉布斯能是不同的。

## 附录 C 状态变量和派生变量的单位

简要介绍:

为了合理地设定标准状态变量（强度的和广度的）和派生变量、利用预定义的符号、以及输入用户定义的符号（常数，函数，变量和表格），各种热力学的、物理的、化学的和 transport 量的单位是很重要的概念。全面理解一个体系、一个组元、一个相或/和（在一个亚点阵中的）一个相组成的各种量的单位可以真正帮助设定计算或模拟的条件、定义 stepping/mapping 的变量、将物质/反应特性制表、以及将计算或模拟的结果以图形或文本的形式输出。

用户可通过浏览 *Thermo-Calc Software system* 文件中的第 2 部分和 *TCCR User's Guide* 的第 8 章(8.3 节)或输入以下主关键字来获得各种量的单位定义的信息，这些主关键字和 UNITS 主题有关：

|                     |                       |
|---------------------|-----------------------|
| STATE VARIABLES     | 标准状态变量                |
| INTENSIVE VARIABLES | 各种强度变量                |
| EXTENSIVE VARIABLES | 各种广延变量                |
| DERIVED VARIABLES   | 派生变量（偏量）              |
| CONDITIONS          | 条件设定                  |
| AXIS-VARIABLES      | Stepping/Mapping 变量设定 |

不像 TCW 软件（不同的量可选择不同的单位），TCC（和 DICTRA）软件通常在不同模块中对标准状态变量和派生变量只能使用默认单位，但是，它允许用户使用一些预定义的符号（但只在 POST\_PROCESSOR 模块中合法），并且/或者使用有效的标准状态变量和派生变量来定义一些想得到的用户指定的符号（常数，函数，变量或表格）。

要想获得更多关于一个系统、系统中的组元、相或一个给定相的组元的标准状态变量、派生变量和预定义符号的信息、以及用户指定的符号的可选择的单位，请参考以下关键字：

|                 |                     |
|-----------------|---------------------|
| BASIC UNITS     | 对于全局使用的变量           |
| SYSTEM UNITS    | 对于所定义的体系中的变量        |
| COMPONENT UNITS | 对于一个体系中一个具体指定的组元的变量 |
| PHASE UNITS     | 对于一个体系中一个相的变量       |

PHASE-COMPONENT UNITS 对于一个相中一个具体指定的组元的变量

SPECIES UNITS 对于一个相中一个具体指定的 Species 的变量

USER UNITS 对于用户定义的符号

### 基本单位：对于全局使用的变量

在 POLY 模块（和它的子模块 POST\_PROCESSOR）下面的基本单位基本上都是国际公制（SI）单位而且可以（通过各种标准状态变量、派生变量和预定义的符号来）加以运用：

| 量                    | 标记      | 基本单位                           |
|----------------------|---------|--------------------------------|
| Temperature          | T       | Kelvin (K)                     |
| Pressure             | P       | Pascal (Pa)                    |
| Amount               | N       | moles (mol)                    |
|                      | M_F     | mole fraction (无量纲)            |
|                      | M_P     | mole percent (mol%)            |
|                      | B       | mass (grams, g)                |
|                      | W_F     | mass fraction (无量纲)            |
|                      | W_P     | mass percent (mass% = wt%)     |
| Volume               | V       | cubic meters (m <sup>3</sup> ) |
| Energy               | G,A,U,H | Joules (J)                     |
|                      | S       | Joules/Kelvin (J/K)            |
| Curie<br>Temperature | TC      | Kelvin (K)                     |

### 体系单位：对于所定义的体系的变量

一个体系的标准状态变量，派生变量和事先确定符号的默认单位如下表给出：

| 量           | SV & Unit <sup>§</sup> | DV & Unit <sup>¶</sup> | PS & Unit <sup>θ</sup> |
|-------------|------------------------|------------------------|------------------------|
| Temperature | T K                    |                        | T_C C (Celsius)        |

# Thermo-Calc 用户指导书

|                                   |                  |                        |                    |
|-----------------------------------|------------------|------------------------|--------------------|
| 温度                                |                  |                        | T_F F (Fahrenheit) |
| Pressure 压力                       | P Pa             |                        |                    |
| Amount<br>总量                      | N mol            | NW mol/g               |                    |
|                                   |                  | NV mol/m <sup>3</sup>  |                    |
|                                   | B g              | BM g/mol               |                    |
|                                   |                  | BV g/m <sup>3</sup>    |                    |
| Volume<br>体积                      | V m <sup>3</sup> | VM m <sup>3</sup> /mol |                    |
|                                   |                  | VW m <sup>3</sup> /g   |                    |
| Gibbs Energy<br>吉布斯自由能            | G J              | GM J/mol               |                    |
|                                   |                  | GW J/g                 |                    |
|                                   |                  | GV J/m <sup>3</sup>    |                    |
| Helmholtz Energy<br>Helmholtz 自由能 | A J              | AM J/mol               |                    |
|                                   |                  | AW J/g                 |                    |
|                                   |                  | AV J/m <sup>3</sup>    |                    |
| Internal Energy<br>内能             | U J              | UM J/mol               |                    |
|                                   |                  | UW J/g                 |                    |
|                                   |                  | UV J/m <sup>3</sup>    |                    |
| Enthalpy<br>焓                     | H J              | HM J/mol               |                    |
|                                   |                  | HW J/g                 |                    |
|                                   |                  | HV J/m <sup>3</sup>    |                    |
| Entropy<br>熵                      | S J/K            | SM J/mol/K             |                    |
|                                   |                  | SW J/g/K               |                    |
|                                   |                  | SV J/m <sup>3</sup> /K |                    |
| Heat Capacity                     |                  | HM.T J/mol/K           |                    |
|                                   |                  | HW.T J/g/K             |                    |

|                     |  |                                 |  |
|---------------------|--|---------------------------------|--|
| 热容                  |  | HV.T $\text{J/m}^3/\text{K}$    |  |
| Thermal Expansivity |  | VM.T $\text{m}^3/\text{mol/K}$  |  |
| 热膨胀性                |  | VW.T $\text{m}^3/\text{g/K}$    |  |
| Isothermal          |  | VM.P $\text{m}^3/\text{mol/Pa}$ |  |
| Compressibility     |  | VW.P $\text{m}^3/\text{g/Pa}$   |  |
| 等温压缩性               |  |                                 |  |

**注意:**

SV 代表整个体系的标准状态变量，使用在 POLY 和 POST 模块中。

DV 代表整个体系的派生变量，使用在 POLY 和 POST 模块中。

PS 代表整个体系的预定义符号，只能用在 POST 模块中。

归一化后缀如 M（每摩尔），W（每克）或 V（每立方米）可适用于整个体系的容量性质 V, G, A, U, H 和 S（除了 VV）

容量性质 N 可用 W 或 V（不是 M）归一化，而 B 可用 M 或 V（不是 W）归一化。并且在这些情况下它们代表整个体系某些特定的量。例如：

NW= 单位质量体系的摩尔数 ( $\text{mol/g}$ )

NV= 单位体积体系的摩尔数 ( $\text{mol/m}^3$ )

BM= 体系单位摩尔数的质量 ( $\text{g/mol}$ )

BV= 体系单位体积的质量 ( $\text{g/m}^3$ ，也就是密度)

NW 和 BM 不能被设为条件。

体系的热能由 Cp (当压强为条件时) 或 Cv (当体积为条件时) 表示。

**组元的单位：对体系中某特定组元的变量**

体系中一个特定组元的标准状态变量，派生变量以及事先确定符号的默认单位如下表给出：

| 量      | SV & Unit <sup>§</sup> | DV & Unit <sup>¶</sup> | PS & Unit <sup>θ</sup> |
|--------|------------------------|------------------------|------------------------|
| Amount | N(c) mol               | X(c) 无量纲               | M-F(c) 无量纲             |
|        |                        |                        | M-P(c) 无量纲             |



|                              |              |                          |            |
|------------------------------|--------------|--------------------------|------------|
| 总量                           |              | NM(c) 无量纲                |            |
|                              |              | NW(c) mol/g              |            |
|                              |              | NV(c) mol/m <sup>3</sup> |            |
|                              | B(c) g       | W(c) 无量纲                 | W-F(c) 无量纲 |
|                              |              |                          | W-P(c) 无量纲 |
|                              |              | BM(c) g/mol              |            |
|                              |              | BW(c) 无量纲                |            |
|                              |              | BV(c) g/m <sup>3</sup>   |            |
| Chemical<br>Potential<br>化学势 | MU(c) J/mol  |                          |            |
|                              | MUR(c) J/mol |                          |            |
| Activity<br>活度               | AC(c) 无量纲    |                          |            |
|                              | ACR(c) 无量纲   |                          |            |
| ln(Activity)<br>活度的对数        |              | LNAC(c) 无量纲              |            |
|                              |              | LNACR(c) 无量纲             |            |

**注意：**

SV 代表体系中特定组元的标准状态变量，在 POLY 和 POST 模块中使用。

DV 代表体系中特定组元的派生变量，在 POLY 和 POST 模块中使用。

PS 代表体系中特定组元的预定义符号，只能用在 POST 模块中。

归一化后缀如 M（每摩尔），W（每克）或 V（每立方米）可适用于体系中特定组元的容量性质 N(c)和 B(c)，在这些情况下它们代表体系中特定组元的某些特定量。例如：

NM(c)= 组元的摩尔分数 （无量纲）

=X(c)

MW(c)=单位质量体系中某组元的摩尔数 （mol/g）

NV(c)=单位体积体系中某组元的摩尔数 （mol/m<sup>3</sup>）

BM(c)=单位摩尔体系中某组元的质量 （g/mol）

BW(c)=组元的质量分数 （无量纲）

$$=W(c)$$

BV(c)=单位体积体系中某组元的质量 (g/m<sup>3</sup>)

NW(c)和 BM(c) 不能被设为条件 。

后缀 R 表示强度性质 MU(c)，AC(c)和 LNAC(c)是根据组元的特定参考状态来计算的，  
如 MUR(c)，ACR(c)和 LNACR(c)。

### 相的单位：对于体系中特定相的变量

一个特定相的标准状态变量和派生变量的默认单位如下表给出：

| 量                      | SV & Unit <sup>§</sup> | DV & Unit <sup>¶</sup>                   |
|------------------------|------------------------|------------------------------------------|
| Amount<br>总量           | NP(ph) mol             | NPM(ph) 无量纲                              |
|                        |                        | NPW(ph) mol/g                            |
|                        |                        | NPV(ph) mol/m <sup>3</sup>               |
|                        | BP(ph) g               | BPM(ph) g/mol                            |
|                        |                        | BPW(ph) 无量纲                              |
|                        |                        | BPV(ph) g/m <sup>3</sup>                 |
| Volume<br>体积           | VP(ph) m <sup>3</sup>  | VPM(ph) m <sup>3</sup> /mol              |
|                        |                        | VPW(ph) m <sup>3</sup> /g                |
|                        |                        | VPV(ph) 无量纲                              |
|                        | V(ph) m <sup>3</sup>   | VM(ph) m <sup>3</sup> /mol               |
|                        |                        | VW(ph) m <sup>3</sup> /g                 |
|                        |                        | VF(ph) m <sup>3</sup> /mole_formula_unit |
| Gibbs Energy<br>吉布斯自由能 | G(ph) J                | GM(ph) J/mol                             |
|                        |                        | GW(ph) J/g                               |
|                        |                        | GV(ph) J/m <sup>3</sup>                  |
|                        |                        | GF(ph) J/mole_formula_unit               |
| Helmholtz Energy       | A(ph) J                | AM(ph) J/mol                             |

|                           |           |                                |
|---------------------------|-----------|--------------------------------|
| Helmholtz 自由能             |           | AW(ph) J/g                     |
|                           |           | AV(ph) J/m <sup>3</sup>        |
|                           |           | AF(ph) J/mole_formula_unit     |
| Internal Energy<br><br>内能 | U(ph) J   | UM(ph) J/mol                   |
|                           |           | UW(ph) J/g                     |
|                           |           | UV(ph) J/m <sup>3</sup>        |
|                           |           | UF(ph) J/mole_formula_unit     |
| Enthalpy<br><br>焓         | H(ph) J   | HM(ph) J/mol                   |
|                           |           | HW(ph) J/g                     |
|                           |           | HV(ph) J/m <sup>3</sup>        |
|                           |           | HF(ph) J/mole_formula_unit     |
| Entropy<br><br>熵          | S(ph) J/K | SM(ph) J/mol/K                 |
|                           |           | SW(ph) J/g/K                   |
|                           |           | SV(ph) J/m <sup>3</sup> /K     |
|                           |           | J/mole_formula_unit/K          |
| Curie Temperature<br>居里温度 | TC(ph) K  |                                |
| Driving Force<br><br>驱动力  |           | DGM(ph) J/mol                  |
|                           |           | DGW(ph) J/g                    |
|                           |           | DGV(ph) J/m <sup>3</sup>       |
|                           |           | DGF(ph) J/mole_formula_unit    |
| Heat Capacity<br><br>热容   |           | HM(ph).T J/mol/K               |
|                           |           | HW(ph).T J/g/K                 |
|                           |           | HV(ph).T J/m <sup>3</sup> /K   |
|                           |           | HF(ph).T J/mole_formula_unit/K |
| Thermal Expansivity       |           | VM(ph).T m <sup>3</sup> /mol/K |

|                                         |  |                                                     |
|-----------------------------------------|--|-----------------------------------------------------|
| 热膨胀系数                                   |  | VW(ph).T $\text{m}^3/\text{g/K}$                    |
|                                         |  | VF(ph).T $\text{m}^3/\text{mole\_formula\_unit/K}$  |
| Isothermal<br>Compressibility<br>等温压缩系数 |  | VM(ph).P $\text{m}^3/\text{mol/Pa}$                 |
|                                         |  | VW(ph).P $\text{m}^3/\text{g/Pa}$                   |
|                                         |  | VF(ph).P $\text{m}^3/\text{mole\_formula\_unit/Pa}$ |

**注意：**

SV 代表了特定相的标准状态变量，可用于在 POLY 和 POST 模块。

DV 代表了特定相的派生变量，可用于在 POLY 和 POST 模块。

归一化后缀如 M（每摩尔），W（每克），V（每立方米）或 F（每摩尔分子单元）适用于特定相的容量性质 V(ph)，G(ph)，A(ph)，U(ph)，H(ph)和 S(ph) [除了 VV(ph)]。

容量性质 NP(ph)，BP(ph)和 VP(ph)有几个归一化后缀 M，W 或 V，在这些情况下它们表示特定相的特定的量，如：

NPM(ph)=每摩尔体系中某相的摩尔数（无量纲）

NPW(ph)=每克体系中某相的摩尔数 (mol/g)

NPV(ph)=每单位体积体系中某相的摩尔数 (mol/m<sup>3</sup>)

BPM(ph)=每摩尔体系中某相的质量 (g/mol)

BPW(ph)=每克体系中某相的质量（无量纲）

BPV(ph)=每单位体积体系中某相的质量 (g/mol)

VPM(ph)=每摩尔体系中某相的体积 (m<sup>3</sup>/mol)

VPW(ph)=每克体系中某相的体积 (m<sup>3</sup>/g)

VPV(ph)=每单位体积体系中某相的体积（无量纲）

相的一些量，包括 NP(ph)，BP(ph)和 VP(ph)以及它们与后缀 M/W/V/F 组成的量，都不能设为平衡条件。但是，你可利用 CHANGE\_STATUS 命令来设置一个相关条件，例如：当要固定 NPF(ph)这个量时，CHANGE\_STATUS phase<phase, name>=fix<amount>。

相的热容由 Cp（压强设为条件）或 Cv（体积设为条件）来表示。DGM(ph)，DGW(ph)，DGV(ph)和 DGF(ph) 不能设为条件，因为它们只能在特定类型的平衡状态下进行计算。

**相的组元的单位：对于相中某特定组元的变量**

给定相中某一特定组元的标准状态变量，派生变量和预定义符号的默认单位如下表给出：

| 量                | SV & Unit <sup>§</sup> | DV & Unit <sup>¶</sup>         |
|------------------|------------------------|--------------------------------|
| Amount<br><br>总量 | N(ph,c) mol            | X(ph,c) 无量纲                    |
|                  |                        | NM(ph,c) 无量纲                   |
|                  |                        | NW(ph,c) mol/g                 |
|                  |                        | NV(ph,c) mol/m <sup>3</sup>    |
|                  |                        | NF(ph,c) mol/mole_formula_unit |
|                  | B                      | W(ph,c) 无量纲                    |
|                  |                        | BM(ph,c) g/mol                 |
|                  |                        | BW(ph,c) 无量纲                   |
|                  |                        | BV(ph,c) g/m <sup>3</sup>      |
|                  |                        | BF(ph,c) g/mole_formula_unit   |

**注意：**

SV 代表特定相的标准状态变量，可在 POLY 和 POST 模块中使用。

DV 代表特定相的派生变量，可在 POLY 和 POST 模块中使用。

归一化后缀如 M（每摩尔），W（每克），V（每立方米）或 F（每摩尔分子单元）适用于给定相中特定组元的容量性质 N(ph ,c)和 B (ph, c)。在这些情况下它们表示相的组元的某些特殊的量，如：

NM(ph,c)=相中组元的摩尔分数（无量纲）

=X(ph ,c)

NW(ph ,c)=单位质量相中某组元的摩尔数(mol/g)

NV(ph ,c)=单位体积相中某组元的摩尔数 (mol/m<sup>3</sup>)

NF(ph ,c)=单位摩尔分子单元相中某组元的摩尔数 (mol/mole\_formula\_unit)

BM(ph ,c) =单位摩尔相中某组元的质量(g/mol)

BW(ph ,c)=相中某组元的质量分数（无量纲）

=W(ph ,c)

BV(ph ,c)=单位体积相中某组元的质量(g/m<sup>3</sup>)

$BF(ph, c)$  = 单位摩尔分子单元相中某组元的质量(g/mole\_ formula\_ unit)

