

# TPD 软件绘制水盐体系三元相图

夏树屏<sup>1</sup>, 陈世荣<sup>2</sup>, 王波<sup>1</sup>, 李明华<sup>1</sup>, 高世扬<sup>1,2</sup>

(1. 中国科学院青海盐湖研究所西安二部, 陕西 西安 710043;

2. 陕西师范大学化学与材料科学学院/应用化学研究所, 陕西 西安 710062)

**摘要:**介绍了三种三角相图绘图软件,着重说明用 Delphi5 开发设计绘图软件(TPD)解决了几个难点,达到具有多功能特点的水盐体系专用计算机绘图软件。实现了快速绘制三元平衡相图。并应用本程序绘制了不同类型相图。表明该程序方便、快速和可靠,所绘图形满意。

**关键词:**TPD 绘图软件;相平衡;水盐体系;三角相图绘制

**中图分类号:**TP 393.4 **文献标识码:**A **文章编号:**1008-858X(2002)01-0001-07

研究物质相互作用的热力学相平衡时,对体系状态的强度性质(温度、压力和浓度等)用图形方式来表示体系平衡时的相组成与温度、压力之间的关系,将实验结果直观地表示出来。在相图中的每一点都表示体系的各相存在的条件和相与相之间关系,也可以表示出化合物的生成、分解、固溶体的形成和消失。因而相图是物化分析中的最重要、最基础和应用最为普遍的一种化学图形<sup>[1]</sup>。

采用“相平衡”的方法通过直接测定实验数据,传统方法是用手工绘制相图。存在误差大,有人为因素和效率低的弊端。对于单元和二元体系,用双坐标的平面图就可以表示,这种能使用的软件很多。而对三元相图(或四元体系中使某组成固定可视为三元体系)处理绘画比较麻烦。随着电子计算技术的飞速发展,相图的绘制已经进入自动化、数值化的阶段,需要许多数据统计和图形处理软件。如 Origin, SigmaPlot, SPSS 以及 Mathematica, MatLab 等数学图形软件。虽然这些软件功能强大,解决问题游刃有余,但是软件价格昂贵、系统体积大<sup>[1]</sup>、

并不完全适合专业需要,还要进行程序编辑才能使用,使用起来不方便。国外有一种 Pande 绘制三元和四元体系相图的软件,从简介图形看来是适用于冶金体系的图形绘制,我们还未得到,无法评论它。我们认为特别是水盐体系相图的图形处理软件比较复杂和困难,尚未见到一个完善的,直观可应用的软件。我们应用 Windows 下的快速应用开发工具<sup>[2]</sup>Delphi5 完成了适合于三元体系相图自动绘制的专用程序 TriphaseDiagram(简称为 TPD)<sup>[3]</sup>。本文简介三种三元相图作图软件。应用 TPD 程序进行多种类型的水盐体系平衡溶解度图绘制,结果表明本程序是进行相平衡研究中绘制相图的良好工具。

## 1 几种绘制三角相图软件

我们了解到的三角相图软件,现简介如下:

### 1.1 Mathematica 下编程绘图程序

李强等<sup>[3]</sup>曾采用 Mathematica 编程技术对

收稿日期:2001-11-19

基金项目:国家自然科学基金项目(29971032)

作者简介:夏树屏(1932-),研究员,从事无机物理化学。

相图绘制中的应用进行研究。该程序使用 Mathematica 的 Notebook - Based 接口,输出的图形都放在用户的 notebook 中。从数学原理上,解决了水盐体系绘制三元相图的部分问题;如三角坐标转换、图形背景设计、结线的绘制和曲线的绘制。用 PostScript 描述语言再编辑一些程序接口。初步达到计算机自动绘图。且利用 Mathematica 处理的图形质量好,而且有自成一体的优点。但不够完善的是该程序不是独立的软件,必须依赖大容量的 Mathematica 软件。

