Thermo-Calc®

User's Guide

Version P

Thermo-Calc Software AB
Stockholm Technology Park
Björnnäsvägen 21
SE-113 47 Stockholm, Sweden
Copyright © 1995-2003 Foundation of Computational Thermodynamics
Stockholm, Sweden

第 1 部分　一般介绍

1.1 计算热力学

在近十年内与材料科学与工程相联系的计算机计算与模拟的研究与发展已经为定量设计各种材料产生了革命性的方法，热力学与动力学模型的广泛结合使预测材料成分、各种加工后的结构和性能。

产品开发与工程控制的数学模型的重要性已经证明对热力学计算和动力学模拟的高需求，先进材料的现代定量计算设计已从计算热力学与动力学中得到了惊人的益处。

用 Thermo-Calc 进行的热力学计算和用 DICTRA 进行的动力学模拟可戏剧性地加强制造过程的设计能力、热处理温度的选择能力、过程收益的优化能力等，这些易于理解的软件/数据库/界面包已经在世界范围内证明是最有力和最有柔性的排除昂贵和费时的实验、改进质量性能和控制环境影响的工程工具。

1.2 Thermo-Calc 软件/数据库/界面包

Thermo-Calc 是所有各种热力学和相图计算的通用和柔性的软件包，是建立于强大的 Gibbs 能最小化基础之上的。它是多于 30 年和 100 人年的劳动以及很多各种项目的国际合作的结果。Thermo-Calc 软件可使用多种热力学数据库，特别是热力学数据库的国际合作组织 Scientific Group Thermodata Europe(SGTE)开发的数据库。

TCC(传统的 Thermo-Calc)和其姊妹软件 DICTRA（扩散控制相转变）已经在瑞典斯德哥尔摩皇家工学院（KTH）的材料科学与工程系开发出来，Thermo-Calc 的第一个版本发布于 1981 年，以后几乎每年更新，最新的版本 P 发布于 2002 年 11 月。Thermo-Calc 和 DICTRA 以及相关数据库的产权属于非赢利组织斯德哥尔摩的计算热力学基金会（STT），从 1997 年起，市场化、销售、技术支持以和所有其它有关 Thermo-Calc 与 DICTRA 软件包的活动都有 STT 拥有的 Thermo-Calc Software AB（TCSAB）公司管理。

Thermo-Calc 已获得世界性的计算多元相图最好软件的荣誉，今天遍及世界得多与 600 家安装了该软件，包括科技的和非科技的研究院所，在技术文献上是一个很好的参考。它是仅有的计算在一个非常复杂的多元不均匀系中有多于 5 个独立变量的任意相图断面的软件，也有计算很多其它类型图的工具，如 CVD 沉积、Scheil-Gulliver 凝固模拟、Pourbaix 图、气体分压等。在 Thermo-Calc 例子中给出了很多应用实例，这些实例也可从 TCSAB 的 web 地址中找到。

任何现代 PC 机和 UNIX 工作站都可用于运行 Thermo-Calc 软件/数据库/界面包，然而，从 TCCP 起，将不能在 SUN Spare, HP, IBM, AIX 和 DEC Alpha OSF1 上运行。

若无精确的和有效的数据库，热力学软件包是无用的。Thermo-Calc 允许体系中各相采用不同模型来使用不同来源的数据库，如来自 SGTE、CAMPADA、TremoTech、MIT、UES Software、Theoretical Geochemistry Group 等。这样的数据库覆盖了包括钢、合金、陶瓷、熔体、熔渣、玻璃、硬材料、半导体、超导体、焊料、气体/流体、水溶液、有机物、聚合物、核材料、土壤材料以及地球化学于环境体系等大量材料，用于研究和开发工业工程和自然体系。

KTH 的 Thermo-Calc 小组已经开始并参与很多国际项目，以便创建通用而有效的数据库。Thermo-Calc Software AB 现在正积极的地致力于开发面各种工业意义的数据库，世界上也有很多科研机构核工业公司的用户在建立自己的数据库和在 Thermo-Calc 软件包的辅助下的数据库。

Thermo-Calc 也提供给用户一个独特的工具（PARROT 模块）来进行实验数据如态密度 EOS、相平衡、相图等基础上的严格估价，由这些模块用户可有效地扩展某些数据库或可靠地创建各种数据库或某些特定材料和用途的数据库。

在各种所有传统版本中，Thermo-Calc 具有交互用户界面、扩展文件和在线帮助工具，Thermo-Calc 软件包的通用的图形用户界面（GUI-driven）版本 TCW 已经发行，允许各类 Thermo-Calc 计算在微软视窗下操作，这个通用的图形用户界面版本不久将开发适于在 UNIX 和 Linus 环境运行

Thermo-Calc 也有为面向应用编程的两个第三参与者编程界面 TQ 和 TCAPI，这两者是为在各种材料性质模型和复杂材料过程模拟中应用而设计的。有 Thermo-Calc 引擎驱动，这样的界面提供复杂性质模型化和过程模拟中其它面向应用程序或软件包需要的热力学量和局域平衡与驱动力的各种类型计算，最成

功的例子是易于理解的 DICTRA 软件包。

同时进行计算与实验同纯粹实验试错方法相比，可使材料与工艺开发获得了更快更可靠的进步，通过 Thermo-Calc 软件、数据库和界面的具有意义的开发，热力学计算方法的全部潜力正在被更好地利用，软件包以发展到这样的程度，即在冶金、和仅开发、材料科学、半/超导体、化学、化工、地球化学、能量转换、粉末生产、食品工业、核燃料废物仓储，环境控制等领域进行实际计算。

Thermo-Calc 主要目的之一是用于计划和减少新的高成本实验的需要。通过计算可以预测实验结果，这可限制最终必须作的实验的树木。甚至可以发现单独的计算结果就是足够可靠的，足以直接应用。

不论现在还是将来，TCSAB、STT 和 KTH-MSE 都在更加致力于开发 Thermo-Calc 软件和它的姊妹软件 DICTRA，以及为各种材料与工艺的各种数据库和界面程序。与很多国际上的研发参与者以及世界各地 Thermo-Calc 和 DICTRA 用户的连续而紧密的合作确保了这种开发的成功。

1.3 致谢

1.4 版本历史

1.5 Thermo-Calc 软件包的通用结构

Thermo-Calc 软件由七个基本模块组成，TDB 负责数据库修补和管理，GES 负责热力学模型处理和各种相的数据处理，TAB 负责相和反应的热力学性质制表，POLY 负责多元异质平衡计算和步进/图形（stepping/mapping）计算，POST 负责各种相图和性质图的后处理，PARROT 负责参数优化，ED_EXP 负责实验点编辑和平衡计算。这些所有模块通常都是进行热力学计算或模拟所必需的。进一步讲，这些模块内部相互连接，但各自具有自己的工作空间（如 SYS、GES、POLY 和 PARROT）。POST 模块通常被称为 POLY 模块的子模块，同时处在 PARROT 与 ED_EXP 之间。也有一个连接 TAB 和 POST 模块的桥。

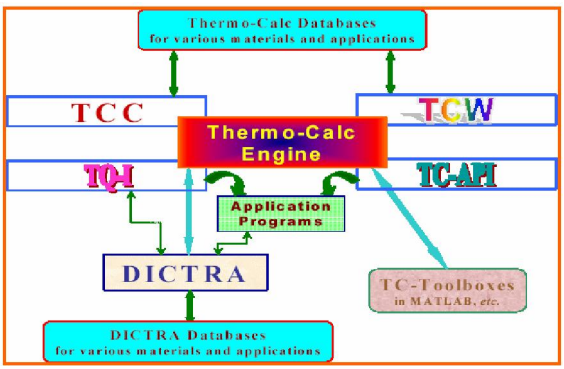


图 1-2　Thermo-Calc 相关的软件、数据库和界面

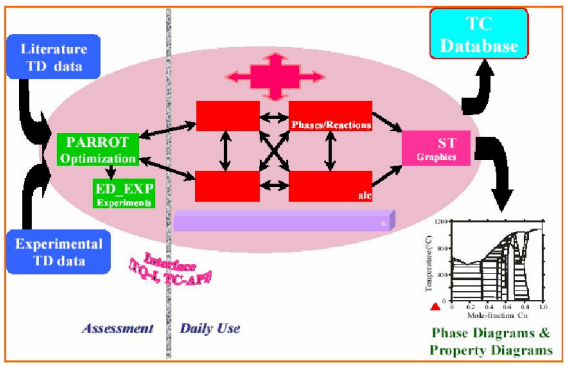


图 1-3 Thermo-Calc 软件包的一般结构

软件包中也有一些为特定计算和模拟设计的特定的模块或称易于使用模块，如二元相图的 BIN，三元相图的 TERN，势图的 POT，Pourbaix 图的 POURBAIX，Scheil-Gulliver 凝固模拟的 SCHEIL 以及稳定态反应模拟的 REACTOP。这些模块以特定方式设计，用户不需要与基本模块直接接触，而是仅回答一些需要回答的问题。软件/数据库系统自动进行计算和模拟，然后以搞职业标准给出图形形式结果。最近将把更多的这样具有特定用途的模块加到 Termoc-Calc 软件包中。

Termo_Calc 软件总是以 SYS 模块开始，该模块为每台计算机及其环境设置所设计（即与各种操作系统交互）。该模块通常也作为一种可访问所有基本和特定的模块的通信中枢。

除了这些基本的和特定的模块之外，两个应用编程界面 TQ 和 TCAPI 与 Thermo-Calc 软件/数据库系统随意地内部连接。这些界面是为要自己编程进行其他类型材料性质计算与材料工艺模拟的用户而设计，强大的 Thermo-Calc 引擎提供准确、可靠和快速热力选计算，其界面也服务于其他软件包中与 Thermo-Calc 软件/数据库相关的工具箱（如 MATLAB 软件包中 TC-工具箱）以便将热力学计算与模拟用于很多不同领域。通过各种编程界面利用 Thermo-Calc 引擎可建立自己的程序。

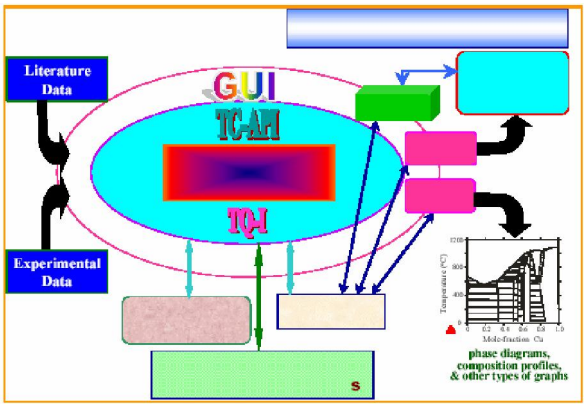


图 1-4 使用 Thermo-Calc 引擎可建立自己的程序

通过这些基本和特定模块，所有用户都可经常使用热力学计算与模拟以及进行自己的估价工作，也大力鼓励用户在各种研发活动中使用应用程序界面。

1.6 各类硬件上 Thermo-Calc 软件包的有效性

1.7 使用 Thermo-Calc 软件包的好处

Thermo-Calc 是计算热力学领域中最强大和最柔性的软件包之一，已广泛用于所有各种复杂异质想平衡和多元相图的热力学计算。大多数平台可以使用，所以 Thermo-Calc 软件提供以基本热力学必需品，如多元系平衡计算、相与性质图、热力学因素（驱动力）。

Thermo-Calc 由平衡计算、相与性质图计算、热力学量制表、数据库管理、模型参数估价、试验数据处理和专业图形表达的后处理等几个基本和特定模块。

Thermo-Calc 能够通过在各种试验信息基础上严格估价来有效地建立自己可靠数据库。

Thermo-Calc 提出了具有最快和最稳定数学和热力学解的标准热力学计算引擎，要求精确计算热力学量的任何其它软件（用户编写应用程序或第三方的软件包）可便利地和有效地插入 Thermo-Calc 引擎。目前有两个有力的应用编程界面（即 TQ 和 TCAPI）和 MATLAB 软件（即 TC-MATLAB 界面）中一个全面的热力学计算工具箱。

Thermo-Calc 的优点是其多重用途，同一公司、研究所或大学的几个部门可将软件包用于不同目的，已通过包括通信、航空、运输和制造业的应用实例证明。使用 Thermo- Calc 提供的工具，可优化材料工艺来以更低成本产生更高产出，更好产品。

第 2 部分 如何成为 Thermo-Calc 专家

TCSAB 与其伴随产品极大感激使用和改进 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件系列的各种软件/数据库/界面产品的信息。这样的信息包括连续评说、出版物、报告、意见和改进建议。所有合适的信息鼓励新的和改进的特性用于将来的软件/数据库/界面产品和服务。