$NW(ph, c)$ 和  $BM(ph, c)$ 不能被设为条件。

### 相-species 单位：对相中某一特定 species 的变量

给定相中特定 species（也就是给定相的某个亚点阵中某个相组分）的标准状态变量的默认单位如下表所示：

| 量                          | SV & Unit <sup>§</sup> | DV & Unit <sup>¶</sup> |
|----------------------------|------------------------|------------------------|
| Amount 总量                  | $y(ph, sp)$ 无量纲        |                        |
| Chemical                   | $MU(sp, ph)$ J/mol     |                        |
| Potential<br>化学势           | $MUR(sp, ph)$ J/mol    |                        |
| Activity                   | $AC(sp, ph)$ 无量纲       |                        |
| 活度                         | $ACR(sp, ph)$ 无量纲      |                        |
| $\ln(Activity)$<br>活度的自然对数 |                        | $LNAC(sp, ph)$ 无量纲     |
|                            |                        | $LNACR(sp, ph)$ 无量纲    |

#### 注意：

SV 代表特定相的标准状态变量，可在 POLY 和 POST 模块中使用。

DV 代表特定相的派生变量，可在 POLY 和 POST 模块中使用。

后缀 R 表示强度性质  $MU(sp, ph)$ ,  $AC(sp, ph)$ 和  $LNAC(sp, ph)$  是根据为组元（它们构成了 species）所选定的某个参考状态来计算的，如： $MUR(sp, ph)$ ,  $ACR(sp, ph)$ 和  $LNACR(sp, ph)$ ；通常， $MU(sp, ph) = MUR(sp, ph)$ ,  $AC(sp, ph) = ACR(sp, ph)$ ,  $LNAC(sp, ph) = LNACR(sp, ph)$ 。如果该相中有两个或更多亚点阵，"sp"应具体指定为"constituent#sublattice"，以表明该组分在（用#加上阿拉伯数字表示的）相的特定亚点阵或位置上，例如：

$y(BCC, C\#2)$ 表示 BCC\_A2 的第二个亚点阵或位置上 C 组元所占的位置分数。

$MUR(AQUEOUS, Fe+3)$ 代表 AQUEOUS 溶液相中  $Fe^{3+}$  阴离子的化学势，该相的组元(Fe 和电子)要设定参考状态，即给定的参考温度和压强。

一般地, MU(sp,ph), AC(sp,ph) 和 LNAC(sp,ph)只针对单个亚点阵的溶体相(如水溶液和气体混合物)和多个亚点阵的溶体相(如BCC\_A2和M6C相)的第一个亚点阵上相互作用的 species。例如,你可以得到AQUEOUS溶液中Fe<sup>3+</sup>和Fe的AC(sp,AQ)值,你也可以得到Fe-W-C三元系中BCC\_A2相的Fe<sup>3+</sup>和Fe的AC(sp,AQ)值,但是不能得到C的相关的量(C在第二个亚点阵熵)。然而,你不能得到Fe-W-C三元系中MU(sp,M6C)的任何值,这是由于M6C被定义为: (Fe)<sub>2</sub>(Fe)<sub>2</sub>(Fe,W)<sub>2</sub>(c)<sub>1</sub>。

### 特别注意:

与POLY3(和POST)模块不同,GES, TDB, PARROT 和 ED\_EXP 模块还有其它的量,这些量描述了一个化合物、一个溶体相中的特定 species 或者特定的(二元、三元或高元) species 的组合的各种热力学的、物理学的、化学的和动力学的性质。这些量不能直接在POLY(和POST)模块中使用,它们是:

G(ph,sp), or G(ph,sp;0), or G(ph,sp1;sp2;...;0)

对纯物质或 end-member 的吉布斯能(J/mol)

G(ph,sp1,sp2,...) or L(ph,sp1,sp2,...), or

G(ph,sp1,sp2,...;0) or L(ph,sp1,sp2,...;0), or

G(ph,sp1,sp2,...;...;0) or L(ph,sp1,sp2,...;...;0)

一个溶体相的某一亚点阵中的二元、三元或多元的0阶相互作用参数(J/mol)

G(ph,sp1,sp2,...;i) or L(ph,sp1,sp2,...;i), or

G(ph,sp1,sp2,...;...;i) or L(ph,sp1,sp2,...;...;i)

一个溶体相的某一亚点阵中的二元、三元或多元的i阶相互作用参数(J/mol)

TC(ph,sp), or TC(ph,sp;0), or TC(ph,sp1;sp2;...;0)

对纯物质或 end-member 的居里温度(K)

TC(ph,sp1,sp2,...), or TC(ph,sp1,sp2,...;0), or TC(ph,sp1,sp2,...;...;0)

一个溶体相的某一亚点阵中的二元、三元或多元相互作用对居里温度的0阶贡献(K);

TC(ph,sp1,sp2,...;i), or TC(ph,sp1,sp2,...;...;i)

一个溶体相的某一亚点阵中的二元、三元或多元相互作用对居里温度的i阶贡献(K);



BMAGN(ph,sp), or BMAGN(ph,sp;0), or BMAGN(ph,sp1;sp2;...;0)

对纯物质或 end-member 的 Bohr 磁子数（无量纲）

BMAGN(ph,sp1,sp2,...), or BMAGN (ph,sp1,sp2,...;0), or BMAGN  
(ph,...;sp1,sp2,...;0)

一个溶体相的某一亚点阵中的二元、三元或多元相互作用对 Bohr 磁子数的 0 阶贡献（无量纲）；

BMAGN(ph,sp1,sp2,...;i), or BMAGN(ph,sp1,sp2,...;...;i)

一个溶体相的某一亚点阵中的二元、三元或多元相互作用对 Bohr 磁子数的 i 阶贡献（无量纲）；

V0(ph,sp), or V0(ph,sp;0), or V0(ph,sp1;sp2;...;0)

对纯物质或 end-member 在 1bar 和参考 T0 下的摩尔体积(m3)

V0(ph,sp1,sp2,...), or V0(ph,sp1,sp2,...;0), or V0(ph,sp1,sp2,...;...;0)

一个溶体相的某一亚点阵中的二元、三元或多元相互作用对与成分相关的摩尔体积的 0 阶贡献；

V0(ph,sp1,sp2,...;i), or V0(ph,sp1,sp2,...;...;i)

一个溶体相的某一亚点阵中的二元、三元或多元相互作用对与成分相关的摩尔体积的 i 阶贡献；

VA(ph,sp), or VA(ph,sp;0), or VA(ph,sp1;sp2;...;0)

对纯物质或 end-member 的完全热膨胀(m3/mol/K)

VA(ph,sp1,sp2,...), or VA(ph,sp1,sp2,...;0), or VA(ph,sp1,sp2,...;...;0)

一个溶体相的某一亚点阵中的二元、三元或多元相互作用对与成分相关的热膨胀系数的 0 阶贡献(m<sup>3</sup>/mol/K)；

VA(ph,sp1,sp2,...;i), or VA(ph,sp1,sp2,...;...;i)

一个溶体相的某一亚点阵中的二元、三元或多元相互作用对与成分相关的热膨胀系数的 i 阶贡献(m<sup>3</sup>/mol/K)；

VC(ph,sp), or VB(ph,sp;0), or VB(ph,sp1;sp2;...;0)

对纯物质或 end-member 的等温压缩系数(m<sup>3</sup>/mol/Pa)；

VC(ph,sp1,sp2,...), or VB(ph,sp1,sp2,...;0), or VB(ph,sp1,sp2,...;...;0)

一个溶体相的某一亚点阵中的二元、三元或多元相互作用对与成分相关的等温压缩系数的 0 阶贡献 (m<sup>3</sup>/mol/Pa)；

VC(ph,sp1,sp2,...;i), or VB(ph,sp1,sp2,...;...;i)

一个溶体相的某一亚点阵中的二元、三元或多元相互作用对与成分相关的等温压缩系数的 i 阶贡献( $\text{m}^3/\text{mol}/\text{Pa}$ );

VK(ph,sp), or VB(ph,sp;0), or VB(ph,sp1;sp2;...;0)

对纯物质或 end-member 的高压拟合系数( $\text{m}^3/\text{mol}$ )

VK(ph,sp1,sp2,...), or VB(ph,sp1,sp2,...;0), or VB(ph,sp1,sp2,...;...;0)

一个溶体相的某一亚点阵中的二元、三元或多元相互作用对高压拟合系数的 0 阶贡献( $\text{m}^3/\text{mol}$ );

VK(ph,sp1,sp2,...;i), or VB(ph,sp1,sp2,...;...;i)

一个溶体相的某一亚点阵中的二元、三元或多元相互作用对高压拟合系数的 i 阶贡献( $\text{m}^3/\text{mol}$ );

WR(ph,sp), or WR(ph,sp;0)

在参考温度和压强下,水溶液相(通常只有一个亚点阵)中某个水溶性的 species 的标准波恩函数( $\text{J}/\text{mol}$ ).

### 用户定义的单位: 对于用户自定义的函数

另外,对一些经计算的/绘图的/制表的性质,你也可以通过正确地输入以下命令来使用你自己想用的单位(而不是基本的和默认的单位)

**ENTER\_SYMBOL FUNCTION <Name> = < Expression of state variables, derived variables and/or already-entered symbols > ;**

在使用自己输入的符号时,你会发现用不同单位描述各种计算的/模拟结果非常方便和有用。注意所使用的符号的名称在当前工作空间中必须是唯一的,而且以字母开头,最多有 8 个字。合法的字包括字母(无论是大写或小写)、阿拉伯数字和下划线“\_”。其他一些字如插入语“(“and”)",加“+”,减“-”,除“/”或“\”,句号“.”。想了解关于自定义符号更详细的信息,请参考 Section 8.10.12 或打出 HELP ENTER\_SYMBOL 命令或在 ENTER\_SYMBOL 命令中打出“?”符号。

例子:

ENT\_SYM FUN PB = P/1E5 ;                      对压强 (单位 bar)

ENT\_SYM FUN LnFBO2 = LNAC(O2,GAS)+LOG(P)+11.52608845 ;

对  $\ln[\text{Fugacity}(\text{O}_2, \text{GAS})]$  (单位 bar)

ENT\_SYM FUN Cp = Hm.T ;                      对体系的热容(单位 J/mol/K)

ENT\_SYM FUN CpFCC = Hm(FCC).T ;    对 FCC 相的热容 (单位 J/mol/K)

但是, 当一个转变性质是一个或多个派生量的函数时, 你必须将符号输入为变量而不是函数。例如: 一个表示体系的或一个相的热容的、而且单位是 cal/mol/K 的符号可这样来输入:

ENT\_SYM VAR Cp2 = Hm.T/4.1858 ;      对体系热容 (单位 cal/mol/K)

ENT\_SYM VAR Cp2FCC = Hm(FCC).T/4.1858 ; 对 FCC 相的热容(单位 cal/mol/K)

请注意, 任何一个用户自定义符号都不能被设为平衡条件或 stepping/mapping 的变量, 只能使用标准状态变量 (和一些派生变量)。但是, 你可以使用预定义的变量和用户定义符号来绘制你想要的各种相图和性质图。甚至, 一些高级模块 (比如 POURBAIX 和 SCHEIL 模块) 也可以为某些性质生成一些已定义的符号 (常数、函数、变量和表格), 并且这些符号也只能作为绘图和表格输出。

下面是一些推荐的例子, 介绍了怎样用各种可能的方式输入常见的函数和它们相应的单位。

#### 一个确定体系强度变量的用户定义单位:

| 量           | 推荐的名称与表达式            | 单位               |
|-------------|----------------------|------------------|
| Temperature | TempC = T-273.15     | Celsius (C)      |
|             | TempF = 1.8*T-459.67 | Fahrenheit (F)   |
|             | TempF = 1.8*TempC+32 |                  |
| Pressure    | PB = P/1E5           | bars (bar)       |
|             | PKb = P/1E8          | kilobars (kbar)  |
|             | PAtm = P/101325      | atmosphere (atm) |

### Thermo-Calc 用户指导书

|  |                    |                          |
|--|--------------------|--------------------------|
|  | $PSI = P/6894.76$  | pounds/sq. inch (psi)    |
|  | $PIHg = P/3342.11$ | inches of Hg             |
|  | $PTor = P/133.322$ | Tors (millimeters of Hg) |

用户定义的确体系容量变量的单位:

| 量               | 推荐的名称与表达式              | 单位                                     |
|-----------------|------------------------|----------------------------------------|
| Amount          | $BKg = 1E-3*B$         | kilograms (kg)                         |
|                 | $BTon = 1E-6*B$        | tons                                   |
| Volume          | $VDM = 1E-3*V$         | cubic decimeters (dm <sup>3</sup> , l) |
|                 | $VCM = 1E-6*V$         | cubic centimeters (cm <sup>3</sup> )   |
|                 | $VMM = 1E-9*V$         | cubic millimeters (mm <sup>3</sup> )   |
|                 | $VCI = 1.6387064E-5*V$ | cubic inches (in <sup>3</sup> )        |
|                 | $VLi = 1E-3*V$         | liters (l)                             |
| Energy          | $GCal = G/4.1858$      | cal                                    |
|                 | $ACal = A/4.1858$      | cal                                    |
|                 | $UCal = U/4.1858$      | cal                                    |
|                 | $HCal = H/4.1858$      | cal                                    |
|                 | $SCal = S/4.1858$      | Cal/K                                  |
| Heat Capacity   | $Cp2 = HM.T/4.1858$    | cal/mol/K                              |
|                 | $Cp3 = HW.T/4.1858$    | cal/g/K                                |
|                 | $Cp4 = HV.T/4.1858$    | cal/m <sup>3</sup> /K                  |
| Thermal         | $A2 = VM.T*1E-6$       | cm <sup>3</sup> /mol/K                 |
| Expansion       | $A3 = VW.T*1E-6$       | cm <sup>3</sup> /g/K                   |
| Isothermal      | $B2 = VM.P*1E-9$       | mm <sup>3</sup> /mol/Pa                |
| Compressibility | $B3 = VW.P*1E-9$       | mm <sup>3</sup> /g/Pa                  |

注意：你也可以使用归一化后缀[M (每摩尔)，W （每克），V （每立方米）或 F（每摩尔 formula unit）] 来为体系的量定义一些相似的符号。例如：用上面提到的符号：

用 BM 或 BV 替换 B

用 VM 或 VW 替换 V

用 GM, GW 或 GV 替换 G

用 AM, AW 或 AV 替换 A

用 UM, UW 或 UV 替换 U

用 HM, HW 或 HV 替换 H

用 SM, SW 或 SV 替换 S

#### 用户为体系中的一种组元的强度变量定义的单位

| 量                                           | 建议使用的名称与表达式                                 | 单位                   |
|---------------------------------------------|---------------------------------------------|----------------------|
| Chemical<br>Potential                       | $MU_i = MU(c)/4.1858$                       | cal/mol              |
|                                             | $MUR_i = MUR(c)/4.1858$                     | cal/mol              |
| Special quantity<br>for aqueous<br>solution | $pH = -\log_{10}(ACR(H+1))$                 | <i>dimensionless</i> |
|                                             | $Eh = MUR(ZE)/RNF$<br>where $RNF=96485.309$ | volts (V)            |

注意：i 代表与成分 C 对应的辅助指数或字母。

#### 用户为体系中的一种组元的容量变量定义的单位

| 量      | 建议使用的名称与表达式                 | 单位                   |
|--------|-----------------------------|----------------------|
| Amount | $MF_i = N(c)/N$<br>$= X(c)$ | <i>dimensionless</i> |
|        | $MP_i = N(c)/N*100$         | <i>dimensionless</i> |
|        | $WF_i = B(c)/B$<br>$= W(c)$ | <i>dimensionless</i> |
|        | $WP_i = B(c)/B*100$         | <i>dimensionless</i> |

## Thermo-Calc 用户指导书

|  |                              |                |
|--|------------------------------|----------------|
|  | $BK_{gi} = 1E-3 \cdot B(c)$  | kilograms (kg) |
|  | $BT_{oni} = 1E-6 \cdot B(c)$ | tons           |

注意: i 代表与成分 C 对应的辅助指数或字母。你可以通过使用归一化后缀[M(每摩尔), W (每克), V (每立方米)]为一种组元的量定义相似的符号, 例如:

用 NM(c), NW(c)或 NV(c)替换 N(c)

用 BM(c), BW(c)或 BV(c) 替换 B(c)

用户为一个相的容量变量定义的单位:

| 量             | 建议使用的名称与表达式                    | 单位                                     |
|---------------|--------------------------------|----------------------------------------|
| Amount        | $MF_j = NP(ph)/N$              | 无量纲                                    |
|               | $MP_j = NP(ph)/N \cdot 100$    | 无量纲                                    |
|               | $WF_j = BP(ph)/B$              | 无量纲                                    |
|               | $WP_j = BP(ph)/B \cdot 100$    | 无量纲                                    |
|               | $BK_{gi} = 1E-3 \cdot BP(ph)$  | kilograms (kg)                         |
|               | $BT_{onj} = 1E-6 \cdot BP(ph)$ | tons                                   |
| Volume        | $VCM_j = 1E-3 \cdot V(ph)$     | cubic decimeters (dm <sup>3</sup> , l) |
|               | $VCM_j = 1E-6 \cdot V(ph)$     | cubic centimeters (cm <sup>3</sup> )   |
|               | $VMM_j = 1E-9 \cdot V(ph)$     | cubic millimeters (mm <sup>3</sup> )   |
| Energy        | $GCal_j = G(ph)/4.1858$        | cal                                    |
|               | $ACal_j = A(ph)/4.1858$        | cal                                    |
|               | $UCal_j = U(ph)/4.1858$        | cal                                    |
|               | $HCal_j = H(ph)/4.1858$        | cal                                    |
|               | $SCal_j = S(ph)/4.1858$        | Cal/K                                  |
| Driving Force | $DG2_j = DGM(ph)/4.1858$       | cal/mol                                |
|               | $DG3_j = DGW(ph)/4.1858$       | cal/g                                  |

|                               |                          |                                             |
|-------------------------------|--------------------------|---------------------------------------------|
|                               | $DG4j = DGV(ph)/4.1858$  | $\text{Cal/m}^3$                            |
|                               | $DG5j = DGF(ph)/4.1858$  | $\text{cal/mole\_formula\_unit}$            |
| Heat Capacity                 | $Cp2j = HM(ph).T/4.1858$ | $\text{cal/mol/K}$                          |
|                               | $Cp3j = HW(ph).T/4.1858$ | $\text{cal/g/K}$                            |
|                               | $Cp4j = HV(ph).T/4.1858$ | $\text{cal/m}^3/\text{K}$                   |
|                               | $Cp5j = HF(ph).T/4.1858$ | $\text{cal/mole\_formula\_unit/K}$          |
| Thermal<br>Expansion          | $A2j = VM(ph).T*1E-6$    | $\text{cm}^3/\text{mol/K}$                  |
|                               | $A3j = VW(ph).T*1E-6$    | $\text{cm}^3/\text{g/K}$                    |
|                               | $A4j = VF(ph).T*1E-6$    | $\text{cm}^3/\text{mole\_formula\_unit/K}$  |
| Isothermal<br>Compressibility | $B2j = VM(ph).P*1E-9$    | $\text{mm}^3/\text{mol/Pa}$                 |
|                               | $B3j = VW(ph).P*1E-9$    | $\text{mm}^3/\text{g/Pa}$                   |
|                               | $B4j = VF(ph).P*1E-9$    | $\text{mm}^3/\text{mole\_formula\_unit/Pa}$ |