## 1.2 Origin5 下绘图

Origin5 是一种强大的数据处理和具有多种图形绘制功能软件。它可以进行三角相图的绘制,在数据输入时,需将溶解度数据输入为一个文件,输入 A 和 B 轴,设置 C 轴并转换为 Z 轴,做出溶解度曲线。把湿固相数据输入为另一个文件。两个文件合并后,用点击△图标作图。人工绘出结线。最后还需要进行参数调整找到三边相等的三角形图形。虽然该软件可以使用于一般简单的体系,但无法用于复杂体系,作图费力,费时。图形不能在其它的绘图软件中进行修改和美化。由于参数不容易选择为等边三角形,所绘图形效果欠佳。

以上两种软件虽然功能强大,但系统大、存在各自的缺点。对于有复盐形成的饱和和溶解度曲线分段拟合的绘制和结线的延长相交没有解决。在 Windows 下无直观的作图界面,不适合专业需要,且操作比较麻烦,不易掌握。

## 1.3 TPD 绘图软件

我们从实际情况出发,采用 Inprise 公司的 Delphi5 语言,设计并编制成一种为水盐体系三角相图绘图的专用的 TPD 软件。程序原理:主要包括三角形的物种名称、组成点的在线显示、坐标转换、固液平衡线(溶解度曲线)、固液结线、和结线的延长相交及绘图线条粗细的选择等图形元素的设计和绘制。

### 1.3.1 设置多样性

(1) Windows 界面下设置有菜单进行多种选择和功能转换接口按钮。

(2) 固液平衡线的绘制,本程序中提供了几

种不同的选择,它包括对液相点数据的折线连接法、多项式拟合法、三次样条平滑法和溶解度曲线分段处理等。这样就能够反应实际情况,效果良好。同时可以在数据表中显示出多项式拟合结果,得到不同物种的溶解度方程可以存盘。

(3) 结线的绘制:结线是液相点与固相点之间的连线,可以直接连接、多项式连接和给定组成点连接和不连接。绘制出结线图后就可看出三元或四元体系中的相区范围,以及有无化合物生成的趋势。对于结线的固相延长,由于实验误差的存在,使得本该交于一点的延长线,其交点不能重合。解决的方法是对结线进行最小二乘处理。设有液相点 $(x_{l_i}, y_{l_i})$ 和相应的固相点 $(x_{s_i}, y_{s_i})$   $(i=1, 2, \dots, n)$ ,若连接相应点可生成预期将交于一点 $(x^0, y^0)$ 的  $n$  条结线

$$y = k_i x + b_i \quad i=1, 2, \dots, n \quad (2)$$

对(2)中的  $n$  个方程以

$$\text{Res} = \sum_{i=1}^n [y - (k_i x + b_i)]^2 \quad (3)$$

为目标进行最小二乘求解,可确定最佳交点 $(x^0, y^0)$ ,然后依次连接 $(x_{l_i}, y_{l_i})$ 和 $(x^0, y^0)$ 即可生成完整的结线。

有关软件的设计原理和方法在另文中详细阐述。此处不作重复介绍。

### 1.3.2 突出特点

(1) 本程序编译生成 TPD·EXE 文件可在中文 Windows 9x/Me 或 Windows 2000 下运行。程序运行后,由于独特设计,一目了然,出现绘制相图的主要功能,提供菜单驱动、工具栏操作,并且提供了与 Windows 系统画板的接口按钮,只要点击该按钮就可进入 Windows 画板,存为 BMP 文件,并能将文件调入其它系统作图象的进一步处理。

(2) 程序提供了绘制线条选择、坐标风格选择、相平衡线的模型选择、结线连接方式的选择等,具有较大的灵活性。程序的自动化程度较高,操作方便,实用,灵活。基本上无需借用其它绘图软件作图。

(3) 动态组成提示功能:只要在相图区域(三角形区域)内某点处点击鼠标,便会在下面状态栏显示该点在体系中的百分组成。对作图

的选点和曲线的延长相交组成点的确定很方便。

(4)体积小(590kB),占用系统资源少,对硬件要求不高。本程序属“绿色”软件,不需安装程序,不用时直接删除便可,不会遗留任何垃圾。

## 2 TPD 软件的应用实例

绘图操作:打开 TPD·EXE 程序运行后,进入绘图页面,打开“文件”目录,可选用编辑数据文本或读入文件数据。若用表 2 中的数据绘三角相图时,编辑数据文本时不需用输入编号数据,只用饱和溶液和湿固相中的两个组份的数据,作成若干行 4 列的文本文件,命名存盘。返回到主界面,读入文件数据,在“相图绘制设置”窗口进行有关项目的设置:

