

SFM 法在水盐体系相图计算机成图中的应用 (Ⅲ):由子体系出发计算多元水盐相图的一种简便方法

殷辉安,唐明林,魏贤华,胡家文
(成都理工大学化工与制药系 成都 610059)

摘要:对符号函数矩阵(SFM)法用于水盐体系相图计算机成图过程进行改进,减少了成图工作量,成图结果与文献报导实验值和计算结果吻合。

关键词:SFM 法;水盐体系相图;计算机成图;简便方法

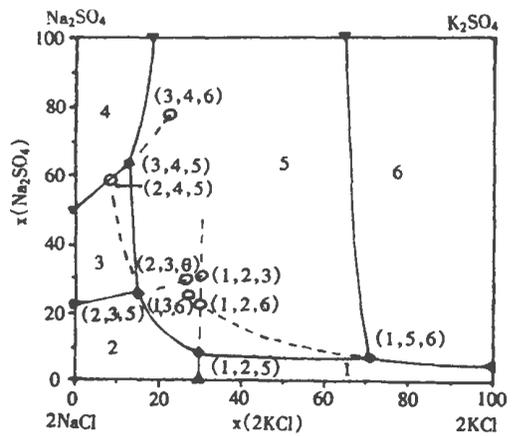
中图分类号:O643.12 **文献标识码:**A **文章编号:**1008-858X(2003)-0072-02

殷辉安及其合作者以符号函数矩阵(SFM)为工具,在前人工作及热力学和相图拓扑理论分析的基础上,提出了关于稳定单变度曲线和稳定无变度点的一套完整而又具有普适性的判别方法(SFM法)^[1-4],并将此法应用于等温等压下三元水盐体系相图的计算机成图^[5-6]。但对于复杂体系,此方法涉及的计算量仍然嫌大,有必要做进一步改进。

一条单变度曲线上若存在两个稳定无变度点,则这两点必然相邻^[1,7]。故,若已知一个稳定无变度点及其发出的稳定单变度曲线的走向,则可通过无变度点相对位置的比较来确定这条线上所有其它无变度点的稳定性。这样,原则上就可以方便地完成多元水盐体系相图的计算机成图工作。具体成图步骤如下:(1)以二元子体系的稳定无变度点为初始的已知条件,根据上述方法依次确定各高级子体系的稳定无变度点;(2)从稳定边界点(子体系的稳定无变度点)出发,再按上述方法依次判别出相应相图内部各稳定无变度点;(3)根据稳定无变度点,确定并计算各稳定单变度曲线。此法的优点是理论模型简单,成图工作量小。

作为具体成图实例,根据上述方法,计算了四元体系 $K^+, Na^+ // Cl^-, SO_4^{2-} - H_2O$

298K 下的相图(如图)。这一预测结果与文献^[8]报道的实验值及计算结果吻合。



- 相区代号:
1. KCl(s) 2. NaCl(s)
3. Na2SO4(s) 4. Na2SO4·10H2O(s)
5. NaK3(SO4)2(s) 6. K2SO4(s)

— 介稳曲线
—— 稳定曲线

- · 位于连界上的稳定无变度点
- · 介稳无变度点
- · 稳定无变度点

图 $K^+, Na^+ // Cl^-, SO_4^{2-} - H_2O$ 四元体系
298K 下的相图计算结果

Fig. Phase diagram calculation results of the quaternary system

(下转 65 页)

Nonequilibrium Nondissipative Thermodynamics and Calculation of Nonequilibrium Phase Diagrams

WANG Ji-tao, ZHANG Wei

(Dept. of Microelectronics, Fudan University, Shanghai 200433, China)

Abstract: Nonequilibrium nondissipative thermodynamics is a new field of modern thermodynamics. Basic information of the new field can be found from a new English book [J. T. Wang; Nonequilibrium Nondissipative Thermodynamics, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, March 2002, 254 pages, see <http://www.springer.de/cgi-bin/search-book.pl?isbn=3-540-42802-X>]. A complete and basic systematization of modern thermodynamics and the calculation of nonequilibrium phase diagrams are discussed in this paper.

Keywords: Nonequilibrium nondissipative thermodynamics; Nonequilibrium phase diagram; Low-pressure diagram

(上接 72 页)

参考文献:

- [1] 殷辉安, 胡家文, 唐明林, 韩文喜. 多体系相图[M]. 北京大学出版社, 2002.
- [2] 殷辉安[J]. 中国科学(B 辑), 1992, (22): 129-134.
- [3] 殷辉安, 韩文喜[J]. 中国科学(B 辑), 1996, (26): 21-29.
- [4] 胡家文, 殷辉安, 唐明林[J]. 中国科学(B 辑), 2000, (30):

353-360.

- [5] 唐明林, 胡家文, 汪蓉, 殷辉安[J]. 四川大学学报(自然科学版), 2002, (39): 106-110.
- [6] 汪蓉, 胡家文, 唐明林, 殷辉安[J]. 四川大学学报(自然科学版), 1998, (35): 601-606.
- [7] 郭其梯[J]. 中国科学, 1979, 800-808.
- [8] 牛自得, 潘焕泉[J]. 计算机与应用化学, 1987, (4): 301-306.

Application of SFM Method in the Computerized Drawing of the Phase Diagram of Salt-water Systems (III) A Simple Way for the Calculation of the Phase Diagram of Polybasic Salt-water Systems from Subsystems

YIN Hui-an, TANG Ming-lin, WEI Xian-hua, HU Jia-wen

(Department of Chemical and Pharmaceutical Engineering, Chengdu University of Science and Technology, Chengdu 610059, China)

Abstract: This paper deals with the simplification of the calculation process of the SFM method for the computerized drawing of the phase diagrams of salt-water system. A simple way is presented. The calculation results of the quaternary system $K^+, Na^+ // Cl^-, SO_2-4-H_2O$ at 298K conform well to those provided in literary reports.

Key words: SFM; Phase diagram of salt-water system; Computerized drawing; Simple Way