注意：i 代表与相 ph 对应的辅助指数或字母。

你也可以用归一化后缀[M(每摩尔), W(每克), V(每立方米)或 F(每摩尔 formula unit)]为一个相的变量定义某些相似的符号。例如：用上面提到的符号：

用 NPM(ph), NPW(ph)或 NPV(ph) 替换 NP(ph)

用 BPM(ph), BPW(ph) 或 BPV(ph) 替换 BP(ph)

用 VPM(ph), VPW(ph) 或 VPV(ph) 替换 VP(ph)

用 VM(ph), VW(ph) 或 VF(ph) 替换 V(ph)

用 GM(ph), GW(ph), GV(ph) 或 GV(ph) 替换 G(ph)

用 AM(ph), AW(ph), AV(ph) 或 AV(ph) 替换 A(ph)

用 UM(ph), UW(ph), UV(ph) 或 UV(ph) 替换 U(ph)

用 HM(ph), HW(ph), HV(ph) 或 HV(ph) 替换 H(ph)

用 SM(ph), SW(ph), SV(ph) 或 SV(ph) 替换 S(ph)

用户为相中某组元的容量变量定义的单位



| 量      | 建议使用的名称与表达式                               | 单位             |
|--------|-------------------------------------------|----------------|
| Amount | $MF_{ij} = N(ph,c)/NP(ph)$<br>$= X(ph,c)$ | 无量纲            |
|        | $MP_{ij} = N(ph,c)/NP(ph)*100$            | 无量纲            |
|        | $WFi = B(ph,c)/BP(ph)$<br>$= W(ph,c)$     | 无量纲            |
|        | $WP_{ij} = B(ph,c)/BP(ph)*100$            | 无量纲            |
|        | $BKg_{ij} = 1E-3*B(ph,c)$                 | kilograms (kg) |
|        | $BTon_{ij} = 1E-6*B(ph,c)$                | tons           |

注意：“ij”代表与相 ph 中成分 C 对应的辅助指数或字母。

你也可以通过使用归一化后缀[M(每摩尔)，W（每克），V（每立方米）或 F（每摩尔 formula unit）]为体系的组元的某些量定义相似的符号。例如：

用 NM(ph,c), NW(ph,c), NV(ph,c) 或 NF(ph,c) 替换 N(ph,c)

用 NPM(ph), NPW(ph), NPV(ph) 或 NP(ph)/NA 替换 NP(ph)

用 BM(ph,c), BW(ph,c), BV(ph,c)或 BF(ph,c) 替换 B(ph,c)

用 BPM(ph), BPW(ph), BPV(ph)或 BP(ph)/NA 替换 BP(ph)

（NA）代表相的分子式中的总原子数）

#### 用户为相中某 species 的强度变量定义的单位

| 量                  | 建议使用的名称与表达式                     | 单位                       |
|--------------------|---------------------------------|--------------------------|
| Chemical Potential | $MUCal_{ij} = MU(sp,ph)/4.1858$ | cal/mol                  |
|                    | $MUErg_{ij} = MU(sp,ph)*1E7$    | cal/mol                  |
| Fugacity           | $FA_{ij} = AC(sp,ph)*PATM$      | atmosphere (atm)         |
|                    | $FB_{ij} = AC(sp,ph)*PB$        | bars (bar)               |
|                    | $FC_{ij} = AC(sp,ph)*PKB$       | kilobars (kbar)          |
|                    | $FT_{ij} = AC(sp,ph)*PTOR$      | Tors (millimeters of Hg) |

|                                                |                                                                                                                                                                      |                          |
|------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------|
| ln(Fugacity)                                   | $\text{LnFA}_{ij} = \text{LNAC}(\text{sp,ph}) + \text{LN}(\text{PATM})$                                                                                              | atmosphere (atm)         |
|                                                | $\text{LnFB}_{ij} = \text{LNAC}(\text{sp,ph}) + \text{LN}(\text{PB})$                                                                                                | bars (bar)               |
|                                                | $\text{LnFC}_{ij} = \text{LNAC}(\text{sp,ph}) + \text{LN}(\text{PKB})$                                                                                               | kilobars (kbar)          |
|                                                | $\text{LnFT}_{ij} = \text{LNAC}(\text{sp,ph}) + \text{LN}(\text{PTOR})$                                                                                              | Tors (millimeters of Hg) |
| Special<br>quantity for<br>aqueous<br>solution | $\text{Al}_{ij} = \text{ACR}(\text{FE+3,AQ}) * \text{AH2O}$                                                                                                          | 无量纲                      |
|                                                | $\text{RC}_{ij} = \text{ACR}(\text{FE+3,AQ}) * \text{YH2O} / \text{Y}(\text{AQ,FE+3})$<br>where $\text{AH2O} = 55.508435$<br>$\text{YH2O} = \text{Y}(\text{AQ,H2O})$ | 无量纲                      |
|                                                | $\text{WRCal}_{ij} = \text{WR}(\text{AQ,sp}) / 4.1858$                                                                                                               | cal/mol                  |

注意：“ij”代表与相 ph 中成分 C 对应的辅助指数或字母。

在考虑到水溶液时，波恩函数 UR (AQ, sp) 只对体系中的水溶性的 species 成立。

用户为相中某 species 的容量变量定义的单位：

| 量                 | 建议使用的名称与表达式                                                                                                                                                                                                                                                                | 单位                  |
|-------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------|
| 适合水<br>溶液的<br>特殊量 | $\text{ML}_{ij} = \text{Y}(\text{AQ,FE+3}) * \text{AH2O} / \text{YH2O}$                                                                                                                                                                                                    | <i>molality (m)</i> |
|                   | $\text{ISTR} = 1 * \text{IS1} + 1 * \text{IS2} + 1 * \text{IS3}$<br>where $\text{AH2O} = 55.508435$<br>$\text{YH2O} = \text{Y}(\text{AQ,H2O})$<br>$\text{ISn} = .5 * \text{MLi} * \text{Zi}^{**2} + .5 * \text{MLj} * \text{Zj}^{**2} + .5 * \text{MLk} * \text{Zk}^{**2}$ | <i>molality (m)</i> |

注意：“ij”代表与相 ph 中成分 C 对应的辅助指数或字母。

## 附录 D 参考状态和标准状态

(包含在 Thermo-Calc Software/Databases 的框架中)

**简介:**

一般情况下，对于用特定模型描述的各种体系中各种组元、species 和相而言，“参考状态”和“标准状态”的概念很难完全理解，而且很容易搞混淆。因此，在设定/改变参考状态和解释计算结果时可能存在困难和困惑。作为第一个建议，我们通常鼓励我用户先浏览一下文件 Thermo-Calc Software System 的 Section 2.13 和 TUR User's Guide 的 Section 10.3，以及阅读一些优先使用 SET\_REFERENCE\_STATE 命令的热力学教材。

**Thermo-Calc 怎样处理参考状态**

从实用的观点来说，吉布斯自由能总是和一些参考状态以一种或几种方式联系的。默认情况下，一个 Thermo-Calc 数据库总是使用元素（在它们的标准状态下，也就是在 298.15K 和 1bar 的条件下处于稳定结构的相）作为默认的组元，这样将所有组元的参考状态设定为所谓的 SER (Stable Element Reference)，它在一个已定义的体系中建立起一个特定的“吉布斯自由能参考平面”。当在 GES/POLY 模块中定义了温度-压强条件时，一个吉布斯自由能表面便在整个成分空间形成了。特别要注意：

(1) 吉布斯自由能表达式（标准的和超额自由能）是根据实验信息和理论数据评估出来的，而实验数据通常是在 273.15K 以上、等于或大于 1bar 的压强下测量的。

(2) 作为特殊类型的表达式，通常不能外推到 298.15K 以下（尤其是远低于 298.15K 时就更不合适外推了，因为在这么低的温度范围内进行外推，可能会导致  $C_p$ 、 $H$  和  $S$  以及  $G$  产生非常奇怪的值）。

(3) 当然，某些估计工作是依据已有的低于 298.15K 的实验和理论数据来完成的，这样的话，你可以为所评估的  $G/L$  的表达式设定最低应用温度，这样外推至一个合理的温度是比较安全的、也是合适的。

(4) 对一些纯物质和/或溶液相（通常是他们的主要相成分），Thermo-Calc 软件的 CES 体系可以使用高级热力学模型来完成低于 298.15K 的特定温度范围的合理计算，例如：以完成的 Revised HKF model (Helgeson-Kirkham-Flowers) 可以在一个温度压强宽范围计算，水（固，液，气相）的热力学和动力学性质。

(5) 现在，第一性原理计算在计算接近于 0K 的各种热力学和化学物理性质中占有唯一的和有效的地位。通过把这些结果和 CALPHAD 估计值合并为一个数据库，从 0K 到高温的计算是可能的。

另外应特别注意：默认设定下、在Thermo-Calc数据库中，当<element>作为关键字使用，  
DEFINE\_SYSTEM\_DEFAULT命令总有一个伴随的“G-reference type index”，它全局地定义了  
数据库中所有元素的参考状态。有三种类型的参考态选择：

**1 ==> G            G refers to G(298.15,1) = H(298.15,1)-T\*S(298.15,1)**

**2 ==> H298        G refers to H(298.15,1) [assuming S(0,1)=0]**

**3 ==> H0          G refers to H(0,1)            [assuming S(0,1)=0]**

（在 Thermo-Calc 数据库范围或 SGTE 推荐的数据库中）一种物质或合金溶液数据库，  
通常使用第二种类型，也就是，H298（即 H（298.15K，1bar）并且假设 S（0K，1bar）=0）。  
这就意味着存储在数据库中，以 SER 态为参考的一种物质或相的一个 species 的标准吉布斯  
自由能表达式总是被解释为以 H（298.15，1）参考。而 H（298.15，1）是相关元素以他们  
的 SER 状态存在时、在 298.15K 和 1bar 的形成焓。

$$G(\text{FCC\_A1,FE:C;0}) - H298(\text{GRAPHITE,C;0}) - H298(\text{BCC\_A2,FE;0})$$

$$= +G\text{FEFCC} + G\text{HSERCC} + G\text{PCFCC} + 77207 - 15.877 * T$$

$$G(\text{M7C3,FE:C;0}) - 3 H298(\text{GRAPHITE,C;0}) - 7 H298(\text{BCC\_A2,FE;0})$$

$$= +7 * G\text{HSERFE} + 3 * G\text{HSERCC} + 75000 - 48.2168 * T$$

这就是为什么为了出版方便，这样一个参考状态通常被简称写为 HSER，而吉布斯自由  
能的表达式可以相应地简写为：

$$G0(\text{FCC\_A1,FE:C}) - \text{HSER} = +G\text{FEFCC} + G\text{HSERCC} + G\text{PCFCC} + 77207 - 15.877 * T$$

$$G0(\text{M7C3,FE:C}) - \text{HSER} = +7 * G\text{HSERFE} + 3 * G\text{HSERCC} + 75000 - 48.2168 * T$$

通常，数据库中的 TDB 命令 **DEFINE\_SYSTEM\_DEFAULT ELEMENT 2 !** 将 HSER  
状态作为默认设定，因此，数据库中所储存的 GIL 表达式（表达为 f(t,P,X)，包括标准量  
和过剩量）将会为一个所定义的体系建立一个特定的吉布斯自由能参考平面，通常就是指  
HSER 状态。

然而，Thermo-Calc 软件（在它的大多数基本模块如 GES，POLY。PARROT/ED\_EXP  
和 POST）也允许用户修改 TDB 中默认定义的元素而重新定义体系的组元（在某些特殊/先  
进的模块，如 POURBAIX 内，它也可以为体系的组元的定义中实施一些必要的改变，以与  
所选择的模型和计算一些特定性质如 PH 和 EH 的目的相一致），同时也可以为所定义的组  
元选择其它合适的参考态，包括参考相、参考温度（必须高于 298.14K）、参考压力（必须

等于或高于 1bar)。这样, Thermo-Calc 将会建立一个新的“吉布斯自由能参考平面”, 然后合理地计算各种热力学性质:

- ☞ 规定体系的 G-H-S and Gm-Hm-Sm;
- ☞ 各相的 G-H-S(phase) and Gm-Hm-Sm(phase);
- ☞ MU(comp) and AC(comp): 体系的组元的化学势和活度, 以默认的组元 (SER) 的参考状态为  

$$\text{MU}(\text{comp}) = \text{RTlnAC}(\text{comp});$$
- ☞ MUR(comp) and ACR(comp): 体系成分的化学势和活度, 以重新定义的组元的参考状态为  $\text{MUR}(\text{comp}) = \text{RTlnACR}(\text{comp});$
- ☞ DGM(comp): 体系的组元的驱动力(/RT);
- ☞ 等等。

同时请注意:

(1) 对于所选的数据库 (或一个特定的合并数据库), 不管体系成分的参考状态是如何定义的, 所计算的一个确定体系 (在特定的 T-P-X 空间) 的总的吉布斯自由能表面总是相同的。这是因为, 它总是由数据库中储存的吉布斯自由能表达式 (标准量和过剩量) 所决定的。这也说明每个和所有组元 (无论它们的参考状态是如何定义的) 对各相和整个体系 (在 T-P-X 空间之下) 的贡献总是相同的, 而且进一步说明改变体系的组元和它们的参考状态的定义不会改变一个确定的体系 (在某一个 T-P-X 空间之下) 的质量守恒 (和整体吉布斯自由能最小的原则)。

(2) 当改变某一组元的参考状态时, 在一个确定的体系 (在 T-P-X 空间之下) 中和该参考状态下, 该组元的化学势和活度也会改变。因此, 对一个组元的参考状态的合理定义对一个热力学模块总是必须的, 而且通常还应该与该组元的化学势或活度的测定有关 (即指实验中特定的参考相)。

### 关于化学势和活度的几个重要问题。

(1) 这两个概念总是与参考状态和标准状态的定义有关, 如果参考状态和标准状态的定义不合理, 它们就没有任何意义, 它们不仅适用于体系的组元 [例如: MUR(comp) 或 MU(comp), ACR(comp) 或 AC(comp)], 也适用于相的组成 (species) [如: MUR(sp ,ph) 或 MU(sp ,ph), ACR(comp) 或 AC(comp)]。

(2) 对于 species, Thermo-Calc 可以计算单亚点阵的溶体相中 species 的化学势和活度（当然，有相应的溶体模型来处理此类性质的计算），例如：

GAS 混合物: MUR(species ,GAS) and ACR(species ,GAS)

treated by ideal EOS and ideal mixing model

or an implemented non-ideal model.

AQUEOUS solution: MUR(species ,AQUEOUS) and ACR(species ,AQUEOUS)

treated by DHLL, SIT, PITZ or HKF model

LIQUID solution: MUR(species ,LIQUID) and ACR(species ,LIQUID)

(*metallic*) treated by RKM or another model

但是，如果一个溶体相有两种或更多的亚点阵，就不能计算这样的性质。

Non-substitutional phase:

*e.g.*, FCC: (Fe,Cr)1(C,N,Va)1

Ionic Two-sublattice phase:

*e.g.*, ION\_LIQ: (Cr+3,Fe+2)1(O-2,FeO3/2,VA)1

SPINEL: (Fe+3,Fe+2)1(Fe+3,Fe+2,Va)2(Fe+2,Va)2(O-2)4

(3) 对于体系的组元，（当 T-P-X 条件固定时），不管组元的参考状态如何定义，MU(comp)\_HSER 和 AC(comp)\_HSER [也就是在 HSER 参考状态下的 MU (comp) 和 AC (comp)] 总是保持不变。这是因为 MU(comp)\_HSER 和 AC(comp)\_HSER 是使用数据库中存储的吉布斯自由能表达式来计算的，（如前所述）而这些表达式是基于 HSER 参考态的。因此，AC(comp)\_HSER 值没有任何物理意义。

此外，当使用默认 SER（和 HSER）参考状态、而且定义了 PT 条件时，（从 TDB 模块）取得的以及（在 GES/POLY 模块）计算得到的 G0 (phase,species)和 G0(phase)的值是：

$$\delta G_0(\text{ph},\text{sp})_{\text{PT}} = G_0(\text{ph},\text{sp})_{\text{PT}} - H_{298}(\text{SER})$$

$$= \text{<as in TDB/GES>}$$

$$\delta G_0(\text{ph})_{\text{PT}} = G_0(\text{ph})_{\text{PT}} - H_{298}(\text{SER})$$

$$= \text{<as in TDB/GES>}$$

而且通常情况有：

$$\text{MUR}(\text{comp})_{\text{HSER}} = \text{MU}(\text{comp}@_{\text{HSER}}) = \text{MU}_0(\text{comp})@_{\text{HSER}}$$

$$\text{ACR}(\text{comp})_{\text{HSER}} = \text{AC}(\text{comp})_{\text{HSER}}$$

在合理设定参考状态之后（不是 SER/HSER 状态），一个确定体系的一个新的“吉布斯自由能参考平面”就建立了。同时  $\text{MUR}(\text{comp})_{\text{RefSt}}$  性质就是衡量（在一个确定的 P-T-X 条件下的）“吉布斯自由能表面”和“吉布斯自由能参考平面”之间差别的一个量。这样它的  $\text{ACR}(\text{comp})_{\text{RefSt}}$  就有了物理意义。例如：通过将一个组元的参考态设定为在当前温度\*（或 298.15K 或 970 摄氏度）和 1 bar 下，以一个已知相（通常是、但不一定总是该组元在 298.15 和 1 bar 条件下的稳定相）存在：

$$\text{RefSt} = \text{SP} * 101325 \quad (\text{donated as } \_1\text{T})$$

(即, by "s-r-s comp SP \* 101325")

$$\begin{aligned} \delta G_0(\text{ph}, \text{sp})_{\text{-PT}} &= [\text{G}_0(\text{ph}, \text{sp})_{\text{-PT}} - \text{H}_{298}(\text{SER})] \\ &\quad - [\text{G}_0(\text{ph}, \text{sp})_{\text{-1T}} - \text{H}_{298}(\text{SER})] \\ &= \text{G}_0(\text{ph}, \text{sp})_{\text{-PT}} - \text{G}_0(\text{ph}, \text{sp})_{\text{-1T}} \\ \delta G_0(\text{ph})_{\text{-PT}} &= [\text{G}_0(\text{ph})_{\text{-PT}} - \text{H}_{298}(\text{SER})] - [\text{G}_0(\text{ph})_{\text{-1T}} - \text{H}_{298}(\text{SER})] \\ &= \text{G}_0(\text{ph})_{\text{-PT}} - \text{G}_0(\text{ph})_{\text{-1T}} \\ \text{MUR}(\text{comp})_{\text{-1T}} &= \text{delta}\{\delta G(\text{sys})_{\text{-PT}}\} / \text{delta}\{\delta N(\text{comp})\} \\ &= \text{MU}(\text{comp})_{\text{-PT}} - \text{MU}_0(\text{comp})_{\text{-1T}} \\ \text{ACR}(\text{comp})_{\text{-1T}} &= \exp[\text{MUR}(\text{comp})_{\text{-1T}} / \text{RT}] \end{aligned}$$

$$\text{RefSt} = \text{SP } 298.15 \text{ } 101325 \quad (\text{donated as } \_ \text{RPT}, \text{ i.e., as room-PT})$$