此外，提供的技术支持和咨询服务来帮助用户成为 Thermo-Calc 和 DICTRA 专家。

本部分提供一些有效使用 Thermo-Calc 的提示，包括：

- 如何容易地使用 Thermo-Calc 用户指南；
- 如何适当地安装和维护 Thermo-Calc 软件/数据库/界面软件包；
- 在研发活动中如何使用 Thermo-Calc 软件/数据库/界面软件包；
- 如何迅速从 TCSAB 与其伴随产品中获得各种支持和咨询服务；
- 如何建设性地帮助 TCSAB 进一步改进各种软件/数据库/界面产品。

2.1 如何容易地使用本用户指南

本用户指南是 Thermo-Calc 手册的第一部分，应于第二部分（Thermo-Calc 实例）一起使用。当前的

手册版本主要基于 2002 年 11 月发行的版本 P。

本手册具有部分-节-亚节结构，整个文件有 18 个独立的部分，其中，前 4 部分给出 Thermo-Calc 软件/数据库/界面的总体介绍和可能使用的数据库的详细描述。接下来的 11 部分主要给出各种 Thermo-Calc 模块和工具，最后 3 部分提供一些主要参考、有用的附录和有帮助的索引。模型/数据处理、计算/模拟或结果展示的每个特定模块从为方便用户的所有执行命令栏开始。

不熟悉 Thermo-Calc 的人应从第 2 和第 3 部分开始。已经具有一些经验的人可从特定模块（如 5-15 部分）开始。也推荐回顾第 1-4 部分找到更新信息。

第 1 部分给出 Thermo-Calc 软件/数据库/界面软件包的总体介绍，包括开发历史、总体结构和可用性，也给出软件包的实例，产生满足用户需求的建议和给出从研发活动中获益的思路。

第 2 部分给出一般意义上的提示，包括如何使用软件包，如何称为 Thermo-Calc 专家来从软件包的使用中完全获益，以及如何与 TCSAB 及其伙伴联系。

第 3 部分展示整个 Thermo-Calc 软件/数据库/界面软件包的总体看法。类似于全面的参考手册，在基本概念、进一步发展策略、可能的功能和可能的应用等方面更详细。这部分的评述有助于用户获得软件包的全貌。当用用户寻找特定模型的一些通常术语的描述，数据库或模块交互作用时这部分特别有用，同时用户阅读本手册其它部分时这部分可用于交叉参考。

第 4 部分给出与 Thermo-Calc 软件（TCC 和 TCW）和各种应用编程界面一起使用的数据库的描述。这也有助于确定对研发项目以及设计开发自己数据库，进一步访问其它数据库是否必要。

第 5 部分到第 15 部分广泛记录所有各种 Thermo-Calc 模块和相关工具。可选择需要的适当部分。这些部分按用途来安排。普通计算通常访问的部分先出现，要理解的模块在其后。详细解释了 Thermo-Calc Classic 软件包每个模块中的所有可用到的命令。类似于所有各部分，首先编排重要的、频繁使用的命令，接着保留下来。

第 5 部分描述如何使用数据库模块(TDB)的方针。第 6 部分指向数据库管理或要创建用户指定数据库、数据序列或数据文档的有经验拥护。本部分包括一些如何组织数据库的例子。此外，简要提及 TDB 模块的 DICTRA 扩展。

第 7 部分通过使用指标模块显示如何对各种物质或化学反应的所有各种热力学性质制表，并以图形形式提供结果。

第 8 部分描述最重要的模块——平衡计算模块（POLY），在制定指定选项的在一维（STEP）或二维（MAP）空间的单个点上进行的多元不均匀平衡的复杂热力学计算。在此特殊部分，在进入所有各种 POLY 模块之前将先给出，在 Thermo-Calc 平衡计算和模拟中如何定义各种热力学体系或问题的一些进一步信息。特定的例子显示如何进行具有一些很困难的相或现象（如有序/无序和水溶液）的各种计算。这部分也给出纷争解决的一些有用的提示，并提供对一些关于平衡与相计算的频繁问题的解答。

第 9 部分在 POLY 模块后介绍后处理模块（POST）按高专业的图形标准来方便显示成功计算，这部分解释了依据实验结果绘制相图和多个其它性质图是多么容易和有效。也解释了使用由网络浏览器可以得到的多个插件程序产生 vrml（虚拟事实模型语言）程序文件和产生的 3D 图形的程序。

第 10 部分（一些特殊模块）介绍了计算和绘图的一些方便易懂的方法。这些模块简单化某些类型的计算和相图、性质图的图形表达。利用这样的易于使用模块，用户仅需要回答自动计算和绘图程序的一些简单问题。这些程序有：二元相图计算的 BIN 模块、三元相图计算的 TERN 模块、势图计算的 POT 模块、凝固模拟的 SCHEIL 模块、Pourbaix 图和性质图计算的 POURBAIX 模块和稳态反应计算的 REACTOR 模块。这些特殊模块在 Thermo-Calc 软件包的一些最近版本中可以得到并在将来将建立更多。

第 11 部分（Gibbs 能模块 GES）提供对所有已经实现的热力学模型进一步全面描述。广阔的物理化学条件下各种相的可靠的热力学模型的执行到 Thermo-Calc 软件/数据库/界面软件包中，是达到对实际的复杂体系或问题成功计算或模拟的基本步骤。进一步地，这部分显示，在 Thermo-Calc 软件核心如何按照数据结构、热力学量计算和模块用户界面构建这些模型。存储在 GES 中的信息为相结构、热力学性质、定义的符号、模型选择等。有对所有各种命令的广泛描述来于模型交互作用和访问数据。

第 12 部分介绍优化模块（PARROT）来显示其强大的评价特性，和给出一些有帮助的提示。用使用各种模块进行数据处理、平衡与相图计算和图形展示的丰富经验，这个模块引导数据评价以便改进可以得到的数据库或定制的数据列或数据文件。本手册首先显示如何准备实验数据文件、如何创建图形实验文件（EXP）、如何产生系统设置文件（SETUP）和如何保存与交互访问优化文件（PARROT）。接下来，实例显示利用命令、特定模式和处理优化的各种程序。在接下来的部分（第 13 部分）详细介绍和描述了作为 PARROT 命令的 ED-EXP 模块。模块与模块（如 GES、TAB、POLY 和 POET）之间连接、DICTRA 软件中的可用性、TQ 和 TCAPI 应用编程界面、TCW 图形用户界面和 TC-MATLAB 界面的简要描述也是必要的。

第 13 部分为编辑-实验模块（ED-EXP），显示如何以适当的方式根据组织数据栈、设定相对分数，包含和不包含数据点、设定交替条件等编辑实验数据点以便进行良好优化。这个模块主要与 PARROT 和 POLY 模块连接，包括一些同样的基本命令（要必要的话，参阅第 8 和 12 部分）。

第 14 部分（系统实用模块 SYS）解决为出错信息输出和对环境单元绘图配置 O/S（操作系统）相关参数的问题。此外，全面解释了如何创建、修改和维护宏（MACRO）文件。也解释了一些独特的额外工具如修补/迹线/停止系统调试和 HP-计算器等。

第 15 部分给出了 Thermo-Calc 如何使用一种特殊的数据处理语言工具在 POST 模块中表达图形，也就是 DATAPLOT 图形语言。POST 模块使用该语言于各种计算/模拟模块进行通讯。这部分详述了如何安排所有各种图形设置和如何处理各种类型计算和模拟结果。当执行一系列 DATAPLOT 表达式时可获得 Thermo-Calc 图的高专业性图形表达。也给出了 DATAPLOT 文件和该语言应用的一些实例

第 16 部分给出了一些位于局域库中的软件、数据库、界面和应用程序的主要的参考。此外，用户也可提供相关的自己成功出版和手稿到 Thermo-Calc 将来版本的各式各样的应用程序。若用户捐献他们研究论文和技术报告给 Thermo-Calc Software AB，不久将来 Thermo-Calc 参考书也可提供给本手册。

第 17 部分介绍 9 个附录来给出有帮助的提示和得到一些有价值的反馈，包括在不同计算机平台上安装 Thermo-Calc Classic 软件包的指导、各种 Thermo-Calc 文件类型及其关系的评述和 Thermo-Calc Classic 快速参考卡。此外，为请求 TCSAB 软件/数据库/界面的进一步信息、请求 TCSAB 咨询任务、报告程序缺陷/问题、提供用户建议和请求 Thermo-Calc 课程提供一些表格。这部分也提供在各种工作环境下如何高质量、专业地表达 Thermo-Calc 图的一些建议。即使用户可由自己的图形设置偏爱，这些提示可建议更好的解决办法。

第 18 部分将 Thermo-Calc 用户指南中所有重要术语和各种模型和场所的所有可用的名令编入索引中，也将图形和表的清单编入索引的最后。

最后，请注意，以前可以得到的但是不常用的或有用的特征或命令中的一些可能没有，因此，不再包括本版本手册中。此外，已经执行但不还没有广泛测试或全面测试的一些模型和数据库，本手册可能描述了。这些额外的特性 2002 年 11 月发布的版本中可能不全能够得到，例如，聚合物的 Flory-Huggin 模型可以得到，但软件包中没有提供数据库，在这种情况下，请耐心等待当前版本的后续补丁（持有对当前版本有效和适当的许可的人在 TCSAB 的网址上下载，执行将是可行的）或等待下亿个版本的预先发行（对特殊请求）。

2.2 如何安装和维护 Thermo-Calc 软件包

2.2.1 许可要求

2.2.2 安装程序

2.2.3 维护当前和以前版本

2.2.4 使 TCC 执行更方便

2.3 如何成为 Thermo-Calc 专家

Thermo-Calc 和 DICTRA 软件/数据库/界面包的所有用户是并将总是 Thermo-Calc Software AB 的支持者。

？ 他们使用职业产品作为研发活动中有效而可靠工具，并作为教学实践中先进而艺术的教育必需

品。

- 他们通过提出有价值的建议、报告缺陷和问题、参与项目开发、引导 TACB 本身与客户的咨询、对新的和预期的客户安排局部训练程序、提供期刊发表物和其它参考、参加讨论会与用户会议等等对开发产品和履行服务成为重要的贡献者。
- 他们作为大学、政府机构、个人研发和咨询部门中专业产品有价值的促进者，帮助建立高级人员、问题解决者、顾问和客户之间个人和专业网络。
- 他们常常在各种科技协会与工业团体起领导作用，并作为计算热力学与动力学的领先者和专家（计算热力学与动力学用于材料设计与工程、材料制造与应用、自动化和宇航工业、电信、能量生产与利用、重型 /精确器械与轻装备、化工、矿业、环境保护、核燃料核废料管理、食品管理等）

非常鼓励并将尽最大努力帮助所有用户成为在研发和教学中使用这些软件包的专家，建议如下。

2.3.1 从 TCSAB 与其世界各地的代理获得迅速技术支持

2.3.2 日常使用各种 Thermo-Calc 功能

一个 Thermo-Calc 新用户可开始于特定的模块（BIN、TERN、POT、POURBAIX 和 SCHEIL）来进行相图和性质图的计算。存储在安装区域并在宏文件 Thermo-Calc 实例中给出的（*.TCM）中的标准例子给出了各种基本模块（SYS、TDB、GES、POLY、POST、PARROT、ED-EXP）和特定模块的所有各种用法说明，用户可将这样示范性的宏文件拷贝导所希望的目录下，以便为用户指定的应用程序作适当的修改（对温度、压力、成分和其它条件）后指导其它期望的计算。

进行日常研发和教学活动的同时，可经常将 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件/数据库软件包用作可靠的有效的工具进行各种热力学计算和动力学模拟。软件包强大的功能将提供最快速和最精确的热力学平衡和动力学路径的描述，并帮助你理解各式各样的材料体系和材料工艺中出现的复杂问题和现象。

获得足够的使用计算和模拟模块的经验后，可进入对感兴趣的体系进行严格评价的阶段。利用自己的实验结果和所访问的特定材料体系于材料工艺的文献信息，可最优化修改一些已存在的数据，并可容易地建立自己的数据库/数据序列/数据文件。

若有兴趣在 Thermo-Calc 引擎（通过 TQ/TCAPI 应用程序编程界面）插入自己的研发工具感，可编写材料性质计算和材料工艺模拟的程序，可仿照 TQ/TCAPI 编程指导与例子中的简单例子来进行。对材料性质计算、材料工艺模拟和材料工程控制，也可使用 MATLAB®软件包中 TC 工具箱。

2.3.3 以专业的和高质量的标准提交结果

具有一些使用 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件包的经验，不久可建立自己喜欢的常规和方式将计算与模拟结果包含在各种科技出版物、技术报告和会议演讲中。

附录 D（Thermo-Calc 结果的专业性表达）概述对如何以专业的和高质量的标准作为表格和图形形式提交计算和模拟结果（来自使用 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件包）的一些建议。在文字文件化、数据处理和图形处理的现代先进软件的帮助下，依据个人喜爱，可容易地且有效地编辑所得计算/模拟表（来自 TAB 模块）和图（来自 POST 模块）。