物种表示:输入三个组份物质 A、B、和 C 的名称。

图形大小:图相宽度(三角形边长)的选择、设置曲线、结线和边的画笔宽度。

坐标设置:坐标风格选择、坐标单位刻度、背景风格等。

两相曲线:曲线的连接方式可选择直线连接、多项式拟合、样条平滑等。如选择多项式拟合,选择拟合方次、是否分段拟合、是否需要显示拟合方程;如果选择样条平滑曲线,则需确定逼近度指数,以及是否分段。如果选择了分段拟合,则需要指定分段点。

结线选择:可在结线简单连接、结线自动延长、指定结线交点和不连接结线等选项中选择。

设置完成后,点击“OK”按钮返回主界面,若不分段时,单击“相图”按钮,若是选择分段拟合和指定结线交点时,应输入固相组成点。再单击“相图”按钮,即可在窗体左侧的绘图区域自动绘出相图。当对图形效果不满意时,可单击“擦除”按钮清除图形画面,重新点击“设置”,进行重新设置选择,重击“相图”,直到满意为止。

初步完成了相图的绘制后,用 BMP 文件保存。还可用快捷键进行复制、粘贴、剪切和调用 Windows 的画板。

### 2.1 只结晶出组份盐的体系

一种类型是 A—B—H<sub>2</sub>O 三元体系中形成 A 和 B 两种原物质无水盐,例如在 AX—BX—H<sub>2</sub>O 三元体系中,采用文献<sup>[4]</sup> 20℃ 和 120℃ 时 NaCl—KCl—H<sub>2</sub>O 三元体系平衡溶解度数据表 1,用本程序可以快速作出不同温度下的相图。平衡固相分别是 NaCl 和 KCl 无水盐。如图 1 所示。

表 1 NaCl—KCl—H<sub>2</sub>O 平衡溶解度

Table 1 Equilibrium solubility of NaCl—KCl—H<sub>2</sub>O

<i>t</i> /℃	saturation solution		solid phase
	NaCl( <i>w</i> /%)	KCl( <i>w</i> /%)	
20	26.37	0	NaCl
	24.28	3.78	NaCl
	21.49	9.02	NaCl
	20.48	10.85	NaCl+KCl
	8.13	18.87	KCl
	3.50	22.73	KCl
	0	25.68	KCl
120	28.98	0	NaCl
	16.17	23.95	NaCl
	18.90	18.72	NaCl
	15.77	24.70	NaCl+KCl
	14.99	25.06	KCl
	12.08	27.54	KCl
	9.15	29.88	KCl
	6.13	32.52	KCl
	0.00	37.65	KCl

另一种类型是我们测定了在 C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH—H<sub>2</sub>O 混合溶剂中加入无水的硫酸铷 0℃ 时的平衡溶解度数据表 2,析出来的固相为无水的硫酸铷。三元体系平衡溶解度绘于图 2。

### 2.2 部分分层体系

在混合溶剂中仅存部分组成溶液中形成分层,与液相相平衡固相为无水盐。在 C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH—H<sub>2</sub>O 混合溶剂加入 CsCl 后,在中等浓度出现分层,BC 段为分层曲线。

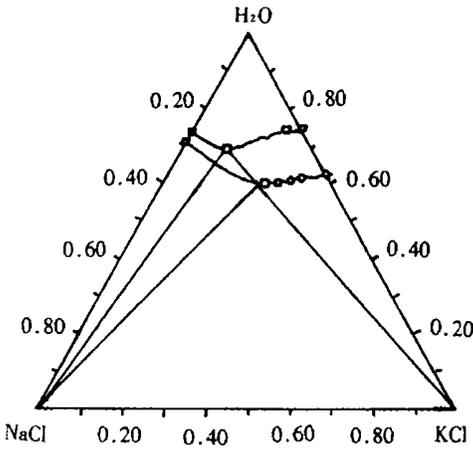


图 1 20°C 和 120°C 的三元平衡体系溶解度  
Fig.1 Solubility of ternary system at 20°C and 120°C