(i.e., by "s-r-s comp SP 298.15 101325")

$$\begin{aligned} \delta G_0(\text{ph}, \text{sp})_{\text{-PT}} &= [\text{G}_0(\text{ph}, \text{sp})_{\text{-PT}} - \text{H}_{298}(\text{SER})] \\ &\quad - [\text{G}_0(\text{ph}, \text{sp})_{\text{-RPT}} - \text{H}_{298}(\text{SER})] \\ &= \text{G}_0(\text{ph}, \text{sp})_{\text{-PT}} - \text{G}_0(\text{ph}, \text{sp})_{\text{-RPT}} \\ \delta G_0(\text{ph})_{\text{-PT}} &= [\text{G}_0(\text{ph})_{\text{-PT}} - \text{H}_{298}(\text{SER})] - [\text{G}_0(\text{ph})_{\text{-RPT}} - \text{H}_{298}(\text{SER})] \\ &= \text{G}_0(\text{ph})_{\text{-PT}} - \text{G}_0(\text{ph})_{\text{-RPT}} \\ \text{MUR}(\text{comp})_{\text{-RPT}} &= \text{delta}\{\delta G(\text{sys})_{\text{-PT}}\} / \text{delta}\{\delta N(\text{comp})\} \end{aligned}$$



$$= \text{MU}(\text{comp})_{\text{PT}} - \text{MU0}(\text{comp})_{\text{RPT}}$$

$$\text{ACR}(\text{comp})_{\text{RPT}} = \exp[\text{MUR}(\text{comp})_{\text{RPT}} / \text{RT}]$$

(4) 在一个严格的评估过程中，你应该非常小心地使用活度信息：活度的测定总是基于为特定组元/species 实验选定的参考状态。

### 几个特定的例子：

现在，让我们看几个例子，来看怎样为体系成分合理地设定参考状态，怎样正确地获得和解释活度性质。下面是使用 SSOL2 数据库计算的一些例子的详细清单（显示了正确和错误的设定）：

#### A) 纯 C 体系:

Condition  $P=101325 \text{ Pa}$ ,  $T=1000 \text{ K}$ ,  $N=1$

| <i>ref_ph</i> | <i>ref_T/P</i> | <i>AC(C)</i> | <i>ACR(C)</i> | <i>MU(C)</i> | <i>MUR(C)</i> | <i>Gm(gra)</i> | <i>NP(gra)</i> | <i>Gm</i> |
|---------------|----------------|--------------|---------------|--------------|---------------|----------------|----------------|-----------|
| SER           | .21818         | .21818       | -12658.3      | -12658.3     | -12658.3      | 1              | -12658.3       |           |

Why? Graphite (stable element) is stable at 1000 K

$\text{MU0}(\text{C})@\text{HSER} = -12658.3$

$\text{MU0}(\text{C}@1000\text{K}) = -12658.3$

$\text{MU}(\text{C}@1000\text{K}) = \text{MU0}(\text{C}@1000\text{K}) =$

$\text{MU0}(\text{C})@\text{HSER}$

$= -12658.3$

$$\rightarrow \text{MU}(\text{C}) = \text{MU}(\text{C}@1000\text{K}) = -12658.3$$

$$\text{AC}(\text{C}) = \exp[\text{MU}(\text{C})/\text{RT}] = 0.21818$$

$$\text{MUR}(\text{C}) = \text{MU}(\text{C}@1000\text{K}) = -12658.3$$

$$\text{ACR}(\text{C}) = \exp[\text{MUR}(\text{C})/\text{RT}] = 0.21818$$

-----

-----

|     |   |        |        |   |          |   |          |   |          |
|-----|---|--------|--------|---|----------|---|----------|---|----------|
| gra | * | 101325 | .21818 | 1 | -12658.3 | 0 | -12658.3 | 1 | -12658.3 |
|-----|---|--------|--------|---|----------|---|----------|---|----------|

-----

-----

Why? Graphite (stable element) is stable at 1000 K

$$\text{MU0}(\text{C})@1000\text{K} = -12658.3$$

$$\text{MU0}(\text{C}@1000\text{K}) = -12658.3$$

$$\text{MU}(\text{C}@1000\text{K}) = \text{MU0}(\text{C}@1000\text{K})$$

$$= -12658.3$$

$$\rightarrow \text{MU}(\text{C}) = \text{MU}(\text{C}@1000\text{K}) = -12658.3$$

$$\text{AC}(\text{C}) = \exp[\text{MU}(\text{C})/\text{RT}] = 0.21818$$

$$\text{MUR}(\text{C}) = \text{MU}(\text{C}@1000\text{K}) - \text{MU0}(\text{C})@1000\text{K}$$

$$= (-12658.3) - (-12658.3) = 0$$

$$\text{ACR}(\text{C}) = \exp[\text{MUR}(\text{C})/\text{RT}] = 1$$

-----

-----

|     |        |        |        |        |          |          |          |   |          |
|-----|--------|--------|--------|--------|----------|----------|----------|---|----------|
| gra | 298.15 | 101325 | .21818 | .26805 | -12658.3 | -10946.8 | -12658.3 | 1 | -12658.3 |
|-----|--------|--------|--------|--------|----------|----------|----------|---|----------|

-----

-----

Why? Graphite (stable element) is stable

$$\text{MU0}(\text{C})@298.15 = -1711.5$$

$$\text{MU0}(\text{C}@1000\text{K}) = -12658.3$$

$$\text{MU}(\text{C}@1000\text{K}) = \text{MU0}(\text{C}@1000\text{K})$$

$$= -12658.3$$

$$\rightarrow \text{MU}(\text{C}) = \text{MU}(\text{C}@1000\text{K}) = -12658.3$$

$$AC(C) = \exp[MU(C)/RT] = 0.21818$$

$$MUR(C) = MU(C@1000K) - MU0(C)@298.15$$

$$= (-12658.3) - (-1711.5) = -10946.8$$

$$ACR(C) = \exp[MUR(C)/RT] = 0.26805$$

-----

-----

---- 但下面的外推根本就不正确 !!!

|     |     |        |        |        |          |          |          |          |
|-----|-----|--------|--------|--------|----------|----------|----------|----------|
| gra | 200 | 101325 | .21818 | .25465 | -12658.3 | -11373.2 | -12658.3 | -12658.3 |
| gra | 100 | 101325 | .21818 | .22604 | -12658.3 | -12364.1 | -12658.3 | -12658.3 |
| gra | 95  | 101325 | .21818 | .21765 | -12658.3 | -12678.5 | -12658.3 | -12658.3 |
| gra | 10  | 101325 | .21818 | 0      | -12658.3 | -9609698 | -12658.3 | -12658.3 |

=====

=====

=====

=====

## B) 纯 Fe 体系:

*Condition P=101325 Pa, T=1000 K, N=1*

-----

-----

| <i>ref_ph</i> | <i>ref_T/P</i> | <i>AC(Fe)</i> | <i>ACR(Fe)</i> | <i>MU(Fe)</i> | <i>MUR(Fe)</i> | <i>Gm(bcc)</i> | <i>NP(bcc)</i> |
|---------------|----------------|---------------|----------------|---------------|----------------|----------------|----------------|
| <i>Gm</i>     |                |               |                |               |                |                |                |

-----

-----

SER .00619 .00619 -42271.7 -42271.7 -42271.7 1 -42271.7

-----

-----

Why? BCC\_Fe (stable element) is stable at 1000 K

$$\text{MU0(Fe)@HSER} = -42271.7$$

$$\text{MU0(Fe@1000K)} = -42271.7$$

$$\text{MU(Fe@1000K)} = \text{MU0(Fe@1000K)} =$$

$$\text{MU0(Fe)@HSER}$$

$$= -42271.7$$

$$\rightarrow \text{MU(Fe)} = \text{MU(Fe@1000K)} = -42271.7$$

$$\text{AC(Fe)} = \exp[\text{MU(Fe)/RT}] = 0.00619$$

$$\text{MUR(Fe)} = \text{MU(Fe@1000K)} = -42271.7$$

$$\text{ACR(Fe)} = \exp[\text{MUR(Fe)/RT}] = 0.00619$$

-----

-----

bcc \* 101325 .00619 1 -42271.7 0 -42271.7 1 -42271.7

-----

-----

Why? BCC\_Fe (stable element) is stable at 1000 K

$$\text{MU0(Fe)@1000K} = -42271.7$$

$$\text{MU0(Fe@1000K)} = -42271.7$$

$$\text{MU(Fe@1000K)} = \text{MU0(Fe@1000K)}$$

$$= -42271.7$$

$$\rightarrow \text{MU(Fe)} = \text{MU(Fe@1000K)} = -42271.7$$

$$\text{AC(Fe)} = \exp[\text{MU(Fe)/RT}] = 0.00619$$

$$\text{MUR(Fe)} = \text{MU(Fe@1000K)} - \text{MU0(Fe)@1000K}$$

$$= (-42271.7) - (-42271.7) = 0$$

$$\text{ACR(Fe)} = \exp[\text{MUR(Fe)/RT}] = 1$$

-----

-----

```
bcc 298.15 101325 .00619 .01674 -42271.7 -34139.0 -42271.7 1 -42271.7
```

---



---

Why? BCC\_Fe (stable element) is stable at 1000 K

$$\text{MU0(Fe)}@298.15 = -8132.1$$

$$\text{MU0(Fe@1000K)} = -42271.7$$

$$\begin{aligned}\text{MU(Fe@1000K)} &= \text{MU0(Fe@1000K)} \\ &= -42271.7\end{aligned}$$

$$\rightarrow \text{MU(Fe)} = \text{MU(Fe@1000K)} = -42271.7$$

$$\text{AC(Fe)} = \exp[\text{MU(Fe)}/\text{RT}] = 0.00619$$

$$\begin{aligned}\text{MUR(Fe)} &= \text{MU(Fe@1000K)} - \text{MU0(Fe)}@298.15 \\ &= (-42271.7) - (-8132.1) = -34139.0\end{aligned}$$

$$\text{ACR(Fe)} = \exp[\text{MUR(Fe)}/\text{RT}] = 0.01674$$


---



---

---- 但下面的外推根本就不正确 !!!

```
bcc 200 101325 .00619 .01258 -42271.7 -36380.0 -42271.7 -42271.7
```

```
bcc 100 101325 .00619 .01086 -42271.7 -37604.0 -42271.7 -42271.7
```

```
bcc 50 101325 .00619 .01042 -42271.7 -37947.2 -42271.7 -42271.7
```

```
bcc 25 101325 .00619 .00933 -42271.7 -38863.4 -42271.7 -42271.7
```

```
bcc 11 101325 .00619 .00625 -42271.7 -42201.9 -42271.7 -42271.7
```

---



---



---

### C) Fe-C 二元体系:

Condition  $P=101325 \text{ Pa}$ ,  $T=1000 \text{ K}$ ,  $N=1$ ,  $X(\text{C})=0.5$

---



---

```
ref_ph ref_T/P AC(C) ACR(C) MU(C) MUR(C) Gm(gra) NP(gra)
```

*AC(Fe) ACR(Fe) MU(Fe) MUR(Fe) Gm(bcc) NP(bcc)*

*Gm*

```


C-SER .21818 .21818 -12658.3 -12658.3 -12658.3 .49963875
Fe-SER .00619 .00619 -42277.8 -42277.8 -42256.4 .50036125
 -27468.1


```

Why? Graphite & BCC\_Fe are stable at 1000 K

MU0(C)@HSER = -12658.3

MU0(C@1000K) = -12658.3

MU(C@1000K) =

MU0(C@1000K)+'ex-contribution(C)'

= -12658.3

MU0(Fe)@HSER = -42271.7

MU0(Fe@1000K) = -42271.7

MU(Fe@1000K) =

MU0(Fe@1000K)+'ex-contribution(Fe)'

= -42277.8

--> MU(C) = MU(C@1000K) = -12658.3

AC(C) = exp[MU(C)/RT] = 0.21818

MUR(C) = MU(C@1000K) = -12658.3

ACR(C) = exp[MUR(C)/RT] = 0.21818

--> MU(Fe) = MU(Fe@1000K) = -42277.8

AC(Fe) = exp[MU(Fe)/RT] = 0.00619

MUR(Fe) = MU(Fe@1000K) = -42277.8

ACR(Fe) = exp[MUR(Fe)/RT] = 0.00619

|          |                      |          |      |                    |
|----------|----------------------|----------|------|--------------------|
| C-gra *  | 101325 .21818 1      | -12658.3 | 0    | -12658.3 .49963875 |
| Fe-bcc * | 101325 .00619 .99928 | -42277.8 | -6.1 | -42256.4 .50036125 |
|          |                      |          |      | -27468.1           |

-----

-----

Why? Graphite & BCC\_Fe are stable at 1000 K

$$\text{MU0(C)}@1000\text{K} = -12658.3$$

$$\text{MU0(C@1000K)} = -12658.3$$

$$\text{MU(C@1000K)} =$$

$$\text{MU0(C@1000K)} + \text{'ex-contribution(C)'}$$

$$= -12658.3$$

$$\text{MU0(Fe)}@1000\text{K} = -42271.7$$

$$\text{MU0(Fe@1000K)} = -42271.7$$

$$\text{MU(Fe@1000K)} =$$

$$\text{MU0(Fe@1000K)} + \text{'ex-contribution(Fe)'}$$

$$= -42277.8$$

$$\text{--> MU(C)} = \text{MU(C@1000K)} = -12658.3$$

$$\text{AC(C)} = \exp[\text{MU(C)/RT}] = 0.21818$$

$$\text{MUR(C)} = \text{MU(C@1000K)} - \text{MU0(C)}@1000\text{K}$$

$$= (-12658.3) - (-12658.3) = 0$$

$$\text{ACR(C)} = \exp[\text{MUR(C)/RT}] = 1$$

$$\text{--> MU(Fe)} = \text{MU(Fe@1000K)} = -42277.8$$

$$\text{AC(Fe)} = \exp[\text{MU(Fe)/RT}] = 0.00619$$

$$\text{MUR(Fe)} = \text{MU(Fe@1000K)} - \text{MU0(Fe)}@1000\text{K}$$

$$= (-42277.8) - (-42271.7) = -6.1$$

$$\text{ACR(Fe)} = \exp[\text{MUR(Fe)/RT}] = 0.99928$$

-----

-----

|       |        |                      |          |          |                    |
|-------|--------|----------------------|----------|----------|--------------------|
| C-gra | 298.15 | 101325 .21818 .26805 | -12658.3 | -10946.8 | -12658.3 .49963875 |
|-------|--------|----------------------|----------|----------|--------------------|

|        |        |                      |          |          |                    |
|--------|--------|----------------------|----------|----------|--------------------|
| Fe-bcc | 298.15 | 101325 .00619 .01646 | -42277.8 | -34145.0 | -42256.4 .50036125 |
|--------|--------|----------------------|----------|----------|--------------------|



-27468.1

-----  
-----

Why? Graphite & BCC\_Fe are stable at 1000 K

$$\text{MU0(C)}@298.15 = -1711.5$$

$$\text{MU0(C@1000K)} = -12658.3$$

$$\begin{aligned}\text{MU(C@1000K)} &= \text{MU0(C@1000K)} + \text{'ex-contribution(C)'} \\ &= -12658.3\end{aligned}$$

$$\text{MU0(Fe)}_298.15 = -8132.1$$

$$\text{MU0(Fe@1000K)} = -42271.7$$

$$\text{MU(Fe@1000K)} =$$

$$\text{MU0(Fe@1000K)} + \text{'ex-contribution(Fe)'}$$

$$= -42277.8$$

$$\text{--> MU(C)} = \text{MU(C@1000K)} = -12658.3$$

$$\text{AC(C)} = \exp[\text{MU(C)}/\text{RT}] = 0.21818$$

$$\begin{aligned}\text{MUR(C)} &= \text{MU(C@1000K)} - \text{MU0(C)}_298.15 \\ &= (-12658.3) - (-1711.5) = -10946.8\end{aligned}$$

$$\text{ACR(C)} = \exp[\text{MUR(C)}/\text{RT}] = 0.26805$$

$$\text{--> MU(Fe)} = \text{MU(Fe@1000K)} = -42277.8$$

$$\text{AC(Fe)} = \exp[\text{MU(Fe)}/\text{RT}] = 0.00619$$

$$\begin{aligned}\text{MUR(Fe)} &= \text{MU(Fe@1000K)} - \text{MU0(Fe)}_298.15 \\ &= (-42277.8) - (-8132.1) = -34139.0\end{aligned}$$

$$\text{ACR(Fe)} = \exp[\text{MUR(Fe)}/\text{RT}] = 0.01674$$

-----  
-----

---- 但下面的外推根本就不正确 !!!