2.3.4 通过各种渠道相互交换经验

Thermo-Calc 软件 AB 高度重视你在各种研发和教学活动中应用 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件/数据库/界面软件包的知识、专门技术和建议，并将极大感激了解你的成功存储和独特的例子。多个良好通道与 TCSAB、我们的代理、开发/顾问伙伴以及世界各地用户广泛交流使用的经验。

第 3 部分 Thermo-Calc 软件系统

3.1 Thermo-Calc 软件系统的目标

Thermo-Calc 是一个进行所有各种热力学计算通用而柔性系统，与各种数据库和界面相连接，代表 Thermo-Calc 软件/数据库/界面软件包或 Thermo-Calc 数据栈。Thermo- Calc 软件包最重要的目标是进行用于科学和工业的有效而快速的热力学计算。

由软件系统可提供的体系平衡态的信息对求解很多真实问题来说是基本的，这些问题覆盖了从化学、冶金、汽车、宇航和电子工业的材料设计与工艺开发，到自然与环境工程中的资源开发、能量转换和废料管理。热力学数据栈的一个重要特点是它也提供一种与试验工作相比容易的方法研究平衡如何被外部因素作用。此外，计算机化的热力学数据栈同手册相比在提供给用户以自适应的、可靠的和最新的数据方面有一个最大优点。

一个普通的热力学数据栈必须由传统上认为十分例的大量领域中的数据，这些领域包括冶金、溶体化学、合金、高温气相平衡和地理。在大多数应用中，组元数如此之大以至于平衡只能用计算机软件计算。Thermo-Calc 数据栈系统试图提供一个易于学习和用于所有热力学计算的单个软件系统。

连同 Thermo-Calc 软件系统一起，使用某些热力学模型的巾帼各种严格评价的热力学数据库经常用于多个用途，如将 SGTE SSUB/SSOL 数据库用于无机和冶金体系的物质和溶体，将 TCFE/FEDATA/TCNI 数据库用于钢和合金将 TCAQ/AQS 数据库用于水溶液等。SGTE 数据库是一个通用热力学数据库，它描述从 298.15K 到只有气体稳定的温度范围内各种成分的物质和相的热力学性质。本指南的以后三部分（第 3、4 和 5 部分），将对各种可用的数据库给出更详细的描述，并说明如何使用和管理 Thermo-Calc 软件包中的数据库。

拥有 Thermo-Calc 软件包，用户可简单地对物质或反应的热力学数据制表，或计算复杂的化学、冶金和其它体系中的平衡。使用 Thermo-Calc 也能由自动图形程序计算和预测多元相图。

Thermo-Calc 主要目的之一是，用作计划和减少新的高成本的实验的需求。通过计算，可能预测限数进行的实验的结果，甚至可找到这样的计算，其结果可靠到足以直接使用。

Thermo-Calc 的使命是扩展为科学家和工程师在实验室或工厂中日常工作的强大的研究开发工具。

3.2 一些热力学术语的介绍

本节给出 Thermo-Calc 软件/数据库/节面包中使用的一些热力学术语的基本介绍和总揽。下面给出理解 Thermo-Calc 如何处理现实与热力学的起始点。

3.2.1 热力学

Thermo-Calc 用户由不同的知识背景，热力学一词可能对他们不具有不相同的含义。为了理解 Thermo-Calc 软件中使用的一些术语，这些术语将用传统热力学中的一般概念来解释。也将讨论这些描述如何扩展到传统热力学以外的情况。

值得记住的是，热力学是从两个很简单的观测衍生出来表象理论，这两个观测是热和功都仅是能的两种不同形式和热流从热物体到冷物体。这些观测是热力学第一和第二定律的简化形式，但是当然必须重新定义以便具有实际用途。

下面必须介绍描述物质的物理化学性质的一些概念，以便使热力学可用于实践。在第 11 部分（Gibbs 能体系模块 GES）和第 8 部分（平衡计算模块 POLY），将给出 Thermo- Calc 软件如何利用这样的热力学术语的更多细节。

3.2.2 体系、组元、相、组成、物种（System, component, phases, constituents and species）

热力学中，总是有一个与环境交换物质、热和功的封闭的或开放的**体系**，热力学体系由组元和相组成表现为均匀的（均质的）或不均匀的（异质的）状态。

组分是体系广义的实体，有时所称的组分是强调这样的事实，一个组分由一个具有某些特征化热力学性质的唯一名称，这些热力学性质为量、活度或化学势。平衡时，整个体系中组分的活度和化学势为常数。

在一个体系中，物质将总是出现在一个或多个稳定或介稳定**相**中（体系均质部分），在一定体积中，同种相经常出现在很多分开的地方，如空气中粉尘颗粒。**均质**意味着体系在成分、温度和压力方面是均匀的，并且各处具有相同结构。相比之下，**异质**体系至少有两相组成。

一相由其各组元的成分、焓、体积和其它性质来量化。相具有可能不同于组元的**组成**，组成具有可用组元和可能电荷表示的化学计量比，例如，凝聚相可能有一个象亚点阵或团簇（模型化为组成）一样的内部结构。

组成可以是元素[Fe，Si，C，O]或分子状的聚簇，聚簇可能是中性的[Fe_3C，FeSi，$Fe_{0.87}O$，SiO_2，H_2O，CH_3COOH]和带电的[Fe^{+2}，Fe^{+3}，HO^{-1}，$Fe(OH)_2^{+4}$]。所有这样的组成称作组元（species）。一种组元可以是一相或几相的组元，同时在一相中的出现可以是真的或想象的（来自模型的假设）。

为了近似表达一相中一个带电物质的化学计量比，将电子用作一特定组元，记为/-或 ZE，通常为相组成的一部分。Thermo-Calc 软件包将气体、液体和固相中的带电组成记为/-，将水溶液带电组成记为 ZE，。与这种特定指派相对应，带负电荷组元的化学计量比可表示为 H1O2/-或 H1O2ZE+1，带正电荷组元为 FE1/+2 或 FE1ZE-2。模型中使用的其它特定组元是空位，总是记为 VA。空位用作有空的位置的亚点阵的组成，空位的化学势总是设定为零。

空位和电子（气体、液体和固相中为/-，溶液中为 ZE）也作为数据库中特定元素的定义，在含水异质反应体系情况下，ZE（不是/-也不是 VA）也被看作 Thermo-Calc 软件中体系组元。

因此，一个体系组元通常是所定义体系（特别是合金）中的一元素，也可以是所定义体系中的一个存在组元（如 Cr-Fe-O 系中的 Cr2O3 和 FeO，水溶液相中的 HO2-1 和 FE+2），甚至所定义元素的适当的组合（如 Cr-Fe-C 系中的 CrC 和 FeC）也可定义为组元，电子作为元素组合组元（如气体混合相中的 H1O2/-1 和 Fe1/+2，或者水溶液相中的 H1O2ZE+1 和 FE1ZE-2）中的化学式的一部分，但是这样组元的参考态必须总是为 SER（标准参考态）

并不是不均匀（异质）反应体系中没有将 ZE 考虑为特定元素，则组元数等于体系中的元素数，而对于含水异质反应系，ZE 被认为是一个附加的体系组元，因此组元数等于体系中元素数加 1。

3.2.3 结构、亚点阵和位置

以上提到的相具有一定的结构，结构是广义的，因此甚至气体和液体也考虑具有结构。一种结构通常可用一个和几个亚点阵或位置来描述，以某种方式构筑相。相结构的重要性是给出了如何从其它物理性质来对热力学性质模型化的思想。

为解释这一点，可考虑热力学性质不简单依赖于相中组元数量的某一相。在多数情况下，相中都有内部自由度，例如气体中分子的形成或固体中亚点阵上的有序，在此情况下，按照相中或亚点阵中的组成而不是组元，来简化成分与相性质关系模型。相中组成的数可大于或小于实际组元数。

3.2.4 成分、构成、位置分数、摩尔分数和浓度(composition, constitution, site fractions, mole fractions and concentration)

体系的成分定义为整个体系中每种元素或组元的数量，而相的构成定义为各相中特定亚点阵上每种组成或组元的数量。体系的成分和相的组成都可以多种不同方法描述，表示成分或组成的变量的选择依据相的类型可以不同，然而，使用转换因素总是有共同的方法来表示不同类型成分或组成。

相的组成由相中或其亚点阵中组成的分数给出。Thermo-Calc 软件包中，为区别于**摩尔分数**（记为 X），总是以由多于一个亚点阵组成的相的组元**位置分数**（记为 y）表示，并区别于整个体系中总体摩尔分数（也记为 X）。位置分数定义为亚点阵中的位置被一定要素占据的分数，若一相具有几个亚点阵，则组成由每个亚点阵上每种要素的位置分数给定，若一相没有亚点阵，则位置分数与摩尔分数相同。每种元素、组元或组元的摩尔数或克质量通常表示这样的分数。

然而，一个水溶液体系需要广义的项目来描述其成分或组成，是由于传统的处理方法特别是用于水合化学。引入**浓度**概念是为了描述在一定温度与压力下溶剂的溶解能力或水中溶质组元的溶解行为。Thermo-Calc 软件包将单一亚点阵假设用于水溶液，因此，位置分数等同于含水相中组元的摩尔分数，此外，一个组元的浓度也可表示为重量摩尔浓度(molality)（m，溶解在 1kg 溶剂水中溶质的摩尔数）和摩尔浓度（molarity）（M，溶解在 $1dm^3$ 水溶液中的溶剂摩尔数）。

3.2.5 平衡态和状态变量

热力学仅处理处于平衡的体系，即在大量变量（如温度和成分）中处于相对于内部起伏为稳定的状态。在平衡态已经定义值或性质的那些变量称为状态变量，状态变量的其它例子是压力（P）和化学势（μ）。热力学提供可计算平衡时其它变量值的这些状态变量的大量关系。

状态变量有两种类型，容量变量和强度变量。容量变量的值如体积依赖于体系的尺寸，而强度变量

的值如温度独立于体系的尺寸。每种类型的状态变量有其它类型的补充变量，补充体积的变量是压力，而补充组元成分的变量是其化学势。

值得提到的是，组元的活度总能从使用简单数学关系中获得，也可能为活度或化学势选择方便的参考态。计算机上带有热力学数据栈的优点之一是，在大多数情况下，这样参考态变化可在没有打扰用户情况下内部处理。

若与环境交换的功限于压力体积功，体系平衡态可由准确地指定 N+2 个状态变量的值来获得，其中 N 时体系组元数。

注意，Thermo-Calc 软件中区分体系的组元和体系中相的要素（即组元），很多状态变量要求其中的一个或另一个。缺省时，元素定义为体系的组元，但这个定义可用 POLY 命令 DEFINE_COMPONENT 来改变。例如，若元素是 Ca、Si 和 O，另一套组元可定义为 CaO、SiO_2 和 O2。在纯水系，组元通常定义为 H2O 和 H+。然而，当使用这个命令时不改变组元数。

状态变量是为整个体系或体系中一个组元或特定置换相的一个组元或特定相中的一个要素（即特定亚点阵位置上的组元）定义的一个热力学量。

适于 Thermo-Calc 软件的基本强度变量和容积变量在表 3-1 中列出并简要描述，也将在以后的部分处理。

表 3-1 可用于 Thermo-Calc 软件的状态变量

名称	TC 中名称	TC 中单位	含义	备注（适用范围）
强度变量				
T	T	K, °C, °F	温度	整个体系
P	P	Pa, bar, psi	压力	整个体系
μ	MU(COMP)	J/mol, cal/mol	化学势	一体系组元
	MU(sp, ph)			溶体相中一组元
a	AC(COMP)	无量纲	活度	体系组元
	AC(sp, ph)			溶体相组元
	LNAC(COMP)		活度对数	自然对数的体系组元（lnAC=MU/RT）
	LNAC(sp, ph)			自然对数的溶体相中的组元（lnAC=MU/RT）
容量变量——能（整个体系或一相）				
V	V	m^3,dm^3,cm^2	体积	整个体系
	V(ph)			相
G	G	J/mol, cal/mol	Gibbs 能	整个体系
	G(ph)			相
A	A	J/mol, cal/mol	Helmholtz 能	整个体系
	A(ph)			相
U	*U*	J/mol, cal/mol	内能	整个体系
	U(ph)			相
H	H	J/mol, cal/mol	焓	整个体系
	H(ph)			相
S	S	J/mol/K Cal/mol/K	熵	整个体系
	S(ph)			相
C_p	HM.T	J/mol/K Cal/mol/K	恒压热容	整个体系
	HM(ph).T			相
C_v	HM.T	J/mol/K Cal/mol/K	恒容热容	整个体系
	HM(ph).T			相
D	DG(ph)	无量纲	驱动力	相（被 RT 除），注意与下标 *M, W, V* 或 *F* 一起使用
容量变量——成分（整个体系的总量/尺寸，或整个体系或相中的组元的量）				
n	N	mole	摩尔	体系中所有体系组元
	N(COMP)			体系中体系组元
	N(ph, COMP)			相中体系组元
	N(ph)			相
b	B	克（g）	质量	体系中所有体系组元
	B(COMP)			体系中体系组元
	B(ph, COMP)			相中体系组元