表 2 Rb<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH-H<sub>2</sub>O(0°C)平衡溶解度  
Table 2 Equilibrium solubility of Rb<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH-system at 0°C

No.	Water Phase(w/%)		Wet Solid phase(w/%)		solid phase
	Rb <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	Rb <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	
1	26.42	0.00	—	—	Rb <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
2	10.61	10.10	88.94	1.61	Rb <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
3	4.59	18.46	88.31	2.94	Rb <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
4	2.81	24.58	84.27	3.04	Rb <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
5	1.10	36.41	85.70	5.90	Rb <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
6	0.89	39.31	84.91	6.09	Rb <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
7	0.32	46.74	85.21	7.38	Rb <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
8	0.23	64.81	85.05	9.89	Rb <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
9	0.19	73.55	78.33	16.06	Rb <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
10	0.20	82.27	81.09	15.06	Rb <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
11	0.02	99.50	—	—	Rb <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>

注:输入时不需录入表头及最左一列的实验序号

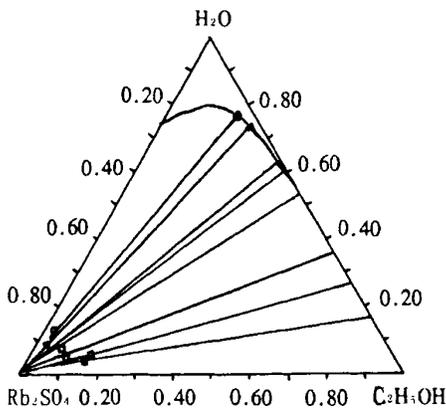


图 2 0°C 时, Rb<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH 相图  
Fig.2 Phase diagram of Rb<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH at 0°C

表 3 CsCl-C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH-H<sub>2</sub>O(40°C)平衡溶解度  
Table 3 Equilibrium solubility of CsCl-C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH-H<sub>2</sub>O system at 40°C

No.	Water Phase(w/%)		Wet Solid phase(w/%)		solid phase
	CsCl	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	CsCl	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	
1	65.60	—	80.30	—	CsCl
2	60.85	6.07	79.40	2.60	CsCl
3	56.68	10.02	73.86	5.94	CsCl
4	55.40	12.09	77.10	5.50	CsCl
5	57.17	10.70	74.24	5.80	CsCl
6	60.50	11.77	76.40	6.10	CsCl
7	54.50	11.19	84.30	3.90	CsCl
8	14.07	61.60	67.10	22.90	CsCl
9	4.87	81.05	73.40	23.03	CsCl
10	0.18	99.92	77.96	22.10	CsCl

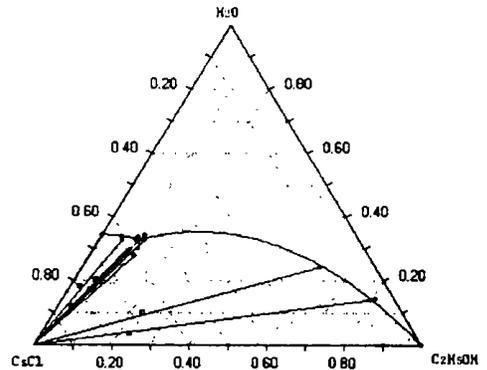


图 3 CsCl-C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH-H<sub>2</sub>O·25°C 溶解度  
Fig.3 Solubility of CsCl-C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH-H<sub>2</sub>O at 25°C

### 2.3 形成水合盐和水合复盐

在 CsX-EX<sub>3</sub>-HX-H<sub>2</sub>O(x=Cl, Br, I) 的四元体系中 HX 控制在一定酸度范围内研究 CsX-EX<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O 三元体系中相化学的研究。西北大学冉新权等<sup>[5]</sup>进行过一系列工作。本文介绍王惠等研究的一个体系<sup>[5]</sup>。用 TPD 软件对曲线分段拟合,得到不同化合物的拟合方程。绘图效果良好。

### 2.4 形成固液体

本文取用文献<sup>[6]</sup>数据, Cs<sub>2</sub>MoO<sub>4</sub>-Li<sub>2</sub>MoO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O 三元体系中形成固液体。它是有固定组成的多条曲线相交在 Cs<sub>2</sub>MoO<sub>4</sub> 和 Li<sub>2</sub>MoO<sub>4</sub> 底边