|     |     |        |        |        |          |          |          |
|-----|-----|--------|--------|--------|----------|----------|----------|
| gra | 200 | 101325 | .21818 | .25465 | -12658.3 | -11373.2 | -12658.3 |
|-----|-----|--------|--------|--------|----------|----------|----------|

|     |     |        |        |        |          |          |          |
|-----|-----|--------|--------|--------|----------|----------|----------|
| bcc | 200 | 101325 | .00619 | .01258 | -42277.8 | -36380.0 | -42256.4 |
|-----|-----|--------|--------|--------|----------|----------|----------|

-27468.1

## D) Fe-Cr-C 三元体系:

Condition  $P=101325\text{ Pa}$ ,  $T=1000\text{ K}$ ,  $N=1$ ,  $X(\text{C})=0.1$ ,  $X(\text{Cr})=0.2$

| <i>ref_ph ref_T/P</i> | <i>AC(C)</i>  | <i>ACR(C)</i>  | <i>MU(C)</i>  | <i>MUR(C)</i>  | <i>Gm(gra)</i>  | <i>NP(gra)</i> |
|-----------------------|---------------|----------------|---------------|----------------|-----------------|----------------|
|                       | <i>AC(Cr)</i> | <i>ACR(Cr)</i> | <i>MU(Cr)</i> | <i>MUR(Cr)</i> | <i>Gm(bcc)</i>  | <i>NP(bcc)</i> |
|                       | <i>AC(Fe)</i> | <i>ACR(Fe)</i> | <i>MU(Fe)</i> | <i>MUR(Fe)</i> | <i>Gm(m7c3)</i> |                |
| <i>NP(m7c3)</i>       |               |                |               |                |                 |                |

*Gm*

|        |        |        |          |          |          |           |
|--------|--------|--------|----------|----------|----------|-----------|
| C-SER  | .01840 | .01840 | -33218.3 | -33218.3 | -12658.3 | 0         |
| Cr-SER | .00132 | .00132 | -55129.9 | -55129.9 | -42863.3 | .66692425 |
| Fe-SER | .00602 | .00602 | -42503.4 | -42503.4 | -46577.0 | .33307575 |
|        |        |        |          |          |          | -44100.2  |

Why? BCC & M7C3 are stable at 1000 K

$\text{MU0}(\text{C})@\text{HSER} = -12658.3$

$\text{MU0}(\text{C}@1000\text{K}) = -12658.3$

$\text{MU}(\text{C}@1000\text{K}) =$

$\text{MU0}(\text{C}@1000\text{K}) + \text{'ex-contribution(C)'} =$

$-33218.3$

$\text{MU0}(\text{Cr})@\text{HSER} = -36693.7$

$\text{MU0}(\text{Cr}@1000\text{K}) = -36693.7$

$\text{MU}(\text{Cr}@1000\text{K}) =$

$\text{MU0}(\text{Cr}@1000\text{K}) + \text{'ex-contribution(Cr)'} =$

$-55129.9$

$$\text{MU0(Fe)@HSER} = -42271.7$$

$$\text{MU0(Fe@1000K)} = -42271.7$$

$$\text{MU(Fe@1000K)} =$$

$$\text{MU0(Fe@1000K)+'ex-contribution(Fe)'} =$$

$$-42503.4$$

$$\text{--> MU(C) = MU(C@1000K) = -33218.3}$$

$$\text{AC(C) = exp[MU(C)/RT] = 0.0184}$$

$$\text{MUR(C) = MU(C@1000K) = -33218.3}$$

$$\text{ACR(C) = exp[MUR(C)/RT] = 0.0184}$$

$$\text{--> MU(Cr) = MU(Cr@1000K) = -55129.9}$$

$$\text{AC(Cr) = exp[MU(Cr)/RT] = 0.00132}$$

$$\text{MUR(Cr) = MU(Cr@1000K) = -55129.9}$$

$$\text{ACR(Cr) = exp[MUR(Cr)/RT] = 0.00132}$$

$$\text{--> MU(Fe) = MU(Fe@1000K) = -42503.4}$$

$$\text{AC(Fe) = exp[MU(Fe)/RT] = 0.00602}$$

$$\text{MUR(Fe) = MU(Fe@1000K) = -42503.4}$$

$$\text{ACR(Fe) = exp[MUR(Fe)/RT] = 0.00602}$$

---

|          |        |        |        |          |          |          |           |
|----------|--------|--------|--------|----------|----------|----------|-----------|
| C-gra *  | 101325 | .01840 | .08435 | -33218.3 | -20560.0 | -12658.3 | 0         |
| Cr-bcc * | 101325 | .00132 | .10889 | -55129.9 | -18436.2 | -42863.3 | .66692425 |
| Fe-bcc * | 101325 | .00602 | .97252 | -42503.4 | -231.694 | -46577.0 | .33307575 |
|          |        |        |        |          |          |          | -44100.2  |

---

Why? BCC & M7C3 are stable at 1000 K

$$\text{MU0(C)@1000K} = -12658.3$$

$$\text{MU0(C@1000K)} = -12658.3$$

$$\text{MU(C@1000K)} =$$

$$\text{MU0(C@1000K)+'ex-contribution(C)'} =$$

$$= -33218.3$$

$$\text{MU0}(\text{Cr})@1000\text{K} = -36693.7$$

$$\text{MU0}(\text{Cr}@1000\text{K}) = -36693.7$$

$$\text{MU}(\text{Cr}@1000\text{K}) =$$

$$\text{MU0}(\text{Cr}@1000\text{K}) + \text{'ex-contribution}(\text{Cr})'$$

$$= -55129.9$$

$$\text{MU0}(\text{Fe})@1000\text{K} = -42271.7$$

$$\text{MU0}(\text{Fe}@1000\text{K}) = -42271.7$$

$$\text{MU}(\text{Fe}@1000\text{K}) =$$

$$\text{MU0}(\text{Fe}@1000\text{K}) + \text{'ex-contribution}(\text{Fe})'$$

$$= -42503.4$$

$$\text{--> MU}(\text{C}) = \text{MU}(\text{C}@1000\text{K}) = -33218.3$$

$$\text{AC}(\text{C}) = \exp[\text{MU}(\text{C})/\text{RT}] = 0.0184$$

$$\text{MUR}(\text{C}) = \text{MU}(\text{C}@1000\text{K}) - \text{MU0}(\text{C})@1000\text{K}$$

$$= (-33218.3) - (-12658.3) = -20560.0$$

$$\text{ACR}(\text{C}) = \exp[\text{MUR}(\text{C})/\text{RT}] = 0.08435$$

$$\text{--> MU}(\text{Cr}) = \text{MU}(\text{Cr}@1000\text{K}) = -55129.9$$

$$\text{AC}(\text{Cr}) = \exp[\text{MU}(\text{Cr})/\text{RT}] = 0.00132$$

$$\text{MUR}(\text{Cr}) = \text{MU}(\text{Cr}@1000\text{K}) - \text{MU0}(\text{Cr})@1000\text{K}$$

$$= (-55129.9) - (-36693.7) = -18436.2$$

$$\text{ACR}(\text{Cr}) = \exp[\text{MUR}(\text{Cr})/\text{RT}] = 0.10889$$

$$\text{--> MU}(\text{Fe}) = \text{MU}(\text{Fe}@1000\text{K}) = -42503.4$$

$$\text{AC}(\text{Fe}) = \exp[\text{MU}(\text{Fe})/\text{RT}] = 0.00602$$

$$\text{MUR}(\text{Fe}) = \text{MU}(\text{Fe}@1000\text{K}) - \text{MU0}(\text{Fe})@1000\text{K}$$

$$= (-42503.4) - (-42271.7) = -231.694$$

$$\text{ACR}(\text{Fe}) = \exp[\text{MUR}(\text{Fe})/\text{RT}] = 0.97252$$

-----

-----

C-gra 298.15 101325 .01840 .02261 -33218.3 -31506.7 -12658.3 0

Cr-bcc 298.15 101325 .00132 .00307 -55129.9 -48110.8 -42863.3 .66692425

Fe-bcc 298.15 101325 .00602 .01602 -42503.4 -34370.7 -46577.0 .33307575

-44100.2

-----

-----

Why? BCC & M7C3 are stable at 1000 K

$$\text{MU0(C)}@298.15 = -1711.5$$

$$\text{MU0(C@1000K)} = -1265.8$$

$$\begin{aligned}\text{MU(C@1000K)} &= \text{MU0(C@1000K)} + \text{'ex-contribution(C)'} \\ &= -33218.3\end{aligned}$$

$$\text{MU0(Cr)}@298.15 = -7019.1$$

$$\text{MU0(Cr@1000K)} = -36693.7$$

$$\text{MU(Cr@1000K)} =$$

$$\text{MU0(Cr@1000K)} + \text{'ex-contribution(Cr)'}$$

$$= -55129.9$$

$$\text{MU0(Fe)}@298.15 = -8132.1$$

$$\text{MU0(Fe@1000K)} = -42271.7$$

$$\text{MU(Fe@1000K)} =$$

$$\text{MU0(Fe@1000K)} + \text{'ex-contribution(Fe)'}$$

$$= -42277.8$$

$$\rightarrow \text{MU(C)} = \text{MU(C@1000K)} = -33218.3$$

$$\text{AC(C)} = \exp[\text{MU(C)}/\text{RT}] = 0.0184$$

$$\begin{aligned}\text{MUR(C)} &= \text{MU(C@1000K)} - \text{MU0(C)}@298.15 \\ &= (-33218.3) - (-1711.5) = -31506.7\end{aligned}$$

$$\text{ACR(C)} = \exp[\text{MUR(C)}/\text{RT}] = 0.02261$$

$$\rightarrow \text{MU(Cr)} = \text{MU(Cr@1000K)} = -55129.9$$

$$\text{AC(Cr)} = \exp[\text{MU(Cr)}/\text{RT}] = 0.00132$$

$$\begin{aligned}\text{MUR(Cr)} &= \text{MU(Cr@1000K)} - \text{MU0(Cr)}@298.15 \\ &= (-55129.9) - (-7019.1) = -48110.8\end{aligned}$$

$$\text{ACR(Cr)} = \exp[\text{MUR(Cr)}/\text{RT}] = 0.00307$$

$$\rightarrow \text{MU(Fe)} = \text{MU(Fe@1000K)} = -42503.4$$

$$\text{AC(Fe)} = \exp[\text{MU(Fe)}/\text{RT}] = 0.00602$$

$$\text{MUR(Fe)} = \text{MU(Fe@1000K)} - \text{MU}^0(\text{Fe})_{298.15}$$

$$= (-42503.4) - (-8132.1) = -34370.7$$

$$\text{ACR(Fe)} = \exp[\text{MUR(Fe)}/\text{RT}] = 0.01602$$

### 几个关于参考态的典型问题

**问题：**为什么我设定参考态为某温度在的气相时和使用“show acr (o,gas)”命令时，会得到不同的活度？当我比较气体的活度和固体的活度时，我应该使用什么样的参考状态才能比较相同类型的数值？

如果对于一个气体体系(H,N,O,C)，把 O 的参考状态设为“gas”，然后我得到一个活度，但是如果我使用“show acr (o,gas)”命令，我将得到另一个活度值，它等于 O（而不是 O<sub>2</sub>）的分压。H 和 N 也有相同的情况。所以使用“set ref state”与在“show”命令中指定参考状态到底有什么不同？

**解释：**

正如上面描述的，这里有两个活度的概念（AC/ACR-参考/不参考定义的参考状态）：

☞ 对于体系的组元：AC(comp) and ACR(comp)

*e.g.*, AC(O) and ACR(O)

AC(O<sub>2</sub>) and ACR(O<sub>2</sub>) (如果 O<sub>2</sub> 设定为体系的一个组元)

☞ 对于 species (相组成)：AC(sp,ph)=ACR(sp,ph)

*e.g.*, AC(O,GAS)=ACR(O,GAS),

AC(O<sub>2</sub>,GAS)=ACR(O<sub>2</sub>,GAS)

AC(O<sub>2</sub>,AQ)=ACR(O<sub>2</sub>,AQ)

通常，ACR (O) 和 ACR (O, GAS) 是不同的，因为它们有完全不同的意义，它们之间的差别可以使它们的大小相差许多数量级。因为在 SSUB3 中理想 EOS 和理想混合模型是为 GAS 相使用的，ACR (O, GAS) 总是等于 y(O, GAS)这个量。

（例如在 He-O-H-C-N+Me 体系中）为体系的组元 O, H 和 N 设定参考状态的正确方法通常是：

S-R-S O GAS \* 101325

S-R-S H GAS \* 101325

S-R-S N GAS \* 101325

如果石墨（或 C<sub>S</sub>）存在一个已知体系中，组元 C 的参考状态通常这样定义：

S-R-S C GRA \* 101325

注意，为了方便和简化起见，通常设定常压强为  $10^5$  Pascal (即 1 bar)，而不是 101325 Pascal (1 atm)。

此外，对于一个确定体系来说 AC (O) 是唯一的，而 GAS 相的 O 的 ACR(sp, ph) 不同于合金相中 O 的 ACR(sp, ph)。请注意，对于稍不止一个亚点阵的合金溶体相，如定义为 (Fe, Cr, O)<sub>1</sub>(C, N, Va)<sub>1</sub> 的 FCC\_Al，是不可能计算 ACR(O, FCC) 的。

如果你想研究金属合金或其它固体相中气体吸收或放出的趋势，你可以先计算只含有气相的混合物和（不包含气相）的金属合金/固体相的 ACR (O)，各自独立进行计算但为 (O, H 和 N) 设定相同的参考态，然后，通过比较两种情况下的 ACR (O) 值，你就可以判断吸收或放出的趋势。在这样一个环境下，如果另一个平衡计算包含了所有的组元，气相与合金/固体相不一定处于平衡（如下所述）。

另一种情况就像 TCC 例 11 和 32 演示的那样，即一个体系中包含气体混合物和合金/固体相。在这种清理下，计算是在合并体系完全平衡状态下进行（气体混合物可能稳定也可能不稳定地与体系中所考虑的合金/固体相存在）。

TCC example 11(H-O 气体混合物中 Cu<sub>2</sub>S 的氧化)是一个平衡计算：合理输入 H 和 O 的量（及它们的比例）来防止 Cu<sub>2</sub>S 氧化生成 Cu<sub>2</sub>O。这个计算只是要显示 H 和 O 的量（及它们的比例）。但如果已设定它们的参考状态（如上所述），你就可以列出 ACR (O) 和 ACR (H)，以及 ACR (O, GAS)，和 ACR (H, GAS)，它们分别与两个不同的平衡相关（一个是 Cu<sub>2</sub>O 已经生成，另一个是 Cu<sub>2</sub>O 开始形成）的，以便你可以理解体系中氧化还原反应的条件。

TCC Example 32 和 Example 11 相似，但是前者是为了计算钢铁表层形成 Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 和其它氧化物的 ACR (O, GAS) 和 ACR (O<sub>2</sub>, GAS) 条件，（即气体混合物中 O 和 O<sub>2</sub> 的分压）。计算是在设定体组元 O 的参考状态为常压 1 bar 和当前温度下的 GAS 相后进行的。如上所示，这样一个计算并不一定要求 GAS 混合物在体系中稳定存在，因为我们只对了解气氛（由所考察的气体 species 加上 He 这样的惰性气体组成的）中的 O（和 O<sub>2</sub>）的分压感兴趣，而它和整个体系的 ACR (O) 有关（同时控制着气体混合物和合金/固体相中 O 的行为）。



## 各模块中 Thermo-Calc 命令的索引

| 模块命令                    | 简要说明                                                                              | 模块      | 页码 |
|-------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------|---------|----|
| ADD_COMMENT             | 添加/修正/删除参数或其它系数的说明                                                                | GES     |    |
| ADD_INITIAL_EQUILIBRIUM | 添加 mapping 的初始平衡点。                                                                | POLY    |    |
| ADD_LABEL_TEXT          | 在当前图形的特定坐标处添加文字。你也可以通过在特定坐标处计算一个平衡，然后再标出稳定相的名称来让程序自动地添加文字                         | POST    |    |
| AMEND_ELEMENT_DATA      | 改变某个元素的数据。                                                                        | GES     |    |
| AMEND_PARAMETER         | 改变某个参数的温度-压强函数。                                                                   | GES     |    |
|                         |                                                                                   | PARROT  |    |
| AMEND_PHASE_DESCRIPTION | 当某个相存在溶解度间隙、专门的超额模型或吉布斯能有特殊的附加的贡献时，该命令用以具体指定某个相的描述                                | GES     |    |
| AMEND_RECORD            | 修正一些已经创建，但尚未实现                                                                    | REACTOR |    |
| AMEND_SELECTION         | 改变预定义的体系（DEFINE_ELEMENTS or DEFINE_SPECIES or DEFINE_SYSTEM 命令所定义的元素或 species 或体系 | TDB     |    |
| AMEND_STORED_EQUILIBRIA | 在 STEP 或 MAP 命令之后给出计算部分的信息，这样部分冗余或已计算的亚稳平衡可以被剔除                                   | POLY    |    |
| AMEND_SYMBOL            | 在当前温度和压强下计算（通过数据库所预定义的或使用 ENTER_SYMBOL 命令事先输入的）某一函数或表格的值，也可以修改变量或函数的定义            | GES     |    |

|                          |                                                                               |         |  |
|--------------------------|-------------------------------------------------------------------------------|---------|--|
| APPEND_DATABASE          | 从一个文件或其它数据库提出数据，增加到已经从另一个数据库读取的数据中                                            | TDB     |  |
| APPEND_EXPERIMENTAL_DATA | 将一个 EXP 文件（一个按照 DATAPLOT 绘画语言的语法准备的文件，用以存贮实验数据和文字）中的信息附加给当前相图                 | POST    |  |
| BACK                     | 返回最近的模块。<br><br>（注意：从 POST 模块，一般返回 POLY 或 TAB 模块；从 ED-EXP 模块，一般返回 PARROT 模块）。 | SYS     |  |
|                          |                                                                               | TDB     |  |
|                          |                                                                               | GES     |  |
|                          |                                                                               | TAB     |  |
|                          |                                                                               | POLY    |  |
|                          |                                                                               | POST    |  |
|                          |                                                                               | PARROT  |  |
|                          |                                                                               | ED-EXP  |  |
|                          |                                                                               | REACTOR |  |
| CHANGE_STATUS            | 改变某一相、组元（元素）或 species 的状态。                                                    | GES     |  |
|                          |                                                                               | POLY    |  |
|                          |                                                                               | ED-EXP  |  |
| CLOSE_FILE               | 关闭一个用 OPEN_FILE 命令程序事先打开的单元数。                                                 | SYS     |  |