	B(ph)			相
x	X(COMP)	无量纲	摩尔分数	体系中体系组元
	X(ph, COMP)			相中体系组元
w	W(COMP)	无量纲	质量(重量)分数	体系中体系组元
	W(ph, COMP)			相中体系组元
x%	X%(COMP)	无量纲	摩尔百分数	体系中体系组元
w%	W%(COMP)	无量纲	质量百分数	体系中体系组元
in	IN(sp)	mole	输入摩尔数	进入体系的相组元
im	IM(sp)	克（g）	输入质量单位	进入体系的相组元
容量变量——组成成分（一相中亚点阵/位置上要素/组元总和）				
y	Y(ph,cons#sub)	无量纲	位置分数	相中以#和数字表示的亚点阵或位置中要素
特定量				
T_c	TC(ph)	K	居里温度	相
M_b	MAGM(ph)	无量纲	波尔磁子数	相

注意：下标可用于一些强度变量和所有容积变量，描述如下：

1）R 用作强度变量 MU、AC 或 LNAC 的下标，以便得到相对参考态计算值，如体系组元的 MUR(comp)，ACR(comp)和 LNACR(comp)，特定溶体相中组元的 MUR(sp, ph)，ACR(sp, ph)和 LNACR(sp, ph)。体系组元参考态由 SET_REFERENCE_ STATE 命令指定，其中必须指定参考相，同时要输入参考温度（通常为当前温度）和压力（通常为 1bar）。注意 MUR(sp, ph)= MU(sp, ph)，ACR(sp, ph)= AC(sp, ph)和 LNACR(sp, ph)= LNAC(sp, ph)。参考态更详细的内容请参考 2.1.13 节。

2) 标准下标如整个体系所有体系组元的 M(每摩尔组元)，W（单位质量/g），V（单位体积/m^3）或 F（每摩尔化学式）可配给下面所有的容量变量：

Z = G, A, U, H, S, V → ZM, ZW, ZV

注意这样具有下标的量是通过整个体系能量变量 Z 对 N 或 B 或 V 的一阶微分来计算的，例如

GM=∂G/∂N 每摩尔体系的 Gibbs 能（J/mol, cal/mol）

GW=∂G/∂B 每质量体系的 Gibbs 能（J/g, cal/g）

GV =∂G/∂V 每体积体系的 Gibbs 能（J/m^3, cal/m^3）

3）标准下标如特定相的 M(每摩尔组元)，W（单位质量/g），V（单位体积/m^3）或 F（每摩尔化学式）可配给下面所有的容量变量：

Z = G(ph), A(ph), U(ph), H(ph), S(ph), V(ph) → ZM, ZW, ZV, ZF

注意这样具有下标的量是通过相能量变量 Z 对 NP(ph)或 BP(ph)或 VP(ph)的一阶微分来计算的，例如

GM(ph)=∂G(ph)/∂NP(ph) 每摩尔相的 Gibbs 能（J/mol, cal/mol）

GW(ph)=∂G(ph)/∂BP(ph) 每质量相的 Gibbs 能（J/g, cal/g）

GV(ph) =∂G(ph)/∂VP(ph) 每体积相的 Gibbs 能（J/m^3, cal/m^3）

GF(ph) =∂G(ph)/∂NP(ph)*NA 每公式单位相的 Gibbs 能（J/mol, cal/mol）

（其中 NA 表示相公式中总原子数）

应注意到若相在体系中是不稳定的因此同时 NP(ph)等于零，G(ph)、A(ph)、U(ph)、H(ph)、S(ph)和 V(ph)都被赋值为零。根据各相使用的热力学模型，使用各项 Gibbs 能对体系当前成分的一阶微分精确计算 GM(ph)、AM(ph)、UM(ph)、HM(ph)、SM(ph)和 VM(ph)以及所有具有 W/V/F 下标的量并将其存储在工作区。

4）标准下标如一相的 M(每摩尔组元)，W（单位质量/g），V（单位体积/m^3）或 F（每摩尔化学式）可配给下面所有的容量变量：

Z = DG(ph) → ZM, ZW, ZV, ZF

理论上，这样的有下标的变量可通过相的能量变量 DG(ph)对 NP(ph)或 BP(ph)或 VP(ph)的一阶微分来计算，例如

DGM(ph)=∂DG(ph)/∂NP(ph) 每摩尔相的驱动力（J/mol, cal/mol）

DGW(ph)=∂DG(ph)/∂BP(ph) 每质量相的驱动力（J/g, cal/g）

DGV(ph) =∂DG(ph)/∂VP(ph) 每体积相的驱动力（J/m^3, cal/m^3）

DGF(ph) =∂DG(ph)/∂NP(ph)*NA 每公式单位相的驱动力（J/mol, cal/mol）

然而，请注意，程序中 DG(ph)从不直接计算，因此上述四个量不按这些方程计算。相反，使用 Gibbs 能对体系当前成分二阶导数精确计算这些特定相的驱动力量。

5）标准下标如整个体系中所有体系组元的 M(每摩尔组元)，W（单位质量/g），V（单位体积/m^3）或 F（每摩尔化学式）可配给下面所有的容量变量：

Z = N, N(comp) → ZM, ZW, ZV

Z = B, B(comp) → ZM, ZW, ZV

标准下标如特定相的 M(每摩尔组元)，W（单位质量/g），V（单位体积/m^3）或 F（每摩尔化学式）可配给下面所有的容量变量：

Z = N(ph, comp), B(ph, comp) → ZM, ZW, ZV

Z = NP(ph), BP(ph),VP(ph) → ZM, ZW, ZV

注意整个体系量的 NM 和 BW 总是为一个单位（因此在程序中没有必要对其求值）。NM 和 BW 都不能设定为条件。一些带有下标的容量变量表示某些特定量，如

NM(comp) = X(comp)	表示体系中组元的摩尔分数
NM(ph, comp) = X(pn, comp)	表示一相中组元的摩尔分数
BW(comp) = W(comp)	表示体系中组元的质量分数
BW(ph, comp) = W(pn, comp)	表示一相中的质量分数
BV	整个体系的密度

相量变量 NP(ph)、BP(ph)和 VP(ph)以及他们所有带有下标 M/W/V 的量，都不应用作条件。相反，可使用命令 CHANGE_STATUS 来设定相关条件，如 CHANGE_ STATUS phase <phase> = fix <amount>。

6）体系或体系指定相的（恒压或恒容）热容为状态变量焓对温度的偏微分，两个变量之间使用点“ . ”符号（参见 3.2.56 节导出变量中的详细描述）

HM.T = ∂HM/∂T	恒压或恒容体系的热容
HM(ph).T = ∂HM(ph)/∂T	恒压或恒容相的热容

7）导出成分变量 X%(comp)、W%(comp)、IN(sp)和 IM(sp)只在 TQ 和 TCAPI 界面使用。

8）特定量 TC(ph)和 MAGM(ph)不能用作条件。

9）一些电解液/离子溶体相（如水溶液、气体混合物和液体混合物）中组元的化学势和组元为特定处理状态变量，记为 MU(sp, ph)、MUR(sp, ph)、AC(sp, ph)、ACR(sp, ph)、LNAC(sp, ph)和 LNACR(sp, ph)。要求适当定义组元的参考态，参见 3.2.12。

3.2.6 导出变量

通过状态变量或其他函数的一些数学表达式，状态变量可用于定义附加函数或变量，这样的函数或变量为偏微分或导出变量的参考。

实际上，表 3-1 列出的一些变量就是导出变量，如 HM.T 和 HM(ph).T，其中使用了点“ . ”符号。作为 Thermo-Calc 软件的重要特点，通过使用两个状态变量之间的点“ . ”符号可求一个状态变量对其同变量的偏微分的值。然而点之后的状态变量必须设定一个条件，例如

HM.T = $(\partial HM/\partial T)_{condition}$	恒压下体系热容 C_p 或恒容下体系热容 C_v
HM(ph).T= $(\partial HM(ph)/\partial T)_{condition}$	恒压下相的热容 C_p 或恒容下相的热容 C_v
H.T = ∂H/∂T	体系热容乘以组元总摩尔数，即 恒压下 C_p*N=∂H/∂T，恒容下 C_v*N=∂H/∂T
H(ph).T = ∂H(ph)/∂T	相的热容乘以相的总摩尔数，即 恒压下 C_p(ph)*N=∂H(ph)/∂T 恒容下 C_v(ph)*N=∂H(ph)/∂T
VM(ph).T = ∂VM(ph)/∂T	相的热膨胀系数（已经乘以其摩尔体积），即 α*VM(ph)=∂VM(ph)/∂T
VM(ph).P = -∂VM(ph)/∂P	相的等温压缩系数（已经乘以其摩尔体积），即

κ*VM(ph)=∂VM(ph)/∂T

V(ph).T = -∂V(ph)/∂T　　相的热膨胀系数（已经乘以相体积），即 α*V(ph)=∂V(ph)/∂T

V(ph).P = -∂V(ph)/∂P　　相的等温压缩系数（已经乘以相体积），即 κ*V(ph)=∂V(ph)/∂T

VM.T = -∂VM/∂T　　相的热膨胀系数（已经乘以相体积），即 α*V(ph)=∂V(ph)/∂T

VM.P = -∂VM/∂P　　体系的等温压缩系数（已经乘以其总体积），即 κ*VM=∂VM/∂T

V.T = -∂V/∂T　　体系的热膨胀系数（已经乘以总体积），即 α*V=∂V/∂T

V.P = -∂V/∂P　　体系的等温压缩系数（已经乘以其总体积），即 κ*V=∂V/∂T

T.X(comp) = ∂T/∂X(comp)　　T-X(comp)相图上相边界对体系中组元摩尔分数的斜率

T.W(comp) = ∂T/∂W(comp)　　T-X(comp)相图上相边界对体系中组元质量的斜率

T.W(ph, comp) = ∂T/∂W(ph, comp)　　T-X(comp)相图上相边界对相中组元摩尔分数的斜率

P.T = ∂P/∂T　　T-X(comp)相图上相边界斜率(注意必须先计算与相总体的平衡)

有限地讲，这些带有标准下标的能量变量如表 3.1 列出的整个体系中所有体系组元或特定相的 M(单位摩尔组元)、W（单位质量/g）V（单位体积/m^3）或 F（百分数）都是导出变量，已经用一些状态变量对其它独立变量的一阶或二阶偏微分明确定义。若体系中的相是不稳定的，这样相的导出量还要用程序精确计算，并存储于工作区。参见下标的评述。

此外，那些带有标准下标的成分变量如表 3.1 列出的整个体系中所有体系组元或特定相的 M(单位摩尔组元)、W（单位质量/g）V（单位体积/m^3）或 F（百分数）也都是导出变量，由一些独立状态变量表达式来定义，例如

NM = N/N　　（不总是一个单位）

NW = N/W　　单位质量体系的摩尔数（mol/g）

NV = N/V　　单位体积体系的摩尔数（mol/m^3）

BM = B/N　　每摩尔体系的质量（不总是一个单位）（g/mol）

BW = B/W　　（不总是一个单位）

BV = B/V　　整个体系的密度（g/m^3）

NPM(ph) = NP(ph)/N　　每摩尔体系的相摩尔数

NPW(ph) = NP(ph)/B　　单位质量体系的相摩尔数（mol/g）

NPV(ph) = NP(ph)/V　　单位体积体系的相摩尔数（mol/m^3）

BPM(ph) = BP(ph)/N　　每摩尔体系的相质量（g/mol）

BPW(ph) = BP(ph)/B　　单位质量体系的相质量

BPV(ph) = BP(ph)/V　　单位体积体系的相质量（m^3/ mol）

VPM(ph) = VP(ph)/N　　每摩尔体系的相体积（m^3/mol）

VPW(ph) = VP(ph)/B　　单位质量体系的相体积（m^3/g）

VPV(ph) = VP(ph)/V　　单位体积体系的相体积

NM(comp)=N(comp)/N=X(comp)　　体系中组元的摩尔分数

NM(ph, comp)=N(ph, comp)/NP(ph)=X(ph, comp)　　相中组元的摩尔分数

X%(comp)= X (comp)*100　　体系中组元的摩尔百分数

BW(comp)=B(comp)/B=W(comp)　　体系中组元的质量分数

BM(ph, comp)=B(ph, comp)/B(ph)=X(ph, comp)　　相中组元的质量分数

W%(comp)= W(comp)*100　　体系中组元的质量百分数

表 3-1 列出的所有状态变量可用于通过使用 ENTER_SYMBOL 命令定义用户感兴趣的量的附加函数或变量，韩书包存在 Thermo-Calc 工作区，任何要求函数值的时候，将对所有函数求值，因为它们互相依赖。只有当输入时或若以 EVALUATE 命令明确命名变量才求值，并且无论何时都可能以新表达式输入一变量，变量可用作 SET_ COMNDITION 命令中的条件值。也要注意由 GES、PLOY 或 PARROT 模块与定义的或者高级模块（POURBAIX 和 SCHEIL）预定义的或者用户输入的这些导出变量都存为特定符号（变量、函数或表），每个符号有一个唯一的名称，该名称必须以字母开头，最多有 8 个合法字符（包括大小写字母、数字和下划线“ _ ”，但不包括其它特殊字符，如括号“（”和“）”、加号“ + ”、减号“ - ”、斜杠“ / ”或“ \ ”、点“ . ”）。