上, 曲线拟合很好, 得到固体溶解度方程。  
 $\text{Cs}_2\text{MoO}_4 \cdot \text{Li}_2\text{MoO}_4$  计算值与实验值相差小于 1%。

表 4  $\text{PrBr}_3\text{-CsBr-HBr}(13.31\%)\text{-H}_2\text{O}$  四元  
 体系中三角形面  $25^\circ\text{C}$  时溶解度数据

Table 4 Solubility data of Saturation solution of the  
 quaternary system on the trigonal basal face

No.	sat. solution (w/%)		wet residue (w/%)		solid phase
	$\text{PrBr}_3$	$\text{CsBr}$	$\text{PrBr}_3$	$\text{CsBr}$	
1	0.00	41.25	0.00	0.00	$\text{CsBr}$
2	7.43	33.14	1.59	84.33	$\text{CsBr}$
3	15.90	27.67	3.33	84.66	$\text{CsBr}$
4	22.68	24.82	4.99	81.04	$\text{CsBr}$
5	29.25	22.20	5.38	84.84	$\text{CsBr}$
6	30.44	21.83	11.56	70.82	$\text{CsBr}$
7	32.33	21.77	8.64	78.33	$\text{CsBr}$
8	35.40	21.17	30.21	42.35	$\text{CsBr}+\text{C}$
9	34.87	20.89	32.30	48.58	$\text{CsBr}+\text{C}$
10	42.20	14.05	38.34	29.80	$\text{C}$
11	41.36	14.89	36.91	33.49	$\text{C}$
12	45.52	11.22	39.45	28.54	$\text{C}$
13	49.66	9.21	44.93	20.46	$\text{C}$
14	48.05	10.18	41.56	29.56	$\text{C}$
15	50.81	9.19	54.29	16.03	$\text{C}+\text{D}$
16	51.08	9.28	57.89	10.82	$\text{C}+\text{D}$
17	53.53	4.10	63.57	3.27	$\text{D}$
18	57.79	0.00	0.00	0.00	$\text{D}$

注:  $\text{C}=5\text{CsBr} \cdot 2\text{PrBr}_3$ ;  $\text{D}=2\text{PrBr}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$

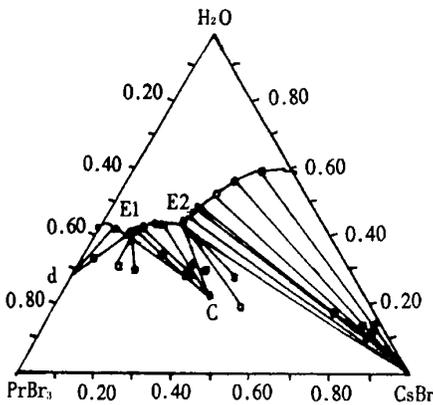


图 4  $\text{PrBr}_3\text{-CsBr-H}_2\text{O}$   $25^\circ\text{C}$  溶解度

Fig. 4 Solubility of  $\text{PrBr}_3\text{-CsBr-H}_2\text{O}$  at  $25^\circ\text{C}$

化学进行过系列研究, 此处举例是形成两个络合物、一个水合盐和无水盐的复杂体系相图, 我们经过分段参数设置能得到很满意效果。显示了本软件优点。

$\text{YCl}_3\text{-Phe-H}_2\text{O}$  体系中  $\beta\text{-Phenylalanine}$  (简写 Phe) 形成四种化合物, 析出四个固相, 可得到四个固相溶解度多次方程。

表 5  $25^\circ\text{C}$  时,  $\text{Li}_2\text{MoO}_4\text{-Cs}_2\text{MoO}_4\text{-H}_2\text{O}$   
 三元体系溶解度

Table 5 Solubility of  $\text{Li}_2\text{MoO}_4\text{-Cs}_2\text{MoO}_4\text{-H}_2\text{O}$   
 system at  $25^\circ\text{C}$