|                        |                                                                                                                                                                    |         |  |
|------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|--|
| COMMENT                | 为一个新创建的平衡（实验）数据点或表格（只在 POP 或 DOP 文件中才能使用）中给出的一系列点写出简要的注释或描述                                                                                                        | ED-EXP  |  |
| COMPILE_EXPERIMENTS    | 使用当前的 SETUP 文件，开始编译保存在 POP 文件上的所有实验平衡数据                                                                                                                            | PARROT  |  |
| COMPUTE_ALL_EQUILIBRIA | 计算从当前到最后实验点的所有平衡                                                                                                                                                   | ED-EXP  |  |
| COMPUTE_EQUILIBRIUM    | 计算当前平衡。                                                                                                                                                            | POLY    |  |
|                        |                                                                                                                                                                    | ED-EXP  |  |
| COMPUTE_TRANSITION     | 作为 CHANGE_STATUS 和 SET_CONDITION 命令的一个合并，当改变一个条件某个相就会形成时，它允许直接进行计算                                                                                                 | POLY    |  |
| CONTINUE_OPTIMIZATION  | 继续使用相同的 Hessian 矩阵进行最优化过程                                                                                                                                          | PARROT  |  |
| CREATE_3D_PLOTFILE     | 自动地将（从当前或最初以前的 MAP/STEP 计算中提取的，表达或保存在特定表格或*.TAB 文件中的）所有的默认或预定义的图形信息和所选数据点转变为一个合理的格式，创建一个 *.WRL(Virtual Reality Markup Language) 文件，以便 VRML 浏览器如 Web 浏览器的插件或独立程序来浏览 | POST    |  |
| CREATE_DIVIDERS        | 定义 Segment 的边界，以及怎样在 Segment 间分派相和分配热与质量的方法                                                                                                                        | REACTOR |  |
| CREATE_NEW_EQUILIBRIUM | 用一套不同的条件和相来创建一个新的平衡（但通常具有一套相同的组元）                                                                                                                                  | POLY    |  |
|                        |                                                                                                                                                                    | ED-EXP  |  |
| CREATE_NEW_STORE_FILE  | 创建一个 PAR 文件来保存 GES, POLY 和 PARROT 模块使用的工作空间                                                                                                                        | PARROT  |  |

|                            |                                                                              |         |  |
|----------------------------|------------------------------------------------------------------------------|---------|--|
| CREATE_PIPES               | 定义不同图块间的通道，和在反应器与环境间、反应器的不同 segments 间、以及不同 dividers 间的质量与热怎样交换的方式           | REACTOR |  |
| CREATE_PROBE               | 创建探测器，但还没实现                                                                  | REACTOR |  |
| CREATE_STAGE_BOXES         | 创建几个反应阶段作为 boxes（线段），必须具体指定其中的质量的输入和初始温度或从环境中热量的输入，以及每个 segment 中的质量的输出和初始温度 | REACTOR |  |
| DATABASE_INFORMATION       | 显示当前数据库的简要描述（包括所含的体系，使用的模块，温度、成分、主要应用等参数的有效范围等方面的信息）                         | TDB     |  |
| DEFINE_COMPONENTS          | 定义当前体系中的组元                                                                   | POLY    |  |
|                            |                                                                              | ED-EXP  |  |
| DEFINE_ELEMENT             | 定义体系的元素                                                                      | TDB     |  |
| DEFINE_DIAGRAM             | 作为 DEFINE_MATERIAL 命令的一个扩展，它允许自动计算和绘制相图                                      | POLY    |  |
| DEFINE_MATERIAL            | 从一个数据库中读取一个体系，设定成分和温度（压强等于 1 bar）然后计算平衡                                      | POLY    |  |
| DEFINE_SPECIES             | 用 species 定义体系。                                                              | TDB     |  |
| DEFINE_SYSTEM              | 用元素或者 species 来定义体系，取决于当前数据库关键字的默认值                                          | TDB     |  |
| DELETE                     | 尚未实现                                                                         | GES     |  |
| DELETE_INITIAL_EQUILIBRIUM | 在 MAP 和 STEP 命令之前删除所有或一些特定的初始平衡。                                             | POLY    |  |
| DELETE_SYMBOL              | 删除(通过 ENTER_SYMBOL 命令输入的常数，                                                  | POLY    |  |

|                        |                                                                   |        |  |
|------------------------|-------------------------------------------------------------------|--------|--|
|                        | 变量，函数或表格等）符号                                                      | ED-EXP |  |
| DUMP_DIAGRAM           | 与 PRINT_DIAGRAM 命令相似，将当前相图以具体的绘画格式、但以平均质量快速保存到一个文件                | POST   |  |
| EDIT_EXPERIMENTS       | 转换到子模块，以编辑实验平衡，即 ED_EXP 模块                                        | PARROT |  |
| ENTER_FUNCTION         | 在表格式输出的第六列定义一个新的热力学函数                                             | TAB    |  |
| ENTER_ELEMENT          | 向当前体系添加元素                                                         | GES    |  |
| ENTER_PARAMETER        | 输入某个相的某个参数的 TP 函数                                                 | GES    |  |
|                        |                                                                   | PARROT |  |
| ENTER_PHASE            | 向当前体系输入某个相（指定相的类型、亚点阵、组成等）                                        | GES    |  |
| ENTER_REACTION         | 与 TABULATE_REACTION 命令相同，将反应的热力学性质的变化绘制成表格或相图或以实验文件保存（扩展名为 EXP）   | TAB    |  |
| ENTER_SPECIES          | 向当前体系输入由已输入的元素组成的 species                                         | GES    |  |
| ENTER_SYMBOL           | 将方便用户使用的量（常数，变量，函数或表格等）定义为符号                                      | GES    |  |
|                        |                                                                   | POLY   |  |
|                        |                                                                   | POST   |  |
|                        |                                                                   | ED-EXP |  |
| EVALUATE_FUNCTIONS     | 估计并列出一个或多个或所有已输入的函数或变量的值                                          | POLY   |  |
|                        |                                                                   | ED-EXP |  |
| EXECUTE_UNUSED_SPECIES | 从 species 的清单上排除没有输入到当前定义的相中的 species，以便保存程序工作空间（TCCN 以来的版本都不能使用） | TDB    |  |

|                       |                                                                                           |         |  |
|-----------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------|---------|--|
| EXECUTE_POLY3_COMMAND | 提示在 PEACTOR 模块中直接利用各种类型的 POLY 命令                                                          | REACTOR |  |
| EXIT                  | 终止程序然后返回操作系统，除非（在各模块中）使用 SAVE 命令进行了保存，否则所有的数据库或结果都将丢失                                     | SYS     |  |
|                       |                                                                                           | TDB     |  |
|                       |                                                                                           | GES     |  |
|                       |                                                                                           | TAB     |  |
|                       |                                                                                           | POLY    |  |
|                       |                                                                                           | POST    |  |
|                       |                                                                                           | PARROT  |  |
|                       |                                                                                           | REACTOR |  |
|                       |                                                                                           |         |  |
|                       |                                                                                           |         |  |
|                       |                                                                                           |         |  |
|                       |                                                                                           |         |  |
|                       |                                                                                           |         |  |
|                       |                                                                                           |         |  |
| EXPERIMENT            | 改变实验数据的值或准确度或添加更多的实验信息                                                                    | ED-EXP  |  |
| EXPORT                | 在 PARROT 工作空间将由平衡计算的值输出为优化变量（一个 V 变量）                                                     | ED-EXP  |  |
| FLUSH_BUFFER          | 终止当前块，将它保存到一个工作文件中并开始一个新的块（只能使用于 POP 或 DOP 文件中）                                           | ED-EXP  |  |
| GET_DATA              | 从当前数据库提取关于所定义的体系的所有信息，并输入规定体系的元素、species、相、以及从首次打开或随后添加的数据库中获得的相关参数到 GES5 和/或 DICTRA 工作空间 | TDB     |  |
| GOTO_MODULE           | 在各模块间切换                                                                                   | SYS     |  |
|                       |                                                                                           | TDB     |  |
|                       |                                                                                           | GES     |  |
|                       |                                                                                           | TAB     |  |
|                       |                                                                                           | POLY    |  |

|               |                                                     |         |  |
|---------------|-----------------------------------------------------|---------|--|
|               |                                                     | PARROT  |  |
|               |                                                     | REACTOR |  |
| GRAPHICS_PLOT | 与 STEP_WITH_OPTIONS 命令等价，它基于当前选定的平衡点进行一个 STEPING 计算 | ED-EXP  |  |
| HELP          | 列出可用的命令或给出当前模块中的某一具体命令的说明                           | SYS     |  |
|               |                                                     | TDB     |  |
|               |                                                     | GES     |  |
|               |                                                     | TAB     |  |
|               |                                                     | POLY    |  |
|               |                                                     | POST    |  |
|               |                                                     | PARROT  |  |
|               |                                                     | ED-EXP  |  |
|               |                                                     | REACTOR |  |
|               |                                                     |         |  |
| HP_CALCULATOR | 使用 reverse polish 符号打开 QBA 简单交互计算器                  | SYS     |  |
| IMPORT        | 将一个最优变量的值转变为常数（与 EXPORT 命令相反）                       | ED-EXP  |  |
| INFORMATION   | 给出当前模块中不同主题的基本信息                                    | SYS     |  |
|               |                                                     | TDB     |  |
|               |                                                     | GES     |  |
|               |                                                     | POLY    |  |
|               |                                                     | PARROT  |  |
|               |                                                     | ED-EXP  |  |



|                     |                                                                                                                                             |         |  |
|---------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|--|
|                     |                                                                                                                                             | REACTOR |  |
| LABEL_DATA          | 给实验的平衡点添加一个标记，单个点、或单独给出或在表格中给出的几个点                                                                                                          | ED-EXP  |  |
| LIST_ALL_EQUILIBRIA | 列出从当前到最后所有平衡点的详细计算信息                                                                                                                        | ED-EXP  |  |
| LIST_ALL_VARIABLES  | 在屏幕上或文本文档中列出 PARROT 工作空间中的所有变量的值和状态                                                                                                         | PARROT  |  |
| LIST_AXIS_VARIABLE  | 列出由 SET_AXIS_VARIABLE 命令设定的所有轴                                                                                                              | POLY    |  |
| LIST_CONDITIONS     | 列出由命令 SET_CONDITION 和命令序列 CHANGE_STATUS PHASE...=FIX 0 或 1 设定的所有条件                                                                          | POLY    |  |
|                     |                                                                                                                                             | ED-EXP  |  |
|                     | 在屏幕上或文本文件（它可以由文本编辑器打开和编辑）中列出所输出的当前值和优化条件                                                                                                    | PARROT  |  |
| LIST_CONSTITUTION   | 在屏幕上列出所定义的体系中的所有相的所有组成（以位置分数）                                                                                                               | GES     |  |
| LIST_DATA           | 在输出文件中或屏幕上以易读的方式列出体系的所有数据                                                                                                                   | GES     |  |
| LIST_DATA_TABLE     | 列出随独立变量（即一个性质图上的 X 轴）变化的各种量（即一个性质图中的 Y 轴变量），这些变量已经在 STEP 计算后在 POST 模块中进行了定义。列出的输出结果可以显示在屏幕上或以 MS Excel 的格式（以用户指定的文件名、以默认的后缀名 XLS）保存在电子表格文件中 | POST    |  |
| LIST_DATABASE       | 列出当前数据库的所有元素，species，相或相组成                                                                                                                  | TDB     |  |
| LIST_DESIGN         | 列出设计者的详细的设计信息，但尚未实现                                                                                                                         | REACTOR |  |

|                             |                                                  |         |  |
|-----------------------------|--------------------------------------------------|---------|--|
|                             |                                                  | R       |  |
| LIST_EQUILIBRIUM            | 列出最后计算的平衡的结果                                     | POLY    |  |
|                             |                                                  | ED-EXP  |  |
| LIST_INITIAL_EQUILIBRIA     | 列出由 ADD-INITIAL-EQUILIBRIUM 命令添加的所有初始平衡          | POLY    |  |
| LIST_PARAMETER              | 在屏幕上列出某个相的某个参数的 TP 函数                            | GES     |  |
|                             |                                                  | PARROT  |  |
| LIST_PHASE_DATA             | 在屏幕上以易读的方式列出某个相的所有数据                             | GES     |  |
|                             |                                                  | PARROT  |  |
| LIST_PLOT_SETTINGS          | 列出大多数参数的当前值，以指明将要绘制的相图类型                         | POST    |  |
| LIST_RECORDS                | 列出反应器的所有已创建记录（包括 stage boxes, dividers, pipes 等） | REACTOR |  |
| LIST_RESULT                 | 在屏幕上或特定文件中列出当前优化的结果                              | PARROT  |  |
| LIST_STATUS                 | 列出组元、species 和/或相的状态                             | GES     |  |
|                             |                                                  | POLY    |  |
|                             |                                                  | ED-EXP  |  |
| LIST_STORE_FILE             | 在屏幕上写出保存文件的名称和其完整路径                              | PARROT  |  |
| LIST_SUBSTANCE              | 用一套组元列出当前数据库中的所有 species                         | TAB     |  |
| LIST_SYMBOL<br>LIST_SYMBOLS | 列出某个或所有定义的常数、函数、变量和表格的定义                         | GES     |  |
|                             |                                                  | POLY    |  |
|                             |                                                  | POST    |  |
|                             |                                                  | ED-EXP  |  |
| LIST_SYMBOL_IN_GES          | 在屏幕上列出体系中相的模型参数的 TP 函数                           | PARROT  |  |
| LIST_SYSTEM                 | 列出所定义的体系中的所有元素、species、相或                        | TDB     |  |

|                            |                                                                                                                  |        |  |
|----------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|--|
|                            | 相组成                                                                                                              |        |  |
| LOAD_INITIAL_EQUILIBRIUM   | 把事先添加的初始平衡的所有条件和计算结果复制到当前平衡，当前条件和结果将丢失                                                                           | POLY   |  |
| MACRO_FILE_OPEN            | 打开一个宏文件，宏文件预规定一个命令序列、然后再运行这些命令。MACRO 必须用 EXIT 来终止，在 SYS, GES, POLY, PARROT 或 POST 模块中也可以使用 SET-INTERACTIVE 命令来终止 | SYS    |  |
|                            |                                                                                                                  | TAB    |  |
|                            |                                                                                                                  | POLY   |  |
|                            |                                                                                                                  | PARROT |  |
| MAKE_EXPERIMENTAL_DATAFILE | 将绘图信息写在屏幕上或使用按照数据绘制格式输出为一个 EXP 文件                                                                                | POST   |  |
| MAKE_POP_FILE              | 将交互式产生的实验信息的变化与添加写入一个新的 POP/DOP 文件，若写入一个旧的 POP/DOP 文件，将覆盖以前的数据                                                   | ED-EXP |  |
| MAP                        | 从一个或多个初始平衡开始 Map 一个相图                                                                                            | POLY   |  |
| MERGE_WITH_DATABASE        | 从一个文件或其它的数据库中提取数据，并合并到从另一数据库读取的当前数据中（从 TCCP 开始就没有这项功能）                                                           | TDB    |  |
| MODIFY_LABEL_TEXT          | 将由 ADD_LABEL 命令创建的标记移动到另一个位置，或以其他文字来替换现有文字                                                                       | POST   |  |
| NEW_DIRECTORY_FILE         | 打开一个由本地数据库管理者或用户产生的新的数据库初始文件(或称为数据库引导文件),以便使用在原始数据库初始文件中没有预定义的附加数据库                                              | TDB    |  |
| OPEN_FILE                  | 当 a unit number 必须时,具体指定将要打开的文本文件，以便在其它命令中使用                                                                     | SYS    |  |
| OPTIMIZE_VARIABLES         | 执行变量的优化。所有优化所需要的体系中定义的数据将会从当前 PAR 工作文件中读取。优                                                                      | PARROT |  |

|                          |                                                                                                                       |             |  |
|--------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------|--|
|                          | 化的结果将会自动保存在当前工作文件上                                                                                                    |             |  |
| PATCH<br>PATCH_WORKSPACE | 该命令只适合那些真正懂得的专家，从 TCCR 开始已再 SYS 模块中去除了该名临                                                                             | TAB         |  |
|                          |                                                                                                                       | GES         |  |
|                          |                                                                                                                       | PLOY        |  |
|                          |                                                                                                                       | POST        |  |
|                          |                                                                                                                       | REACTO<br>R |  |
| PLOT_DIAGRAM             | 使用命令 SET_PLOT_FORMAT、设定绘图格式、在特定图形设备上绘制图形                                                                              | POST        |  |
| POST                     | 转换到后处理器、即 POST 模块                                                                                                     | POLY        |  |
| PRINT_DIAGRAM            | 在连接的打印机上高质量直接打印当前相图                                                                                                   | POST        |  |
| QUICK_EXPERIMENTAL_PLOT  | 与 APPEND_EXPERIMENTAL_DATA 命令相似，但它可以在 POLY 工作空间中没有要绘图信息时使用。它定义了两个轴，把轴标设为 X 和 Y，除非 EXP 文件的序中做了规定，X 和 Y 轴的范围为 0.0 到 1.0 | POST        |  |
| READ_WORKSPACE(S)        | 从（事先通过 SAVE_WORKSPACES 命令保存的）与模块相关的、特定格式的文件中读取工作空间                                                                    | POLY        |  |
|                          |                                                                                                                       | ED-EXP      |  |
|                          |                                                                                                                       | REACTO<br>R |  |
| READ_GES_WORKSPACE       | 从事先通过 SAVE_GES_WORKSPACES 命令保存的 GES 文件中读取 GES 工作空间                                                                    | GES         |  |
| READ_PARROT_WORKSPACES   | 从事先通过 SAVE_PARROT_WORKSPACES 命令保存的*.PAR 文件中读取 PARROT 工作空间                                                             | PARROT      |  |