依据用户不同的目的，有很多定义附加导出变量和函数的不同方法，例如，体系中组元的活度系数、两相之间组元的分配系数可定义如下：

RCNAME =ACR(component)/X(component)

PCNAME =X(phase1, component)/X(phase2, componenet)

重要的是注意溶体相中一组元的活度系数依赖于组元的参考态和标准态上模型定义（参见 3.2.13 的参考态与标准态的更多定义）。当组元的标准态与置换溶体（如气体和液体，相中所溶解的组元可互相代替，占据相同的位置，同时一相可能以纯组元存在）中“ 纯组元 ”定义相同，组元的活度系数可计算如下：

RCname =ACR(species, phase)/Y(phase, species)

若相中具有多于一个亚点阵同时相组元的参考态不能由“ 纯组元 ”给出，如昨我幸得 FCC[$(Fe)_2$(C, N, CA)]中的 C 的最终成分为 50%C 加 50%Fe，则所有相组元的化学势和活度将不准确定义。

对于水溶液相，不论何时使用模型（如 SIT、HKF 和 PITZ），溶质与溶剂的参考态与标准态在 Thermo-Calc 软件中以特定方式适当定义。溶剂的参考态设定为纯水，与其标准态相同（依据拉乌尔定律）。溶质组元参考态设定为纯组元，而其标准态定义为“ 单位重量摩尔浓度（1kg 溶剂中溶解 1 摩尔）的假定态但其中每分子的环境与无限稀释相同 ”（依据亨利定律）。在这些定义下，溶质与溶剂的活度系数都可计算如下：

RCH2O =ACR(H2O, aqueous)/Y(aqueous, H2O)　　（溶剂）

RCspec =AI(species, aqueous)/ML(aqueous, H2O)　　（溶剂）

= ACR(species, aqueous)/Y(aqueous, species)* Y(aqueous, H2O)

其中，AI 为从模型中计算的溶质组元，ML 为组元的重量摩尔浓度。

由于对提出的水化学、材料腐蚀、化工、地球化学、环境工程等方面所感兴趣的计算量的特定要求，在 Thermo-Calc 软件水溶体相以一种能充分理解的方法处理。用于其它相的所有标准态变量可直接用于水溶体相。此外，定义为状态变量函数的一些附加导出变量对于相是必要的，本软件（特别在 POURBAIX 模块中）预先定义一些导出变量作为水溶体相的指定符号。

表 3-2 列出并简要描述了 Thermo-Calc 软件预先定义的水溶体相的导出变量的一些例子。因为状态方程（EOS）表达式，纯溶剂 H_2O 的标准热力学性质和传输性质必须等同于纯气体 H_2O，气体混合相的一些导出变量也列于此表中。在一定温度-压力-成分条件下，一种水溶体相可与稳定起体混合物相或标准水蒸气相平衡。

表 3-2 为水溶体和气体混合相预定义的导出变量

名称	TC 中 Mnemonic	TC 中可能单位	含义	备注（适用范围）
水溶体相				
pH	PH	无量纲	酸性	水溶体相的，PH=-log(AC(H+,AC))
Eh	EH	V, mV	假定电子势	水溶体相的，Eh=u(ZE)/96485.309
pe	PE	无量纲	假定电子势的对数	水溶体相的，pe = u(ZE)/(2.3025851*RT)

Ah	AH	KJ, kcal	每个电子的热力学亲合力	水溶体相中相对于标准氢电极的氧化还原对，Ah= u(ZE)
y_w	YH2O	无量纲	摩尔分数	水溶体相中溶剂(H_2O)的，YH2O=Y(AQ, H2O)
N_w	AH2O	摩尔	摩尔数	1.0kg 溶剂 H_2O 的，AH2O = 55.508435
N_{sp}	NSH2O	摩尔	摩尔数，NS(AQ, H2O)	水溶体相中溶剂(H_2O)的，NS(AQ, H2O) =YH2O*NP(AQ)
	NS#		摩尔数，NS(AQ, sp)	水溶体相中溶质组元的，NS(AQ, sp) =Y(AQ,sp)*NP(AQ)
m	ML#	Mol/kg_H_2O	摩尔浓度，ML(AQ, sp)	水相中溶质组元的，ML(AQ,sp)=Y(AQ,sp)*AH2O/YH2O
*m**	TIM	当量摩尔浓度	总摩尔浓度	水溶体相中溶质组元的 TIM=sum[ML(AQ, sp)]$_{ions}$+sum[ML(AQ, sp)]$_{complexes}$
m_i	TIC#	当量摩尔浓度	总离子浓度，TIC(AQ, sp)	水溶体相中阳离子的 TIC(AQ, spI) =sum[ML(AQ, spJ)*V(spI-inspJ)]
I	ISTR	无量纲	离子强度	水溶体相的 ISTR=1/2*sum[ML(AQ, sp)*，Z(AQ, sp)**2
γ	RCH2O	无量纲	活度系数，RC(H_2O,AQ)	溶剂(H_2O)的， RC(H_2O,AQ)=ACR(H_2O,AQ)*YH2O
	RC#		活度系数，RC(sp, AQ)	溶质的，RC(sp, AQ) =ACR(sp, AQ)/Y(AQ, sp)*YH2O
α_i	AIH2O	无量纲	活度，AI(H_2O, AQ)	溶剂的，AI(H_2O, AQ)=ACR(H_2O, AQ)
	AI#		活度，AI(sp, AQ)	溶质的，AI(sp, AQ)=ACR(sp, AQ)*AH2O
	LOGAI#		以 10 为底的活度对数 Log AI(H_2O, AQ) Log AI(sp, AQ)	溶质或溶剂的 Log AI(H_2O, AQ)=log10[AI(H_2O, AQ)] Log AI(sp, AQ)=log10[AI(sp, AQ)]
α_w	AW	无量纲	活度	水溶体相中 H_2O 的，AW=ACR(H_2O, AQ)
ϕ	OS	无量纲	渗透系数	水溶体相的 OS= -55.508435*lnAW/TIM
At1	AT1	当量 mol/kg_H_2O	滴定碱度（定义 1）	水溶体相的，一般定义为甲基橙滴定终点（ph=4.5）碳酸盐和碳酸氢盐的当量摩尔浓度。
At2	AT2	当量 mol/kg_ H_2O	滴定碱度（定义 2）	水溶体相的，一般定义为甲基橙滴定终点（ph=4.5）碳酸盐和碳酸氢盐加硫酸的当量摩尔浓度。
气体混合相				
γ	RA#	无量纲	活度系数，RA(sp,GAS)	气体混合物中气体组元的 RA(sp, GAS)=function(Y, T, P)
γ*	RF#	无量纲	逸度系数，RF(sp, GAS)	在 TP 下纯气体组元的 RF(sp, GAS)= function(T, P/V)
f	FUG#	pa, bar, psi	逸度，FUG(sp, GAS)	气体混合物中气体组元的 FUG(sp,GAS)=RA(sp, GAS)*RF(sp, GAS)*Y(GAS, sp)*P
f	TFUG	pa, bar, psi	总气体逸度	气体混合物相的，TFUG=sum[FUG(sp, GAS)]

上表列出的水溶液相的所有这样的导出变量已由 POURBAIX 模块预定义，然而，由于软件的语法规则，各种独立含水组元的那些量定义名后跟数字，如 NS#、ML#、TIC#、RC#、LogAI#（同样适用于 RA#、RF#和 FUG#）。

3.2.7 Gibbs 相规则

Gibbs 相规则这样描述一个体系的平衡

$$f=N-M+2$$

其中，f 是自由度，N 是体系组元数，M 是最大稳定相数。

若没有指示稳定相，Gibbs 相规则要求用户设定 N+2 条件，以便计算平衡。平衡体系中稳定相最大数目为 N+2。

规则也意味着，在具有 M 个稳定相的区域，可改变独立状态变量 $f=N-M+2$ 的值并还具有相同数目的稳定相。换句话说，若有 M' 个稳定相存在并且强度变量数（$I=M-M'$）在此区域设定为常数，$f=N+2-M'$ 个状态变量可独立变化。

若 $M'=N+2-I$[即 $f=N+2-M'-I=0$]，因为仅能为所有变量的单一值，存在定义**不变平衡**的零自由度。这个例子是变温度与压力的一元系（即 0=1+2-3=0）或常压的二元系（0=2+2-3-1）的三相平衡系综。

若 $M'=N+2-I-1$[即 $f=N+2-M'-I=1$]，存在一个自由度，在稳定相只依赖于一个状态变量时的不变平衡出现这种情况，这方面的例子是变温度和变压力的一元系（即 1=1+2-2-0）或常压力的二元系（即 1=2+2-2-1）

中两相平衡系综。

3.2.8 状态的热力学函数

依据热力学第一定律和第二定律，已经引入了状态的大量热力学函数（特征状态函数）

$$dG = -SdT + VdP + \sum_i \mu_i dN_i - Dd\xi \text{，} \quad dA = -SdT - PdV + \sum_i \mu_i dN_i - Dd\xi$$

$$dU = TdS - PdV + \sum_i \mu_i dN_i - Dd\xi \text{，} \quad dH = TdS + VdP + \sum_i \mu_i dN_i - Dd\xi$$

在驱动力 D=0 也即 $Dd\xi=0$ 时这些特征状态函数可简化平衡状态的描述。与其它任何变量相反，使用特征状态函数的优点依赖于所考虑的体系如何控制：

- 控制体系的温度、压力与成分使 Gibbs 能（G）成为最有用的函数，因为 G 在平衡时最小；
- 控制体系的温度、压力与成分，使平衡时 Helmholtz 能最小；
- 控制体系的熵、体积和成分保证平衡时内能最小；
- 控制体系的熵、压力和成分保证平衡时焓（H，与体系热含有关）最小。

3.2.9 具有多相的体系

热力学可用于仅有一相或有多相的体系。Gibbs 相规则给出给定组元数的定义体系中稳定相的最大数目。重要的是要实现一个相的性质完全独立于体系中其它相的性质。因此，可为每相单独定义 Gibbs 能，整个体系的 Gibbs 能为每个稳定相的 Gibbs 能与其数量乘积的和。

Thermo-Calc 软件使用 Gibbs 能最小化技术（见 3.2.17 节）计算多元和多相中最稳定相系综，其中通过数学和热力学解自动满足质量平衡方程、质量作用方程和电子守恒方程。

表 3-3 列出 Thermo-Calc 软件/数据库/界面包和当前模型与相关数据库能处理的各种类型的相。

表 3-3 Thermo-Calc 软件处理的各种相

相类型	相举例	可用模型	数据库举例
纯化学计量比相	纯金属	适当 EOS	PURE
	纯化学计量比氧化物，硫化物、氢氧化物、硅化物等	适当 EOS	SSUB
	高压下纯化学计量比凝聚物质	Murnagham Birch-Murnagham	GEO、GEOCHEM
	标准态纯气体组元	理想气体	SSUB
	简单有机物质	适当 EOS	
纯铁磁、反铁磁或顺磁相	磁性元素	带有 Inden MO 的 CEM	TCFE
	磁性氧化物	带有 Inden MO 的 CEM	
凝聚态转换溶体	金属组元的合金	CEM	SSOL、TCFE
	复杂氧化物、硅化物等	CEM	ION
间隙溶体	含碳、氮的合金	CEM	SSOL、TCFE
具有几个亚点阵溶体相	金属组元占据不同点阵位置的合金	CEM	SSOL、TCFE
	带有离子的固体盐	TSIM、AM、QCM	SALT
有化学缺陷的溶体相	带有离子的非化学计量比氧化物	TSIM、AM、QCM	ION
	带有离子的非化学计量比盐	TSIM、AM、QCM	SALT
具有有序转变的溶体相	化学和/或磁性有序合金、氧化物、硅化物等	带有 CVM 的 CEM 带有 Inden MO 的 CEM	TCFE、TCNI
具有形成组元的溶体相	气体混合物	SUPERFLUID	SUPERFLUID
	水溶体	SIT、HKF、PITZ	TCAQ、AQS
	溶体/液体	TSIM、AM、QCM	SSOL、TCFE、ION
	熔盐	TSIM、AM、QCM	SALT
	玻璃		
共价键溶体相	复杂有机物质		
	金属-有机复合物		
	聚合物	FHM	