No.	sat. solution (w/%)		wet residue (w/%)		solid phase
	$\text{Li}_2\text{MoO}_4$	$\text{Cs}_2\text{MoO}_4$	$\text{Li}_2\text{MoO}_4$	$\text{Cs}_2\text{MoO}_4$	
1	44.40	—	94.85	—	A
2	43.29	2.98	91.05	0.48	A
3	42.37	5.48	84.63	6.26	A+C
4	42.33	5.51	70.82	21.80	A+C
5	42.29	5.54	49.14	41.06	A+C
6	36.69	9.96	30.60	58.11	C
7	33.28	13.06	30.21	56.02	C
8	25.25	21.39	28.10	59.32	C
9	17.45	31.73	60.98	60.30	C
10	13.52	38.48	27.02	67.00	C
11	11.04	43.07	25.25	65.33	C
12	9.60	45.53	24.88	67.60	C
13	3.75	61.56	22.63	68.65	C
14	0.90	75.66	25.20	71.62	C
15	0.52	78.93	14.05	80.40	C+B
16	—	79.76	—	95.85	C+B

注:  $\text{A}=\text{Li}_2\text{MoO}_4$ ;  $\text{B}=\text{Cs}_2\text{MoO}_4$ ;  $\text{C}=\text{Li}_2\text{MoO}_4 \cdot \text{Cs}_2\text{MoO}_4$

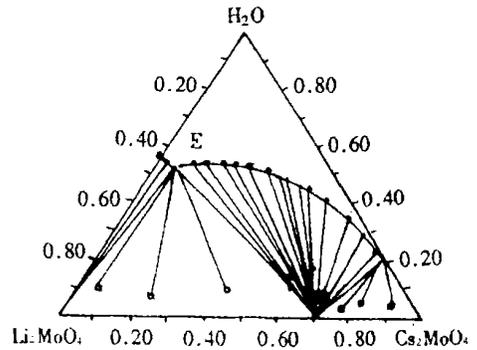


图 5  $\text{Li}_2\text{MoO}_4\text{-Cs}_2\text{MoO}_4\text{-H}_2\text{O}$   $25^\circ\text{C}$  溶解度图

Fig. 5 Solubility diagram of  $\text{Li}_2\text{MoO}_4\text{-H}_2\text{O}$  at  $25^\circ\text{C}$

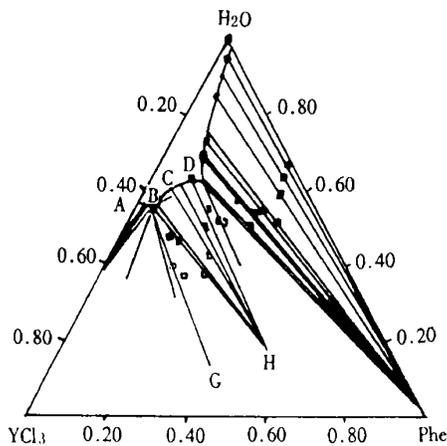
### 2.5 形成多种络合物和水合物

高胜利等<sup>[7]</sup>对稀土元素与有机多胺酸等相

表 6  $YCl_3-Phe-H_2O$  25°C 平衡溶解度Table 6 Solubility of  $YCl_3-Phe-H_2O$  system at 25°C

No.	sat. solution (w/%)		wet residue (w/%)		solid phase
	$YCl_3$	Phe	$YCl_3$	Phe	
0	42.80	0.00	0.00	0.00	E
1	43.66	0.00	57.48	0.45	E
2	42.68	2.11	57.85	0.87	E
3	42.34	2.47	0.00	0.00	E+G
4	42.30	2.51	1.00	0.00	E+G
5	42.32	2.47	53.43	6.45	E+G
6	42.28	2.59	45.00	17.78	G
7	42.05	3.04	0.00	0.00	G
8	41.78	3.50	41.78	21.35	G
9	41.44	3.98	43.08	17.38	G
10	41.15	4.65	40.45	12.35	G+H
11	40.36	4.95	38.52	15.45	H
12	39.16	4.39	36.84	25.95	H
13	33.33	6.63	32.85	24.73	H
14	30.28	8.45	29.91	19.93	H
15	27.32	10.05	27.56	17.94	H
16	24.85	12.88	24.98	23.98	H+Phe
17	24.66	13.04	26.11	21.91	Phe
18	23.82	12.15	18.67	31.26	Phe
19	21.55	10.16	18.58	24.54	Phe
20	21.06	9.88	16.21	30.00	Phe
21	18.67	8.35	13.91	32.02	Phe
22	17.11	7.64	11.51	37.35	Phe
23	10.33	4.70	7.02	34.45	Phe
24	5.80	3.63	4.01	32.57	Phe
25	2.29	2.29	1.58	31.86	Phe
26	0.00	1.95	0.00	0.00	Phe