|                          |                                                                  |         |  |
|--------------------------|------------------------------------------------------------------|---------|--|
| RECOVER_START_VALUES     | 恢复平衡计算的初始值                                                       | POLY    |  |
| RECOVER_VARIABLES        | 恢复所有变量的初始值                                                       | PARROT  |  |
| REINITIATE               | 初始化当前模块，使之回到它最初输入的状态。                                            | GES     |  |
| REINITIATE_MODULE        | 与模块相关的工作空间中的所有数据都将删除，所有变量都将初始化为它们的默认值                            | POLY    |  |
|                          |                                                                  | PARROT  |  |
|                          |                                                                  | ED-EXP  |  |
| REINITIATE_PLOT_SETTINGS | 定义用默认值描述一个相图的所有参数                                                | POST    |  |
| REJECT                   | 排除由已定义的元素和 species 组成的所有元素、species、相或相组成                         | TDB     |  |
| RESCALE_VARIABLES        | 为进一步最佳化，将所有参数的当前值赋给它们作为起始值和缩放因子                                  | PARROT  |  |
| RESTORE                  | 恢复已明确排除的元素、species、相或相组成，但它不能恢复一个已完全排除的体系                        | TDB     |  |
| RESTORE_ALL_WEIGHTS      | 恢复某个(事先通过 STORE_ALL_WEIGHTS 命令保存的)权重设定，将以前使用的权重赋给当前数据块中所有的不同的实验点 | ED-EXP  |  |
| RESTORE_PHASE_IN_PLOT    | 恢复通过 SUSPEND_PHASE_IN_PLOT 命令从标绘图中排除的相                           | POST    |  |
| SAVE_WORKSPACE(S)        | 将当前状态和与模块相关的程序工作空间保存在特定格式的文件上                                    | POLY    |  |
|                          |                                                                  | ED-EXP  |  |
|                          |                                                                  | REACTOR |  |
| SAVE_GES_WORKSPACE       | 将当前状态和 GES 程序工作空间保存到一个 GES 文件里                                   | GES     |  |
| SAVE_PARROT_WORKSPACE    | 将当前状态和程序的 PARROT 工作空间保存到                                         | PARROT  |  |

|                              |                                                                         |        |  |
|------------------------------|-------------------------------------------------------------------------|--------|--|
| ES                           | PAR 文件中                                                                 |        |  |
| SELECT_EQUILIBRIUM           | 在事先创建的初始平衡间切换                                                           | POLY   |  |
|                              |                                                                         | ED-EXP |  |
| SET_ALL_START_VALUES         | 设定所有必须的初始值,如温度,压强和各个相<br>(应该是稳定的) 以及相组成                                 | POLY   |  |
|                              |                                                                         | ED-EXP |  |
| SET_ALTERNATE_MODE           | 打开和关闭交互模式                                                               | PARROT |  |
| SET_ALTERNATE_CONDITION      | 当在 PARROT 模块中打开交互模式时, 具体指定交互式的条件。该命令的句法几乎与 SET_CONDITION 命令相同, 但要指定不准确度 | ED-EXP |  |
| SET_AUTO_APPEND_DATA<br>BASE | 决定自动从其它数据库中添加数据 (到含有当前数据库中的数据的已定义的体系中)                                  | TDB    |  |
| SET_AXIS_LENGTH              | 将某个轴的真实长度的刻度设为英寸                                                        | POST   |  |
| SET_AXIS_PLOT_STATUS         | 指定是否要在相图上绘制轴标题文本和轴标识文本                                                  | POST   |  |
| SET_AXIS_TEXT_STATUS         | 将某轴的文本改为轴的自动说明文本或用户给出的文本                                                | POST   |  |
| SET_AXIS_TYPE                | 改变某轴的类型: 线性的、对数的和反转                                                     | POST   |  |
| SET_AXIS_VARIABLE            | 设定计算(STEP 或 MAP)相图的轴                                                    | POLY   |  |
| SET_COLOR                    | 在相图上为某些类型的信息选择不同的颜色或线的类型                                                | POST   |  |
| SET_COMMAND_UNITS            | 设定输入的单元数(为读取由文件编辑器准备好的输入文件)和输出的单元数(为返回输出)                               | SYS    |  |
| SET_CONDITION                | 指定当前平衡计算的一个或几个平衡条件, 或将它们重新设定为新值                                         | POLY   |  |
|                              |                                                                         | ED-EXP |  |

|                          |                                                         |        |  |
|--------------------------|---------------------------------------------------------|--------|--|
| SET_CORNER_TEXT          | 在绘制的相图角落里写上文字(通常作为副标题)                                  | POST   |  |
| SET_DIAGRAM_AXIS         | 指定绘图或列表的轴变量                                             | POST   |  |
| SET_DIAGRAM_TYPE         | 选择图象类型如垂直图或三角图(吉布斯三角形, 尤其对于三元系)                         | POST   |  |
| SET_ENERGY_UNIT          | 在当前计算操作的所有相继输出中(表格, 图形和文件), 设定能量单位为卡或焦耳                 | TAB    |  |
| SET_FIX_VARIABLE         | 将在最佳化时被作为常数考虑的变量指定一个固定的值                                | PARROT |  |
| SET_FONT                 | 在当前选择的绘图仪器上绘制相图时选择符号和数字所用的字体                            | POST   |  |
| SET_INPUT_AMOUNTS        | 详细说明一个体系是怎样由各种物质混合而组成的                                  | POLY   |  |
| SET_INTERACTIVE          | 重新设定输入和输出单位为它们的初始值, 即键盘和屏幕。记得把这个添加到宏文件中的最后              | SYS    |  |
| SET_INTERACTIVE_MODE     |                                                         | GES    |  |
|                          |                                                         | TAB    |  |
|                          |                                                         | POLY   |  |
|                          |                                                         | POST   |  |
|                          |                                                         | PARROT |  |
| SET_LABEL_CURVE_OPTION   | 用阿拉伯数字标识曲线,并在图旁列出这些阿拉伯数字的含义                             | POST   |  |
| SET_LOG_FILE             | 将用户输入到 TCC 软件中的所有东西保存到一个可编辑为宏文件的简单文本文档中                 | SYS    |  |
| SET_MINIMIZATION_OPTIONS | 决定是否选择调节 Global Minimization 的设定和调节正常的 POLY 优化惯例(一般的计算) | POLY   |  |
| SET_NUMERICAL_LIMITS     | 改变收敛的标准.                                                | POLY   |  |



|                          |                                                                                  |        |  |
|--------------------------|----------------------------------------------------------------------------------|--------|--|
|                          |                                                                                  | ED-EXP |  |
| SET_OPTIMIZING_CONDITION | 详细说明优化条件                                                                         | PARROT |  |
| SET_OPTIMIZING_VARIABLE  | 详细说明优化时要被估值的变量和它的起始值                                                             | PARROT |  |
| SET_OUTPUT_LEVELS        | 选择优化过程中、和列出结果时 PARROT 模块应该给出的信息的类型                                               | PARROT |  |
| SET_PLOT_ENVIRONMENT     | 设定绘图设备                                                                           | SYS    |  |
| SET_PLOT_FORMAT          | 设定不同绘图设备的绘图输出格式                                                                  | POST   |  |
|                          |                                                                                  | TAB    |  |
| SET_PLOT_OPTION          | 打开(Y)或关闭(N)已绘图一些选项                                                               | POST   |  |
| SET_PLOT_SIZE            | 通过详细说明绘图的整体尺寸来改变图形的大小(作为一个相对的比例因子), 注意所绘相图的真实大小取决于用户通过 SET_PLOT_FORMAT 命令所选的输出设备 | POST   |  |
| SET_PREFIX_SCALLING      | 设定作为某个轴的幂指数的前缀比例                                                                 | POST   |  |
| SET_R_AND_P_NORM         | 为解释能量和压强单位, 改变气体常量 R 和压强 1 bar(P)的默认值                                            | GES    |  |
| SET_RASTER_STATUS        | 选择在当前相图中绘制一个光栅(即在两轴方向上加上格子线)                                                     | POST   |  |
| SET_REFERENCE_STATE      | 如果所用数据库的默认参考状态不合适, 就为成分设定参考状态(指的是被选定的相, 温度和压强).                                  | POLY   |  |
|                          |                                                                                  | POST   |  |
|                          |                                                                                  | ED-EXP |  |
| SET_SCALING_STATUS       | 设定某个特定轴变量的比例状态是自动的或手动的, 对于手动的, 必须给出最大值和最小值                                       | POST   |  |
| SET_SCALED_VARIABLE      | 与 SET_OPTIMIZING_VARIABLE 命令相似,                                                  | PARROT |  |

|                         |                                                              |         |  |
|-------------------------|--------------------------------------------------------------|---------|--|
|                         | 指定某优化变量的起始值，但它一次只对一个优化变量起作用，指定变量的最小值和最大值                     |         |  |
| SET_START_CONSTITUTION  | 为单个相的组成设定初始值                                                 | POLY    |  |
|                         |                                                              | ED-EXP  |  |
| SET_START_VALUE         | 为单个变量设定起始值                                                   | POLY    |  |
|                         |                                                              | ED-EXP  |  |
| SET_STORE_FILE          | 指定一个被用来编辑和优化的储存文件(事先由 CREATE_NEW_STORE_FILE 命令产生一个 PAR 工作文件) | PARROT  |  |
| SET_TERMINAL            | 规定终端的特征                                                      | SYS     |  |
| SET_TIC_TYPE            | 改变轴的刻度线的绘制(轴上刻度线的放置，如：放在图框内部、外部或不使用刻度线)                      | POST    |  |
| SET_TIELINE_STATUS      | 如果计算平面存在共厄线的话，选择在两相区域绘制共厄线                                   | POST    |  |
| SET_TITLE               | 指定一个标题，让它出现在当前运行的 Thermo-Calc 的 POST 模块中列出的所有表格和绘制的所有相图中     | POST    |  |
| SET_TRUE_MANUAL_SCALING | 打开或关闭某个轴的手动调节比例选项                                            | POST    |  |
| SET_WEIGHT              | 改变实验和计算值之间的偏差对单个实验点或一系列平衡的误差的贡献的权重                           | ED-EXP  |  |
| SHOW_PROBE              | 显示所创造的探针的详细信息，但尚未实现                                          | REACTOR |  |
| SHOW_VALUE              | 在屏幕上显示任何状态变量、函数或变量的当前值                                       | POLY    |  |
|                         |                                                              | ED-EXP  |  |
| SPECIAL_OPTIONS         | 为当前体系和计算设定特定选择                                               | POLY    |  |

|                                         |                                                                                    |         |  |
|-----------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------|---------|--|
|                                         |                                                                                    | ED-EXP  |  |
| START_SIMULATION                        | 开启反应器模拟，并列出所有迭代过程的结果                                                               | REACTOR |  |
| STEP_WITH_OPTIONS                       | 用特定的选项初始化 stepping 程序                                                              | POLY    |  |
| STOP_ON_ERROR                           | 定义阻止错误命令的序列引起电脑资源的浪费：要么在一个非法的或不明确的命令之后终止(ON)，要么重新设定这样一个命令的影响(OFF)。                 | SYS     |  |
| STORE_ALL_WEIGHTS                       | 保存一个新的权重设定，它是从评估过程中当前选定的实验数据块中读取的、为所有不同实验点指定的权重的当前状态                               | ED-EXP  |  |
| SWITCH_DATABASE                         | 从当前数据库转换到一个新的数据库，重新初始化整个 TDB 模块以定义一个体系（或初始化整个 TAB 模块以定义一个物质或反应）和 GES5 工作空间以储存取回的数据 | TDB     |  |
|                                         |                                                                                    | TAB     |  |
| SUSPEND_PHASE_IN_PLOT                   | 指定与某相的出现相关的线条不被绘制到相图中                                                              | POST    |  |
| TABLE_HEAD<br>TABLE_VALUES<br>TABLE_END | 在一个表格中输入许多相同类型的实验测量。这些命令总是同时并且按一定的顺序使用（只用在 POP 或 DOP 文件中）                          | ED-EXP  |  |
| TABULATE                                | 给出一个用 STEP 命令计算的平衡中的值的表格                                                           | POLY    |  |
|                                         |                                                                                    | POST    |  |
| TABULATE_DERIVATIVES                    | 自动计算一个给定成分的相的所有偏量。主要是为了调试体系的目的。                                                    | TAB     |  |
| TABULATE_REACTION                       | 将一个化学反应的热力学性质变化制成表格、                                                               | TAB     |  |

|                       |                                                                             |        |  |
|-----------------------|-----------------------------------------------------------------------------|--------|--|
|                       | 或将其中的一个量绘制为温度的曲线图、或作为一个实验数据文件保存（扩展名为 EXP）                                   |        |  |
| TABULATE_SUBSTANCE    | 将一种物质（和固定成分的溶体相相）的热力学数据制成表格、或将其中的一个性质的变化可绘制成与温度相关的曲线图、或作为实验文件保存（扩展名为 EXP 的） | TAB    |  |
| TRANSFER_START_VALUES | 将先前成功计算的平衡的位置分数转移到当前实验点                                                     | ED-EXP |  |
|                       |                                                                             |        |  |

注意：

所有模块命令都可用在一个宏文件中（\*TCM）

某些上面的模块命令可用在与模块相关的文件中(例如：\*.TDB/\*.DAT, \*.SETUP, \*.POP/\*.DOP)。

## 关于各种类型文件中的 Thermo-Calc 命令的索引

| 文件命令             | 简要说明                                            | 后缀名         | 页码 |
|------------------|-------------------------------------------------|-------------|----|
| ADD_CONSTITUENT  | TDB 文件句法：为已含有几种组成的某相添加组成                        | TDB/D<br>AT |    |
| ADD_REFERENCES   | TDB 文件句法：添加更多的参考文献                              | TDB/D<br>AT |    |
| ALLOTROPIC_PHASE | TDB 文件句法：定义一个化合物相（与 COMDOUND_PHASE 关键字相同，但不能将组成 | TDB/D<br>AT |    |

|                       |                                                                 |             |  |
|-----------------------|-----------------------------------------------------------------|-------------|--|
|                       | 输入为 species; 因此它只能在已定义时 species 使用)                             |             |  |
| ASSESSED_SYSTEMS      | TDB 文件句法: 当 TDB、GES 的 POLY 模型使用所估计的值来处理体系时, 该语句用来描述一些特定的选项      | TDB/D<br>AT |  |
| CASE / ENDCASE        | TDB 文件句法: 强制定义采用哪种类型的布尔代数                                       | TDB/D<br>AT |  |
| COMMENT               | POP/DOP 文件句法: 为一个新创建的平衡 (实验) 数据点或表中给出一系列点添加简明的注释或描述性信息。         | POP/DO<br>P |  |
| COMPOUND_PHASE        | TDB 文件句法: 定义一个化合物相 (species 名称和化学式必须相同, 该 species 是该相的唯一的组成)    | TDB/D<br>AT |  |
| CONSTITUENT           | TDB 文件句法: 一个相的组成                                                | TDB/D<br>AT |  |
| DATABASE_INFORMATION  | TDB 文件句法: 定义一个详细描述当前数据库的、可通过 TDB 命令 DATABASE-INFORMATION 列出的文本。 | TDB/D<br>AT |  |
| DEFAULT_COMMAND       | TDB 文件句法: 定义数据库初始化时、可被 TDB 模块执行的默认命令                            | TDB/D<br>AT |  |
| DEFINE_SYSTEM_DEFAULT | TDB 文件句法: 在 TDB 命令 DEFINE-SYSTEM 中定义元素或 species 的默认值            | TDB/D<br>AT |  |
| DIFFUSION             | TDB 文件句法: 指定不采用默认模型时, 将为该项采用何种类型的 DICTRA 扩散模型                   | TDB/D<br>AT |  |
| ELEMENT               | TDB 文件句法: 定义一种元素                                                | TDB/D<br>AT |  |
| FLUSH_BUFFER          | POP/DOP 文件句法: 终止当前块, 将它保存到工作文件中并开始一个新块                          | POP/DO<br>P |  |

|                                             |                                                                                          |             |  |
|---------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------|-------------|--|
| FTP_FILE                                    | TDB 文件句法：指定某个函数的随机文件，它的功能名与记录序号（这些记录名及其函数都保存在这里）相对应。                                     | TDB/D<br>AT |  |
| FUNCTION                                    | TDB 文件句法：定义一个函数。                                                                         | TDB/D<br>AT |  |
| LIST_OF_REFERENCE                           | TDB 文件句法：给出一个直接记录在数据库定义文件中的参考文件列表                                                        | TDB/D<br>AT |  |
| OPTION                                      | TDB 文件句法：定义一个合金（用一个名称，一个主要组元和许多合金元素）                                                     | TDB/D<br>AT |  |
| PARAMETER                                   | TDB 文件句法：定义一个热力学数据库的 GES 参数，以及 5 个特殊的扩展名，适合于 DICTRA 软件使用的动力学数据。                          | TDB/D<br>AT |  |
| PHASE                                       | TDB 文件句法：定义一个相。                                                                          | TDB/D<br>AT |  |
| REFERENCE_FILE                              | TDB 文件句法：指定一个专门的参考文件，包含数据库中不同参数的（有时还有函数的）参考文件的完整的结构列表                                    | TDB/D<br>AT |  |
| SET_INTERACTIVE<br>SET_INTERACTIVE_MOD<br>E | TDB 文件句法：重新设定输入和输出单位为它们的初始值，即键盘和屏幕，可以使用在 TAB，POLY，POST，GES，PARROT 或 SYS 模块中。记得把它加到宏文件的最后 | TCM/L<br>OG |  |
| SPECIES                                     | TDB 文件句法：规定一个 species                                                                    | TDB/D<br>AT |  |
| TABLE                                       | TDB 文件句法：规定一个吉布斯能的表格作为温度的函数，温度的值从起始温度、以一定的温度的增量作为步长直到终止温度                                | TDB/D<br>AT |  |