注意：不同相模型和数据库的细节，请参考本手册和 Thermo-Calc 信息包中的相关部分

3.2.10 不可逆热力学

当没有任何变化时，实际上仅为平衡体系定义了传统热力学介绍中引入的所有概念。这些概念也能

扩展到变化率很低的情况，这样的处理称为可逆的，因为任何时刻都允许转变过程的方向。然而，自然界中大多数过程是不可逆的，多数体系处于未达到平衡的状态。问题是能否将热力学用于这些过程。答案是若仔细有时可解决。然而，讨论仔细意味着什么超出了介绍的范畴。

3.2.11 热力学模型

全面描述体系 EOS（状态方方程）和纯物质与溶体相所有热力学函数来进行可靠的热力学计算是很重要的。Thermo-Calc 软件/数据库/界面软件包要求这样的热力学描述来对 Gibbs 能表述公式化以及要求二阶导数，来使用 Gibbs 能最小化技术进行平衡计算。给出直接 Helmholtz 能或内能而不是 Gibbs 能的任何模型通过在 Thermo-Calc GES 模块中使用一些特定算法将解析地或数值地转换为 Gibbs 能表述。（细节与举例见第二部分 Gibbs 能体系模块 GES）

状态方程与纯物质的基本热力学描述应给出特定的与已定义物理与化学数据。一个纯物质的良好模型应能够给出 P-V-T 关系、热力学函数（G、H、S、C_p/C_v、α和β/κ）以及来自磁性有序、化学有序、静电反应等的所有可能附加贡献，这样的数据对计算化学计量比相中纯物质或溶体相中一定参考态的标准热力学性质很重要，例如

Ø **Inden 模型**（Inden，1975）用于计算磁性贡献；

Ø **CVM(簇变化方法)四面体方法**(Kikuchi,1951; Sundman & Mohri,1990)用于计算产生于化学有序的组态熵贡献；

Ø **全水和蒸汽状态方程模型**（Johnson & Norton, 1991; Haar et al., 1984）和**修正 Helgeson-Kirkhan-Flowers 模型**（Johnson et al., 1991）已用于 Thermo-Calc 计算在很宽的温度和压力范围内的 H_2O(水、汽和冰)和水溶液组元的标准热力学和传输性质；

Ø **Murnaghan 模型和 Birch-Murnaghan 模型**（Saxena et al,.1995）可用于计算 P-V-T 关系和很高温度压力下材料的热力学性质。

Thermo-Calc 为与成分有关的相使用的溶体相通用模型为：

Ø **规则溶体模型**和几个用二元 Redlich-Kister 参数和与成分有关的三元参数的扩展模型（Hillert,1980）；

Ø 亚点阵模型或称化合能模型（Sundman and Ågren,1981; Anderson et al., 1986）.

特定溶体模型

Thermo-Calc 为一些特殊溶体使用的特定溶体模型，如

Ø 氧化物液相的**二亚点阵离子液体模型**（Hillert, 1985）、**联合模型**（Jordan, 1979）、**Kapoor- Frohberg-Gaye 胞模型**（Gay & Welfringer,1984）和**准化学模型**

Ø 聚合物的 **Flory-Huggins 模型**；

Ø 水溶液的 SIT（**特定离子反应理论**；Ciavatta,1990）、**HKF**（**完全修正 Helgen- Kirkham-Flowers 模型**；Helgeson 等,1981; Shock 等，1992；Shi 等，1992）和 **PITZ**（**普遍的 Pitzer 形式**；Pitzer，1991）模型。

除了对材料体系的 Gibbs 能的两部分通常贡献（分别为纯物质和溶体）之外，Thermo- Calc 也提供了用户添加对相互作用体系 Gibbs 能任何类型的额外贡献的可能性，如表面张力能。

纯物质和溶体相的所有热力学模型在第 11 部分（Gibbs 能系统 GES）作了详细的扩展介绍。

有两种主要情况用户特别需要理解模型参数，第一种情况是计算的开始值必须由用户提供，第二种情况是计算溶解度范围(miscibility gaps)或有序现象。

3.2.12 与各种状态变量有关的 Gibbs 能

上面已经提到，一相的 Gibbs 能依赖于各种不同状态变量。在大多数合金系中，一相的热力学性质可通过使用显示 Gibbs 能如何依赖于温度和成分（通常是相中组成的分数）的表达式来模型化的，其它状态变量如压力、体积和熵也可作为 Gibbs 能表达式中的参数。

然而，对于体积不能直接和显式的描述为压力的函数（如很高压力下的矿物）的一定状态的一些相，或传统热力学不能使用（如临界区中的 H_2O），这样相的 Gibbs 能应解析地或数值地从 Helmholtz 能或内

能转换，或从 GES 计算程序内部获得数值形式。

3.2.5 节中的表 3-1 列出了适合于 Thermo-Calc 软件包的基本强度变量和容积变量。

3.2.13 参考态与标准态

Gibbs 能总是相对参考态给出，例如，若寻找各种形式铁的 Gibbs 能，可发现与 fcc 形式相关的其他所有形式的信息。

通常有多于一种方法选择化学计量比或溶体相参考态。当以作为温度和压力函数的一定成分表示一种物质的 Gibbs 能时，作为一些常数的温度和压力（如 0K 于 1bar，或 298.15K 和 1bar, 或 970K 和 1bar）函数的相同成分的相同物质可用作参考态，或具有相通成分的相同物质而当前温度和 1bar 时物质的每种成分都最稳定作为参考态。然而，多元不均匀成分种各种组元的参考态必须是体系不同相中每组元相同。

Thermo-Calc 软件允许用户为相中各种组元选择适当参考态。如果以元素的形式作为所谓的稳定元素参考（SER），在所有 Thermo-Calc 数据库中缺省定义就如此，那么最通常的方法是为所有组元设定参考态。然而，可谓体系中任何组元选定其它参考态，特别是当组元不是元素形式（如 CaO 系中 CaO 和 O_2，H-O 系中的 H2O 和 H+1，U-O 系的 UO2+2 和 O-2）更是如此。体系中以组元的参考态（若不同于 SER 状态）可由 SET_ REFERRECE_STATE 命令来指定，其中参考态必须指定，参考温度（正常为当前温度）和压力（正常为 1bar）必须输入。

在使用 SER 参考的情况下，任何温度和压力时由纯元素形成化学计量比化合物Θ的形成摩尔 Gibbs 能可表示为

$$ {}^0G_m^{\Theta} - H^{SER} = \Delta_f\, {}^0G_m^{\Theta} + \sum_i \nu_i ({}^0G_i^{\alpha} - H_i^{SER}) $$

当物质为具有一定成分 x_i 的一种溶体相α时，也必须为相同温度和压力的相中所有组元选择合适的标准态，通常设定为与溶体具有相同结构的纯组元，即溶体相中所谓的最终成员（end-member）。相形成的摩尔 Gibbs 能加上过剩自由能项可表示为：

$$ G_m^{\alpha}(x_i) - H^{SER} = {}^{EX}G_m^{\alpha}(x_i) + \sum_i x_i ({}^0G_i^{\alpha} - H_i^{SER}) $$

实践上，以指定相中一个组元的参考态是当前温度和 1bar 下相中的“纯”组元。注意，组元的化学势或活度可对置换相获得（即相中所有溶解的组元可互相替换并占据等同的位置），但是不适合于相中有多于一个亚点阵的情况，因为没有定义。换句话说，计算这样性质的必要条件时，从模型的观点，相必须存在只有纯组元的可能。对于溶解组元的置换型相这种情况才总是真的，但非置换型相则不是真的，如 FCC[$(Fe)_1$(C, N, $VA)_1$]中的 C，因为模型可最终在 50%C 和 50%Fe。例如，对于仅有一个亚点阵并且气体组元可能作为一种纯气体存在的气体混合相，可使用状态变量 MUR(species, gas)和 ACR(species, gas)，后者总是相当于气体组元的分压（分逸度）。对于液体相，Thermo-Calc 中通常考虑由一个单一亚点阵，相中所有组元可互相置换，并且可获得状态变量 MUR(species, gas)和 ACR(species, gas)。

Thermo-Calc 中以特定方式处理水溶液的参考碳与标准态。通常，也将单一亚点阵方法用于水溶液相，相的合理结构允许“纯组元”（溶质 H2O 或特定溶剂），然而，热力学模型（如 SIT、HKF 和 PITZ）将正常使溶解于溶剂中的溶值达到一些浓度极限。因此，溶剂和溶质的适当的标准态的使用对水溶液很重要。溶剂的标准态设定为“纯水”，标准态也如此（依据拉乌尔定律）。溶剂的参考态设定为“纯组元”，而标准态定义为“单位重量摩尔浓度的假定状态（1.1kg 溶剂中溶解 1 摩尔）而其中每个分子的环境与无限稀相同”(根据亨利定律)。在这样定义下，也可使用状态变量 MUR(species, aqueous)和 ACR(species, aqueous)。然而，应记住含水组元（溶剂和溶质）相对于标准态的活度[正常输入位 AI(sp, aqueous)，或溶剂为 AW 而溶质为 AI#，每种组元有特定数#]有如下关系：

AI(sp, aqueous) =ACR(sp, aqueous)　　（溶剂）

AI(sp, aqueous) =ACR(sp, aqueous)*55.5084　　（溶质）

3.2.14 溶解度范围

在一些情况下，有可能具有相同结构而不同成分的两相处于平衡，这里描述一个单相中的溶解度范围。为计算这样的平衡，有必要为同时稳定成分相引入相同数的成分的设定。这一点可通过 POLY 模块

中 SPECILAL_OPTION 命令或 GES 模块中 AMEND_ PHASE_DECSCRIPTION 命令随意完成或通过 TDB 模块中 AMEND_PHASE_ DECSCRIPTION 类型定义永久地完成。

3.2.15 驱动力

驱动力(D)是一定内力中反应化学组元之间的亲合力，用内部变量ξ表示其作用范围。根据热力学第二定律，驱动力 D 与内熵乘积 $d_{ip}S$ 成正比并可表示为 $D=Td_{ip}S/d\xi$。若体系不是处于平衡态，可由自发的内部过程此时第二定律给出 $d_{ip}S>0$ 因此 $D\xi>0$，促使过程趋向平衡。

不管内部过程的本质如何，平衡热力学处理 $d_{ip}S=0$ 和 $D=0$ 的体系。在化学平衡状态，在内部变量ξ的平衡值处所有特征状态函数没有变化，因此在平衡状态的驱动力克表示为：

$$D=-(\partial G/\partial\xi)_{T,P,N_i}=-(\partial U/\partial\xi)_{S,V,N_i}=-(\partial A/\partial\xi)_{T,V,N_i}=(\partial H/\partial\xi)_{S,P,N_i}$$

基于平衡体 Gibbs 能最小化的 Thermo-Calc 软件中，α相的驱动立刻用下式求值

$$D^{\alpha}=-(\partial G/\partial\xi)_{T,P,N_i}=-(\partial G/\partial N^{\alpha})_{T,P,N_i}=-\Delta G_m^{\alpha}$$

一相的驱动力是该相的 Gibbs 能面到连接平衡态所有组元化学势组成的平面之间最短的距离，这个平面称为稳定正切（tangent）平面，因为该平面使体系中所有稳定相的 Gibbs 能面的正切。很清楚稳定相的驱动力为零，而对不稳定相为负（越不稳定越负）。在一个平衡系中不可能存在具有正的驱动力的任何相。

图 3-1 可用于如何计算驱动力的简单例子，该相图显示 750K 的 Fe-Cr 系 bcc、fcc 和σ相的 Gibbs 能面。对于二元体系，Gibbs 能面是一曲面，稳定正切面是一直线。粗实线表示当 Cr 的摩尔分数大约在 0.15-0.88 之间的成分时 bcc 相的溶解度范围内稳定公正切平面。σ和 fcc 相的 Gibbs 能面上的标记点是最接近稳定公正切平面的点，细实线这些成分上每个 Gibbs 能面的正切必须平行稳定公正切平面。