注: E= $YCl_3 \cdot 6H_2O$ ; G= $Y(Phe)Cl_3 \cdot 3H_2O$ ; H= $Y(Phe)_2Cl_3 \cdot 6H_2O$ ; Phe= $C_6H_5CH_2(NH_2)CO_2H$

图 6  $YCl_3-Phe-H_2O$  25°C 溶解度Fig. 6 Solubility of  $YCl_3-Phe-H_2O$  at 25°C

### 3 结论

1. 实例运行结果表明:本程序运行稳定、人机对话功能强、自动化、效率高、使用灵活方便、图形美观、能满足现代论文撰写进入数值化的需要。

2. TPD 程序对三元体系,可以绘制形成无水盐、水合盐、水合复盐和固液平衡溶解度相图,由于有固相鉴定区间,能得到正确的溶解度曲线,因而可方便的得到平衡固相的溶解度多次方程。化合物组成计算值与实际值相符。自动绘制的三角相图与人工绘制的一致。可以检查实验数据和偏差情况。达到自动快速、省力省时,易于在其绘图软件中进行修改、着色、重叠等图象处理。

3. 对含有一定组分酸(或不参与反应的第四种、第五种组分)的四元体系中的三元相图,也可以进行绘制。

4. TPD 程序应用对象很广,运用于各种三元体系组成的相化学研究,及多温相关系图。如含体系熔盐体系和有机溶液等。

### 参考文献:

- [1] 陈运生. 物理化学分析[M]. 北京:高等教育出版社, 1988. 327-333.
- [2] 中国科学院沈阳计算技术研究所. 电子计算机常用算法[M]. 北京:科学出版社, 1976.
- [3] 李强. 硕士研究论文[D]. 西安:西北大学, 1997.
- [4] 陶坤, 译. 苏联化学手册(第三册)[M]. 北京:科学出版社, 1963. 121.
- [5] WANG Hui (王惠), RAN Xinquan (冉新权), CHEN Peiheng (陈佩珩). Phase chemistry of Cesium Bromide and Praseodymium tribromide reacting in hydrosulfuric acid[J]. CHINESE SCIENCE BULLETIN, 1996, 44(11): 910-915.
- [6] З. Г. Каров, Р. С. Мирзоев, Н. М. Дюхва, С. В. Жилова. РАСТВОРИМОСТЬ И НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА НАСЪ И III ЕННЪ РАСТВОРОВА СИСТЕМЕ  $Li_2MoO_4 - Cs_2MoO_4 - H_2O$  II ПРИ 25°C [J]. Журнал Неорганической химии, 1993, 38(2): 377-381.
- [7] 任非, 高胜利, 楚刚辉, 史启祯.  $YCl_3-\beta$ -Phenylalanine (Phe)- $H_2O$  体系的相化学行为[J]. 应用化学, 2000, 17(2): 203-205.

## The Plotting Ternary Phase Diagram of Salt Solution by TPD Software

XIA Shu-Ping<sup>1</sup>, CHEN Shi-rong<sup>2</sup>, WANG Bo<sup>1</sup>, LI Ming-hua, GAO Shi-Yang<sup>1,2</sup>

(1. *Institute of Salt Lakes, Chinese Academy of Sciences, Xi'an 710043, China;*

2. *Institute of Application Chemistry, Shaanxi Normal University, Xi'an 710062, China*)

**Abstract:** Three programs of trigonal phase diagram have been introduced. We have mainly solved some problems that using Delphi has implemented a program to plot diagram. It has attained special function that the different types of examples show conveniently and flexibly. The result diagram is satisfying.

**Key words:** Salt solution; Phase diagram; TPD software