|                                         |                                                             |             |    |
|-----------------------------------------|-------------------------------------------------------------|-------------|----|
| TABLE_HEAD<br>TABLE_VALUES<br>TABLE_END | POP/DOP 文件句法：以表格的方式输入相同类型的许多实验值。这些命令总是一起并按一定的顺序使用。          | POP/DO<br>P |    |
| TEMPERATURE_LIMIT                       | TDB 文件句法：定义 GES 所用的吉布斯能参数和函数的默认的温度的上限与下限。                   | TDB/D<br>AT |    |
| TYPE_DEFINITION                         | TDB 文件句法：当执行 TDB 命令 GET_DATA 时，由 TDB 模块将相耦合到某个行动上。          | TDB/D<br>AT |    |
| VERSION_DATA                            | TDB 文件句法：详细说明数据库的版本日期。                                      | TDB/D<br>AT |    |
| ZERO_VOLUME_SPECIES                     | TDB 文件句法：在 DICTRA 模块中通过给出一个列表来指定哪些 species 将被视为零体积的 species | TDB/D<br>AT |    |
|                                         |                                                             |             |    |
| 文件命令                                    | 简要描述                                                        | 后缀名         | 页码 |
| PROLOGUE                                | PROLOGUE 命令：指明由此开始一系列行将包含一些用户定义的图形编排的操作命令                   | EXP         |    |
| XSCALE                                  | PROLOGUE 命令：设定 X 轴文字坐标的比例                                   | EXP         |    |
| YSCALE                                  | PROLOGUE 命令：设定 Y 轴文字坐标的比例。                                  | EXP         |    |
| XTEXT                                   | PROLOGUE 命令：设定 X 轴文字                                        | EXP         |    |
| YTEXT                                   | PROLOGUE 命令：设定 Y 轴文字                                        | EXP         |    |
| XTYPE                                   | PROLOGUE 命令：设定 X 轴的类型为线性的（默认）、对数的、反转的                       | EXP         |    |
| YTYPE                                   | PROLOGUE 命令：设定 Y 轴的类型为线性的（默认）、对数的、反转的                       | EXP         |    |
| XLENGTH                                 | PROLOGUE 命令：设定 X 轴长度大概为#厘米                                  | EXP         |    |
| YLENGTH                                 | PROLOGUE 命令：设定 Y 轴长度大概为#厘米                                  | EXP         |    |
| TIC_TYPE                                | PROLOGUE 命令：设定轴的刻度线的相关长度。                                   | EXP         |    |



|                  |                                                                                   |     |  |
|------------------|-----------------------------------------------------------------------------------|-----|--|
| TITLE            | PROLOGUE 命令：设定打印在相图上方的标题                                                          | EXP |  |
| DIAGRAM_TYPE     | PROLOGUE 命令：设定相图类型为矩形（默认的）或三角形。                                                   | EXP |  |
| DATASET          | DATASET 命令：表示由此开始的一系列行将包含一些用户定义的数据。                                               | EXP |  |
| BLOCK / BLOCKEND | DATASET 命令：定义怎样被解释当前数字代表的数据块（以 BLOCK 开始以 BLOCKEND 结束）                             | EXP |  |
| <i>DATAPoint</i> | 实际上并不是 DATASET 命令，但作为基本的 DATAPLOT 命令，它在由特定的 X/Y 坐标确定的当前点执行一个行动                    | EXP |  |
| CLIP             | DATASET 命令：打开或关闭 Clipping                                                         | EXP |  |
| ATTRIBUTE        | DATASET 命令：指定当前的哪些 XY 坐标位置是在字符或符号绘制框内                                             | EXP |  |
| LINETYPE         | DATASET 命令：重新定义绘图的当前线类型。                                                          | EXP |  |
| DRAWLINE         | DATASET 命令：画出一条直线，从 (x1,y1 ) 到 (xn,yn )，穿过(x2,y2) $\rightarrow$ (x(n-1), y(n-1))。 | EXP |  |
| CHARSIZE         | DATASET 命令：重新定义绘图中字体的默认大小                                                         | EXP |  |
| SYMBOLSIZE       | DATASET 命令：重新定义当前符号大小设定                                                           | EXP |  |
| GLOBALSIZE       | DATASET 命令：重新定义绘图的默认整体大小                                                          | EXP |  |
| COLOR            | DATASET 命令：重新定义当前颜色设定                                                             | EXP |  |
| FONT             | DATASET 命令：重新定义后处理器中的字体                                                           | EXP |  |
| STRING           | DATASET 命令：定义一个包含文本和操作代码的字符串（如：改变默认字体的设定）                                         | EXP |  |
| TEXT             | DATASET 命令：在当前位置紧随关键字 TEXT 写上文本或字符串"string-name"                                  | EXP |  |
| FUNCTION         | DATASET 命令：定义和绘制一个用户定义的函数                                                         | EXP |  |
| PCFUNCTION       | DATASET 命令：添加一个用户定义函数到当前路                                                         | EXP |  |

|         |                                 |     |  |
|---------|---------------------------------|-----|--|
|         | 径                               |     |  |
| PAINT   | DATASET 命令：在当前图形由当前路径包围的区域中进行涂绘 | EXP |  |
| INCLUDE | DATASET 命令：将一个文件导入到当前输入流        | EXP |  |

注意：

所有的文件命令（文件句法）只能用在一定类型的文本文件中（如 TDB/DAT, POP/DOP, TCM/LOG, EXP），如上表所述。

对于非文本文件类型（如 GES5, POLY3, PAR）的文件，要严格按照二进制编码来构建，因此，不可能在 Thermo-Calc 软件（TCC/TCW）DICTRA 软件或各种 Thermo-Calc 程序界面之外来打开/编辑这些文件。

因为某些与上述文本文件命令相关的章节已从 TCCR USER'S GUIDE 中摘录出来、并移至其它四个独立的文件中，想知道关于下列文件命令的详细内容，请参考它们相应的独立文件：

- ☞ TDB/DAT → *Thermo-Calc Database Guide*;
- ☞ EXP → *DATAPLOT Language User's Guide and Examples*.

## 图形列表

| 序号  | 图形说明                                                                  | 页码 |
|-----|-----------------------------------------------------------------------|----|
| 1-1 | Thermo-Calc 的计算实例。                                                    |    |
| 1-2 | Thermo-Calc 相关的软件，数据库和接口                                              |    |
| 1-3 | Thermo-Calc 程序块的大体结构。                                                 |    |
| 1-4 | 使用 Thermo-Calc Engine 建立你自己的应用程序。                                     |    |
| 2-1 | 修改你的 TCCP 快捷方式(使用推荐的值)                                                |    |
| 2-2 | 在 TeraTeam Windows 中使用 Linux/unix 版本的 TCCP（从 Windows NT/2000/XP 电脑访问） |    |

|       |                                                            |  |
|-------|------------------------------------------------------------|--|
| 3-1   | 驱动力的定义                                                     |  |
| 3-2   | Thermo-Calc 和 DICTRA 包中扩展的 CALPHAD 方法。                     |  |
| 3-3   | Thermo-Calc 软件包中用户和模块间的交互作用                                |  |
| 3-4   | TCW 与 Thermo-Calc 交互作用的最简单的方法。（一个例子）                       |  |
| 3-5   | 通过 VRMLWEB 浏览器浏览的 Thermo-Calc 3D 的 3D 图形                   |  |
| 3-6   | 为模拟扩散问题而进行的 Thermo-Calc 与 DICTRA 的耦合                       |  |
| 3-7   | Thermo-Calc 软件包的设计与图形界面                                    |  |
| 3-8   | 使用 TQ 接口的一个高级例子：MICRESS                                    |  |
| 3-9   | 使用 TCAPI 接口的一个简单例子                                         |  |
| 3-10  | 使用 TCAPI 接口的一个高级例子：Precipalac                              |  |
| 3-11  | MATLAB 软件包中的 TCMATLAB 工具箱                                  |  |
| 3-12  | 使用 MATLAB 软件的 TCMATLAB 工具箱计算和绘制的 A-B-C 体系的液相面              |  |
| 3-13a | 使用 TC MATLAB 工具箱模拟的加热过程中的一个颗粒的溶解                           |  |
| 3-13b | 使用 TC MATLAB 工具箱计算摩尔吉布斯能曲线的程序的编码和输出                        |  |
| 8-1   | 在一个多组元体系中计算 $T_0$ 温度的方法                                    |  |
| 8-2   | 三元系 Fe-M-C 相图，其中 M 是一个替换合金元素，而 C 是快速扩散元素                   |  |
| 8-3   | Fe-1C-0.5Mn-0.5Si-0.2C(wt%)钢的相图，计算的平衡状态和 $T_0$ 温度线也附加在相图中。 |  |
| 8-4   | “SAVE AS”窗口：将 DOLY3/GES52 工作空间作为一个 *.POLY3 文件进行保存。         |  |
| 8-5   | 警告信息：如果将 POLY3/GES5 工作空间保存到一个已存在的*.POLY3 文件中。              |  |
| 8-6   | “打开文件”窗口，从一个*.POLY3 文件中读取 POLY3/GES5 工作空间                  |  |
| 8-7   | 垂直截面的平衡计算：二个 Fe 基合金中仲珠头体的形成，附加了平衡计算的结果。                    |  |

|      |                                                                                                                             |  |
|------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|
| 9-1  | “ThermoCalc_graph”窗口：图象输出选择。                                                                                                |  |
| 9-2  | “Save Metafile As”窗口：将所绘制图象保存为 EMF 文件                                                                                       |  |
| 9-3  | “Front”窗口：整体改变所绘制图象的字体                                                                                                      |  |
| 9-4  | “Color” 窗口：为背景或其他目的调整颜色                                                                                                     |  |
| 9-5  | “Add Text to Diagram”窗口和它的附属窗口“Front”：简单灵活地编辑想要标记/识别的文字                                                                     |  |
| 9-6  | “Edit Arrow”窗口：编辑一个箭头的外形                                                                                                    |  |
| 9-7  | “Set Symbol Number and size”：选择一个想要的符号                                                                                      |  |
| 9-8  | “Print” 窗口：打印机和工具的选择                                                                                                        |  |
| 9-9  | “Ghostscrip”窗口：进行打印的过程                                                                                                      |  |
| 9-10 | “Save as”窗口：保存打印的图形文件                                                                                                       |  |
| 9-11 | “Open file”窗口：打开一个存在的*. EXP 文件                                                                                              |  |
| 9-12 | 通过 Cortona Veml Client 浏览的 3D 的三角形 TC 相图                                                                                    |  |
| 9-13 | 通过 Cortona Veml Client 浏览的 3D 的四面体 TC 相图                                                                                    |  |
| 9-14 | 通过 SIM VRMLView 浏览的 3D 中三角形 TC 相图                                                                                           |  |
| 9-15 | 通过 SIM VRMLView 浏览的 3D 中四面体 TC 相图                                                                                           |  |
| 10-1 | 通过 BIN 模块自动计算的 Fe-C 二元系的相图、吉布斯能曲线和相一分数曲线(输出分别对应三个主要选项 P、G 和 F)                                                              |  |
| 10-2 | 基于由三个主要选项 (P, G 和 F) 获得的计算结果、由 POST 模块产生的 Fe-Cr 二元系的其他类型的相图和性质图                                                             |  |
| 10-3 | (分别对应两个主要选择 P 和 M 的输出)由 TERN 模块自动计算的 Al-Mg-Si 三元系液相面的 1000K 等温部分和单变量投影线                                                     |  |
| 10-4 | 基于主要选项(P&M)的计算结果的、由 POST 模块产生的 Al-Mg-Si 三元系的其他类型的相图和性质图                                                                     |  |
| 10-5 | Fe 和 SO <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> 混合气体在 1000K 和 1bars 相互作用时的电势图, 由 POST 模块产生(直接在 POT-module 计算之后), 或在不同压强和温度下由 POLY 模块重新 |  |

|       |                                                                                                                                                                                                                      |  |
|-------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|
|       | 计算.                                                                                                                                                                                                                  |  |
| 10-6  | (直接在 POT 模块计算之后)由 POST 模块产生的、或由 POLY 模块在不同压强和温度下重新计算的、Fe-S-O 体系其它类型的电势图和性质图                                                                                                                                          |  |
| 10-7  | Fe 的 Pourbaix 图(25 °C 和 1bar 时 1Kg 纯水中含铁 0.001mol, 计算时排除了气相                                                                                                                                                          |  |
| 10-8  | 25 °C 和 1 bar 下的纯水和在 150 °C 和 100 bar 下的一个 3 ml NaCl-0.001 SO <sub>2</sub> 水溶液(在 8b 中)的 PH-Eh 图。注: 计算时考虑了气相。                                                                                                         |  |
| 10-9  | Fe 的 Pourbaix 图象(0.001mol 的铁溶解于 25 °C 和 1bar 的含 1Kg 纯水中, 计算时考虑了气体                                                                                                                                                    |  |
| 10-10 | Fe 的 Pourbaix 图在, 不同温度和压强条件下不同的 Fe 与纯水或水溶液活跃地相互作用; 计算中包含了气体                                                                                                                                                          |  |
| 10-11 | 在恒定的温度和压强条件下与水溶液相互作用的两个 Fe 基合金的 Pourbaix 图和性质图)(1kg 水中含有 3mol NaCl 或 1E-5 mol S <sub>2</sub> )                                                                                                                       |  |
| 10-12 | 在 1Kbar 压强下, Fe 基合金(10 <sup>-3</sup> mol Fe, 5E-5 mol Co 和 5E-5 mol Ni)和水溶液(1Kg 水, 含 1E-6 mol S <sub>2</sub> 或对通向 S <sub>2</sub> 的气体)之间的异类反应中的稳定相集合(包含水溶性相)磁铁矿+linnaeite +Fcc(Ni-Co-Fe )和磁铁矿+赤铁矿+ linnaeite +针镍矿的性质图 |  |
| 10-13 | 模拟凝固过程的 Scheil-Gulliver Model                                                                                                                                                                                        |  |
| 10-14 | 一些 Al-4Mg-2Si 合金凝固过程的 Scheil 模拟的结果                                                                                                                                                                                   |  |
| 10-15 | 使用不同方法得到的 Fe-10Cr-C 合金凝固通道的计算结果间的比较                                                                                                                                                                                  |  |
| 10-16 | 通过 TCC(SCHEIL 模块)和 DICTRA 进行的 Fe-18%Cr-8%Ni 合金的凝固通道的模拟                                                                                                                                                               |  |
| 10-17 | 多阶段稳态反应器概念的示意图解                                                                                                                                                                                                      |  |
| 10-18 | “Open file” 窗口: 从一个*.RCT 文件中读取 REACTOR 工作空间                                                                                                                                                                          |  |
| 10-19 | “Save As” 窗口: 将 REACTOR 工作空间作为一个*.RCT 文件保存                                                                                                                                                                           |  |
| 10-20 | 警告信息: 如果将 REACTOR 工作空间保存到一个存在的*.RCT 文件上                                                                                                                                                                              |  |
| 11-1  | “Save As” 窗口: 保存 GES 工作空间文件                                                                                                                                                                                          |  |
| 11-2  | “Save As” 警告窗口: 进行或取消保存                                                                                                                                                                                              |  |

|       |                                           |     |
|-------|-------------------------------------------|-----|
| 11-3  | “Open file”窗口：设定一个存储的 GES 工作空间文件          |     |
| 12-1  | “Save As” 窗口：建立一个储存的工作文件                  |     |
| 12-2  | “Save As” 警告窗口：进行或取消创建                    |     |
| 12-3  | “Open file” 窗口：设置一个储存的工作空间文件              |     |
| 12-4  | “Open file” 窗口：打开一个实验数据*.pop 文件           |     |
| 14-1  | “Save As” 窗口：将随后输入的命令保存到一个*.LOG 日志文件中     |     |
| 14-2  | “Open file” 窗口：打开一个存在的*.TCM 宏文件           |     |
| 15-1a | 所有 DIGLIB 符号的实例（从 TC 图形中打印）               |     |
| 15-1b | 所有 DIGLIB 符号的实例（以 EMF 格式）                 |     |
| 15-1c | 所有 DIGLIB 符号的实例（以 Postscript 格式）          |     |
| 15-2  | 所有 DIGLIB 字体和线型的实例                        |     |
| 15-3  | 可用的 PostScript 字体的 PostScript 输出          |     |
| 15-4a | 当前 ENCODING PostScript 绘图样式(NPRMAL 视频状态)  |     |
| 15-4b | 当前 ENCODING PostScript 绘图样式(INVERSE 视频状态) |     |
| A_A-1 | Thermo-calc Classic 软件的文件类型和它们之间的联系.      | 412 |

注意:

因为一些章节已从 TCCR User's Guide 中摘录并归结到其他四个独立的文件中, 要想获得上边列出的表格的详细信息, 请参考它们相应的独立文件:

- ☞ Chapter index as 3 (e.g. 3.2) → *Thermo-Calc Software System*;
- ☞ Chapter index as 4 or 6 → *Thermo-Calc Database Guide*;
- ☞ Chapter index as 15 (e.g. 15.4) → *DATAPLOT Language User's Guide and Examples*.

## 表格的列表

| 序号    | 标题                                   | 页码 |
|-------|--------------------------------------|----|
| 1-1   | Thermo-calc 软件包/数据包/接口的修改历史          |    |
| 1-2   | 适合 Thermo-calc Classic 软件(版本 R)的可用硬件 |    |
| 1-3   | Thermo-calc Classic 软件包(版本 R)的一个准基计算 |    |
| 3-1   | 可用于 Thermo-calc 软件包的状态变量             |    |
| 3-2   | 为水溶液和气体混合相预先定义的派生变量                  |    |
| 3-3   | Thermo-calc 软件包处理的各种相                |    |
| 3-4   | Thermo-calc 用户接口改进的不同水平              |    |
| 3-5   | Thermo-calc 包的模块和应用程序接口              |    |
| 3-6   | Thermo-calc 软件和接口的主要功能               |    |
| 3-7   | Thermo-calc 软件和数据库的一些已经存在的应用         |    |
| 4-1   | 当前可用的 Thermo-calc 数据库目录              |    |
| 8-1   | TCC 软件中三元系的各相及性质图的处理                 |    |
| 8-2   | 水溶液和气相混合物的派生变量的实例                    |    |
| 9-1   | 一个存储 Thermo-calc 图象的主要绘图格式的目录        |    |
| 10-1  | POURBHX 模块中的四个主要选择                   |    |
| 11-1  | GES 模块执行的热力学模型的列表                    |    |
| 13-1  | ED-EXP 模块中 POLY 命令执行的总结              |    |
| 15-1  | 可用的 PostScript 字体的目录                 |    |
| 15-2a | Postscript 字体 1-28 和 30-42 所用的通用编译矢量 |    |
| 15-2b | Postscript 字体 29 所用的通用编译矢量           |    |
| 15-2c | Postscript 字体 43 所用的通用编译矢量           |    |



**注意:**

因为一些章节已从 TCCR User's Guide 中摘录并归结到其他四个独立的文件中, 要想获得一些上面列出表格的详细信息, 请参考它们相应的独立文件:

- ☞ Chapter index as 3 (e.g. 3.2) → *Thermo-Calc Software System*;
- ☞ Chapter index as 4 or 6 → *Thermo-Calc Database Guide*;
- ☞ Chapter index as 15 (e.g. 15.4) → *DATAPLOT Language User's Guide and Examples*.