因此每相的驱动力是正切线平衡公正切线的距离，标记在图的右侧。

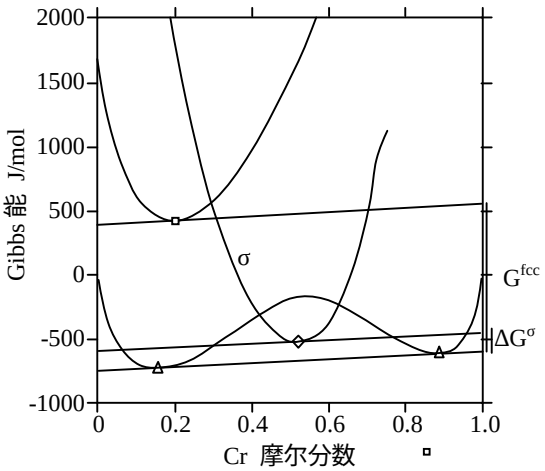


图 3-1 驱动力的定义

图中说明了 750K 时 Fe-Cr 系 bcc、fcc 和σ相的 Gibbs 能曲线,粗实线表示 bcc 相中溶解度范围内稳定正切

3.2.16 化学反应

化学中共同的方法是通过给出组元之间的化学反应和计算反应的热力学性质或对反应的热力学性质制表来描述一个体系。有用的应用可能是反应热平衡计算，从中可以找到绝热交互作用体系的最终温度。当涉及多个反应时，这对利用自动最小化过程计算体系平衡可能是有利的。

3.2.17 与平衡常数方法相对的 Gibbs 能最小化技术

原则上，Gibbs 能最小化技术（GEM）将给出与平衡计算中平衡常数方法（ECA）同样的结果。这种类似假定，后一种方法考虑了不均匀交互作用体系中所有重要的化学反应和所有平衡常数必须是内部一致。

从实用的观点，由于直接使用了基本热力学函数 Gibbs 能，GEM 技术提供一个更容易和更有效率的方法在数学上和热力学上来保证特定体系中热力学数据内部一致，这一点通常是真实的。

已经证明 Thermo-Calc 软件包中使用的 GEM 技术是现有热力学计算的最好方法之一，是因为在 Gibbs 能系中交互访问 Gibbs 能表达式，在不均匀平衡计算模块（POLY）中交互访问计算的相稳定性、系综和组元形成，在制表模块(TAB)中交互访问导出的热力学函数（包括反应常数）以及参数优化模块（PARROT）中交互访问已访问的热力学变量。以下几部分将进一步展示 Thermo-Calc 的 GEM 技术在解决各类问题方面的威力。

3.2.18 平衡计算

在计算均匀或不均匀体系平衡态之前，用户必须首先从数据库中取回热力学数据，然后指定平衡条

件。

通常，Thermo-Calc 软件对指定计算允许完全自由度使用条件的任何结合，当即算不变平衡时足以指定稳定相，也可使用组元的量或其化学势或活度。其它指定包括为计算全等（congruent）转变的平衡处两相中两组元的成分等式，或为计算绝热反应最终温度的体系给定值的焓。

3.2.19 介稳平衡计算

通过将最初最稳定相的相状态设定 SUSPEND（暂缓）或 DORMANT（休眠）状态，具有暂缓稳定相的计算平衡将表示介稳平衡。

3.2.20 局域或部分平衡计算

Thermo-Calc 仅打算平衡计算，因此与时间/空间有关的转变过程不能模拟。然而，包括局域和部分平衡态发展的几种简单类型的相转变可用 Thermo-Calc 软件包模拟，即液相种扩散很快而固相种扩散很慢并可忽略的**凝固过程**，两个指定相具有相同 Gibbs 能的所谓的 $\boldsymbol{T_0}$ **温度**，以及体系中两个指定相的间隙组元化学势相等而非移动置换元素的结合化学势（即化学势于所谓的 u 分数的乘积）相等的**仲平衡条件**。

在特定的凝固过程（使用 **Scheil-Gulliver 模型**），液/固界面的情况可用局域平衡描述。以很小的温度（或焓或液相量）减小步进，可确定液相新的成分，然后在进行下一步之前通过把总体成分重新设定为新的液相成分来去除已形成的故相量，这用 POLY 命令 STEP 的特定选项 EVALUATE 来达到，即命令顺序 STEP EVALUATE。为了以更友好的方式指导这样的凝固模拟，要使用 Thermo-Calc 软件包中的特定模块，即 **Scheil 模块**。Scheil 模块更详细的描述可在 10.8 节中找到，使用该模块的两个例子在 Thermo-Calc 例子书中（即例 15 和 30）。

仲平衡意味着多元合金中一个间隙组元（如 C 和 N）比其它组元（置换元素包括基本元素和合金元素）的扩散快很多，结果是在两个部分平衡相中间隙组元的化学势相等（其它组元不等）的部分平衡。在这样的仲平衡状态下，可能有一个部分无分配转变，形成的新相具有不同焓量的移动组元，但扩散慢组元成分相同。研究不同组元的扩散系数差别很大的体系的相变时，仲平衡计算是有用的。仲平衡下发生的转变可比相界面局域平衡的转变更快，例如，三元合金系（Fe-Mn-C）中，频繁发生一元素（间隙溶质 C）的扩散比其它元素（置换的基本元素 Fe 和转换合金元素 Mn）更快。通常由可能形成新相具有不同含量的移动元素（C）但其它两个元素（Fe 和 Mn）的相对含量不变。因此部分平衡将保留在两相中，通过量相界面局域平衡，相转变将是部分无分配。在界面上无驱动力，界面两侧移动元素的化学势（μ_C）有相同的值，而不动元素的化学势（μ_{Fe} 和μ_{Mn}）有不同的值。化学势与所谓的 u 分数[u_{Fe} 和 u_M 定义为 $N_i/(N_{Fe}+N_M)$或 $x_i/(x_{Fe}+x_M)$]的乘积有相同的值。在仲平衡状态下，$dT=dP=d\mu_C=d\mu_{Fe}=\mu_{Mn}=0$，驱动力为零，同时 T、P、μ_C 和 $u_{Fe}\mu_{Fe}+u_M\mu_{Mn}$（Fe 和 M 的结合化学势）在界面两侧必须有相等的值。在摩尔 Gibbs 能图中（见图 8-1），仲平衡中两相的交线直接朝向 C 角，是沿两个 Gibbs 能曲面的公切线下将而不是沿公切面下降。

T_0 温度（T-0）定义为多元系中一定成分的两相具有相同 Gibbs 能的温度。T_0 温度处在两相之间的两相区内，是无扩散转变的理论极限，因此当研究无扩散相变时关心 T_0 温度。当无扩散转变的部分平衡中两相 Gibbs 能相等时，具有固定成分的多元系的 T_0 温度是公切线上一个点。若一个或两个组元的成分变化时，无扩散转变的部分平衡仲两相公共 Gibbs 能变成一平面或表面，相应地，T_0 变成一直线或平面。

因为 TCC 的 P 版本，分别在 POLY 模块命令 SPECIAL_OPTIONS 和 STEP_WITH_ OPTINS 中可得到两个高级选项（T-ZERO TEMPERATURE 和 PARA- EQUILIRBIUM）来自动计算所谓的 T_0 温度和仲平衡条件，在复杂的多元系建立部分平衡。

3.2.21 相图

表示基本的和导出的热力学性质的几乎每种类型的图都有自己的名称。相图同常意思是二元系的 T-x 型图，但是这里的意思是以两个或更多独立状态变量作轴变量的任何类型图。从相图中可获得关于用作轴变量的状态变量任何值的体系状态的信息。Thermo- Calc 软件允许绘制多达 5 个轴变量各种类型多元相图。

相图例子包括以活度为轴变量的优势区域图、以 1/T 为一轴的 Kellogg 图、等温断面、等值断面和等

活度图。在 POLY 模块以 MAP 命令计算相图，至少两个轴变量应在 POLY 模块设定。在 POST 处理器中，可制订不同独立量作为轴变量来绘制各种类型相图。

3.2.22 性质图

性质图绘制相对独立变量的非独立性质的值，如钢中碳活度相对温度。多元系中，性质图比相图更有用，因为性质图给出相区内的信息，而相图仅当稳定相变化时才给出相区内的信息。Thermo-Calc 软件允许绘制多达 40 种组元的各种类型多元性质图。

使用 STEP 命令以 POLY 模块计算性质图，仅一个轴要在 POLY 模块中设定。在 POST 处理中，可制定不同非独立量作为 Y 轴绘图。而通常保持不仅变量为 X 轴。

3.3 热力学数据

高质量热力学数据是指导可靠的热力学计算的基础，没有精确而有效的数据库，任何热力学软件都是无用的或错误的。

热力学数据优先于热力学软件而存在，这样的数据可从可能得到的观众实验结果中导出（如相图确定、形成或反应热的热测量、稳定性的 EMF 测量、P-T-V 关系于结构测定、溶解度和组元形成的检测等）。Thermo-Calc 软件包已经为学校和企业提供研究各种物质物理化学性质、研究各种复杂工业和自然过程和帮助材料设计与工程的多种不同方法的有用工具。

在 Thermo-Calc 软件的发展过程中，已将重点放在通过大量严格估价同时建立高质量各种材料的热力学数据上，并通过近 20 年国内国际合作如 CALPHAD 社团、SETE 社团、NIST 机构、Ringberg 讨论会、CAMPADA 协会和 STT 基金等，已经取得了巨大成果，同时多个内部协调的数据库和数据系列已经公式化。

3.3.1 数据结构

面向应用的指定体系的数据系列或数据文档可从一般数据库中提取，或有用户创建。这样的数据系列或数据文档的应用势直接的，但相应地其应用是有限的。此外，在各种软件的使用限于特定数据结构和数据量。一个好的热力学软件/数据库系统必须按数据结构和数据量以通用的方法构建。对于大量传统的分离的领域如冶金、合金、陶瓷、半导体/超导体、聚合物、高温/高压气相平衡、水化学、地球以及环境体系等，系统必须包含和管理数据。

Thermo-Calc 软件/数据库系统在单个软件/数据系统中使用尽可能多的通用数据和特定面向应用的数据系列/数据文档，在各种应用中对于所有热力学计算易于学习和应用。

理想上，通用数据库的数据结构和面向应用的数据系列/数据文档在 Thermo-Calc 软件/数据库系统中应相同或类似。第 6 部分将给出更多细节。以下几段将提供一些对通用数据库结构的简要描述，并集中在一个数据结构如何设计和为什么这样设计，以及对于一些复杂相特定的一些考虑是否是必需的。

一个数据库至少必须具有带 TDB 扩展名的 setup 文档，包含可用元素、所有各类组元、可能相和相组成上的适当系统定义。

数据库中通常有附加的缺省定义，如

- Ø 全程温度极限
- Ø 公用常数
- Ø TDB BEFINE_SYSTEM 值（ELEMENT 或 SPECIES）上和 GES-参考类型索引的缺省系统定义
- Ø 在主组成、相类型码、数据类型码、化合物相、同素异构相、各种过剩能项应用模型的缺省相定义。
- Ø 缺省 TDB 命令（定义或拒绝基本元素/组元/组成、拒绝和存储相）
- Ø 缺省类型定义：
  - v TDB 模块命令 GRT_DATA 来从后续的或随意的文档（与其路径）取回数据
  - v 在相水平上 GES 模型命令（如 AMEND_PHASE_DESCRIPTION 命令预定以相状态位数（bits）、成分序列、过剩模型、磁性贡献、静电贡献、化学有序或其它额外能贡献，CHANGE_PHASE_STATUS 命令与定义相状态）

v 执行一定类型定义的条件（IF/THEN）

Ø 数据库信息

Ø 数据库版本和发行日期

此外，数据库文档可以包含注释行（总是以符号“$”开始）来解释特定部分，对于普通用户或数据库管理员给出很简单或全面的细节。

热力学函数、参数，表和参考可直接包含在数据 setup 文档中或存储在单独的连续的/随意的文档（带有任何扩展名的任意名称）中。在 setup 文档中必须适当定义所有连续/随意文档的名称和路径。有时，若数据库过大，一个 FTP 文档（一特定函数随即访问文档）用于存储多个带有记录数目的函数，这样的 FTP 文档可经常明显加快数据返回程序。

数据库包含与温度、压力和相组成有关的每相 Gibbs 能的表达式。数据库也可用于计算介稳平衡，是因为数据可从所涉及的稳定相区域外推。正如以前讨论的那样，以但知道 Gibbs 能函数就可能或的任何热力学性质的值，因此，简单进行整个体系或局域/部分子体系的平衡计算、相图、性质图等。

Thermo-Calc 数据库通常覆盖 298.15K 以上和高达最大 6000K 温度的数据，尽管上限温度在多数情况下低一些。温度关系表达式通常是 T 的指数序列，而对数和指数函数也使用。

所估价的无机物和冶金体系的大多数数据是在 1bar 的压力下，同时适于理想气体定律的气相假定与压力有关。然而，存在包含用非理想的压力相关参数模型化的相的一些数据，并使用了纯物质状态方程(EOS)和溶体相的交互作用项。例如，用完全修正的 Helgeson-Kirkham-Flowers 模型来模型化的水溶液相将存储纯组元的非理想的压力相关数据，适用压力高达 5bar。由 Birch-Murgnahan 模型来模型化的矿物相有热膨胀、压缩性与其对温度和压力微分的数据，可在宽的温度（298.15-6000K）和压力 1-1000bar）范围内描述 P-V-T 关系。

溶体的 Gibbs 能与成分的关系为指定的一些交互作用组成（二元、三元或更高阶）存储为交互作用参数，可进一步描述为温度和压力的函数。

一些特殊相的特定物理与化作用对 Gibbs 能的贡献可记录在数据库中，这样的数据可部分或全部描述 Gibbs 能关系，例如，磁有序相将磁性常数可居里温度存储在数据库中，水溶液相将波恩（Born）函数（为计算静电贡献 Debye-Hückel 极限定律项和离子溶解）存储在数据库中。

正如以上提到的那样，对一些复杂相，存储在数据库中的数据不足以描述纯物质或溶体相状态的 Gibbs 能关系，这些 Gibbs 能贡献的复杂部分应作为 Thermo-Calc GES 系统的特殊子程序来编程，或者作为包含相广泛表达式的特殊数据来编码。当相的平衡态不能用 Gibbs 能隐式地表达，以至于隐式的 Helmholtz 能或内能描述必须转换为 Gibbs 能，这种例外特别正确。其它普遍的问题是，当传统热力学不能用于某些环境下的相时，不得不在 Thermo-Calc GES 系统内部直接正常地对合适的非传统热力学进行编码。这种极端条件下的很好的例子是，大的温度-压力-成分范围的 H_2O 和水溶液的热力学描述（如完全 Helgeson-Kirkham-Flowers 模型或通用 Pitzer 形式）。

使用数据库内部打印-定义访问，将在存储的数据、特殊数据文件和/或额外编程部分之间架起桥梁，来处理所关心的相的非理想问题。特别重要的是 Gibbs 能表达式是否比普通的温度和成分关系更复杂，是否涉及这样的困难相，和/或是否考虑复杂模型。

正如以上提到的那样，普通数据库、面向应用的数据序列和面向问题的数据文件，不论是 Therma-Calc 软件 AB 提供的或用户创建的，通常有关于各种定义和 Gibbs 能表达式具有同样的一些数据结构。然而，对较晚的两种类型，没有必要将函数和参数存储在连续的随机的文件中，因为起有限的尺寸。为了方便，所有这些作为数据库的参考。

在 Therma-Calc 软件系统内部使用的所有可以得到的数据库必须具有 Thermo-Calc 数据结构，在 3.3.1 种已由描述。对具有不同数据结构其它任何数据（多个来源）必须转变 Thermo-Calc 格式。对进行这样的数据转换，有几种转换程序，例如，ACCESS 程序（Jacobs，1996）可将所有的 SGTE 数据库在 Thermo-Calc、MTDATA 和 ChemSage（和 MALT）格式之间从一种转换为另一种。SKSCONV 程序（Sundman，1992）和 AQSCONV 程序（Shi 和 Sundman，1999）可将 GES 和 AQS 数据库转换为 Thermo-Calc 格式。

Thermo-Calc 中使用的数据库将在数据库模块（TDB）内首先返回。返回的数据和一些附加定义或可能修正可用几种其它 Thermo-Calc 格式保存。在 Gibbs 能系统模块（GES）中，一个单独相或整个定义的体系的这种返回数据或附加或修正可优化地列在屏幕上或以类似于原始数据库的结构化格式写入单个文件中。

在 Gibbs 能系统模块（GES）、平衡计算模块（POLY）或优化模块（PARROT）可将所有返回数据，以及一些附加定义或可能修正保存在相应的 GES5、POLY3 或 PARROT 工作空间，然而，数据结构将依此调整，同时数据格式将是不可见的。

在以后相应的部分将详尽地描述和演示所有这些类型的 Thermo-Calc 数据格式。

3.3.3 数据估价

尽管实验上已经确定了大量的热力学量和化学平衡，可能还难以找到解决特殊问题所需的足够实验信息。这个使人失望的事是有限的实验工作只能覆盖所有组合的很小部分。因此缺少的数据必须通过实验所确定的值的某种外推来估计。这样的外推要求高技能。

Thermo-Calc 数据库系统已经设计为，对没有时间或技能来进行实验数据外推的人是有用的。这可通过使用“ CALPHAD 方法 ”（Kaufman 和 Bernstein，1970；Sunders 和 Miodownik，1998；Sundman 等，2000）来达到，也就是，在文献中可得到的实验数据使用建立在物理基础上的数学模型由专家来评价。从这些模型中可为多个量对导出实验数据间的多个关系，并有可能有效使用离散的和不完整实验数据。获得如此评价的结果作为参数值于数学模型一起存储在数据库中，这些参数不仅描述评价使用的实验数据而且也可用于可靠的内插甚至外推。

因此用户请求一个实验是否确定的值是没有差异的。倘若适合推荐的评价有效性范围，从数据库系统中存储的参数计算的值是可能得到的最好的值。按照此模型可计算多个不同的量，其值总是相互一致的

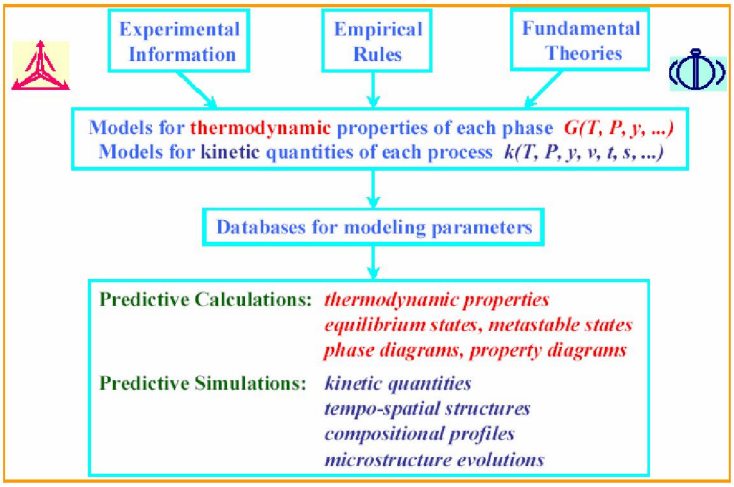


图 3-2 Thermo-Calc 与 DICTRA 软件包中的扩展 CALPHAD 方法

Thermo-Calc 也提供给用户一个独特的工具（PARROT 模块）来进行基于各种实验数据的严格评价，如 EOS、相平衡、相图等。借助该模块可有效扩展一些数据库或为一些特殊材料和应用程序可靠地创建各种数据序列或数据库。扩展的 CALPHAD 方法已经在 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件包中 PARROT 模块中执行（图 3-2）。

3.3.4 数据质量

当然，计算的可靠性依赖于模型的有效性和评价的品质。Thermo-Calc Software AB 与其世界各地的合作者为多个应用程序提供多个高品质通用的和特定的数据库（参阅第 4 部分，Thermo-Calc 数据库描述）。已做出的和正在进行努力将扩大当前存在和将来潜在应用的热力学数据的范围。

用户全面理解和赏识所有建立的数据库是很重要的。这种理解包括潜在的应用系统和过程以及可能

成分、温度和压力的局限性。此外，一些其它因素也可对特定数据库的品质有贡献。这些包括各种相的有效热力学模型的选择，参数优化程序使用的工具，选择可靠实验和文献信息的判据，评价中个人的经验和技巧水平等。同样重要是，知道对各种应用程序不能有万能的数据库，所谓的“通用”数据库尽可能比有限的系统和工艺更广泛。一个特定数据库（无论是面向应用数据序列还是面向问题的数据文件）通常将具有一个有限的（材料类型、成分、温度或压力的）应用范围。具有高质量的数据库可能合理地内差或外推数据到很少或没有实验信息的范围。

由于有包含在 Therma-Calc 软件系统中的具有独特的或强大的优化功能模块 PARROT，鼓励用户通过对各种有效彻底的实验研究和可靠的文献信息来严格评价生成自己的高专业标准数据。

这种应用程序中最成功和最有益的发展为 TCFE（对钢和合金）和 SGTE 数据库（纯元素、无机和金属物质和溶体相）。由专家研究之间国际合作用高评价技巧已经不断更新这些高质量数据库。

设计的通用的数据库（如 SGTE PURE/SSUB/SSOL 数据库）包含多个元素、各种类型相并覆盖了尽可能多的不同材料。因此，可用于模拟多个体系和过程。另一方面，需要一些附加数据来达到对一些子体系更精确的计算结果。更特殊的数据库（如 TCFE、TCNI 和 TTTi 数据库）是面向特殊应用和问题，成分、温度或压力有限制。

在 Thermo-Calc 数据库中，这种限制可存储为适当部分中的特殊记录。例如，温度极限总是为 Gibbs 能表达式而设定，成分范围存储在一些数据库中。Thermo-Calc 数据库中**数据库信息和参考**一节也可能包含对应用限制的一些描述。划分品质登记的一些品质分配码存储在一些数据库（如 SGTE SSUB/SSOL 数据库）内部。在某些情况下，若在适当的应用范围以外进行计算，Thermo-Calc 软件/数据库系统迅速地指出。

3.3.5 数据源

连同 Thermo-Calc 软件系统一起，使用某些热力学模型严格评价的各种热力学数据库经常用于各种用途，事例包括在无机和金属体系中的物质和溶质的 SGTE SSUB/SSOL 数据库、钢与合金的 TCFE/FeDATA/TCNI 数据库、水溶液的 TCAQ/AQS 数据库等。SGTE 数据库为通用的热力学数据库，描述了温度 K 到气态稳定温度之间各种成分的物质和相的热力学性质。接下来的 3 个部分（第 3、4 和 5 部分）中，将给出对目前可以得到的数据库和 Thermo-Calc 软件包中如何管理这些数据库进行了更为详细的描述。

在 Thermo-Calc 软件包内部，多种来源的数据库（如 SGTE、ThermoTech、MIT、UES 软件等）在一个体系可使用不同模型，这种数据库覆盖了从钢、合金、陶瓷、矿渣、熔体、半导体/超导体、焊料、硬材料、核材料、气体/流体、水溶液、有机物质到地球化学和环境体系很宽范围的材料，可用于研究和开发工业工程和自然界体系。更详细的描述参阅第 4 部分。

在 KTH 的 Thermo-Calc 研究组已经启动和参加多个国际项目，以便创建通用而有效的数据库。Thermo-Calc Software AB 现在正积极致力于满足各种工业用途的更多的面向应用数据库的开发。

世界上也有多个科研和公司的用户已经建立了自己的数据库或数据序列来协助 Thermo-Calc 软件包更好地其作用。

3.3.6 数据加密

从 TCC 的版本 P 起（和 TCW 的版本 2.1 与 DICTRA 版本 22），所有商业性的数据库均以加密格式发行，而所有免费数据库还是永不加密的格式。这种加密的数据库只能与从 TCSAB 和代理商出获得的特定数据库许可钥匙一起使用。加密数据库总是由两个带有*.TDC 扩展名的文件组成，而不加密数据库可能包含各种类型的带有不同扩展名（如*.TDB、*.DAT 和*.REF.等）的文本文件。

任何编者不能查看和编辑*.TDC 数据文件，而只有在带有和是的数据库钥匙文件的 TCC/TCW/DICTRA 软件内部使用这些文件，这些文件是由 TCSAB 为从终端用户得到的唯一认证的成员的特定计算机/服务器单独制造的。一个封装或分选的数据文件可通过文本编辑查看，但由于其限定型结构（否则 TCC/TCW/DICTRA 软件不再能够使用它），用户将永远不能编辑该文件。为封装的数据文件可用简单的文本编辑查看和十分小心地编辑。用户指定数据库通常构建为不封装的数据文件。

以前数据库文件有时依赖于 CPU，预示着由于不同的数据结构，UNIX/Linux 系统和 PC Windows OS 的文件不兼容，已经执行了从 TCCP、TCW2.1 和 DICTRA22 起自动转换数据库文件的标准程序，使得可以从两种系统读取数据库。需要转换时这个程序给出预告信息。

TDB 模块中热力学数据的返回、GES 工作区数据的存储，对这样加密的数据库与不加密数据库来说是相同的。然而，对任何已定义的体系或体系中的任何相，热力学参数和相关函数不能将 GES 模块的文本文件列在屏幕上，而相组成的定义可使用和是的 TDB 和 GES 命令来显示。

3.4 用户界面

在 Thermo-Calc 软件/数据库/界面软件包的研究与发展中用户友好特性的不断改进已成为最优先的考虑，不仅由于硬件和软件环境的快速发展，而且由于来自 Thermo-Calc 用户的建设性的建议，Thermo-Calc 软件 AB 已大大改进了各种产品的用户界面。

要记住的是，一个良好的用户界面必须在增强软件/数据库界面软件包的各种用途的使用效率上给用户带来益处，Thermo-Calc 用户界面的改进已集中于五个水平，见表 3-4。

表 3-4　Thermo-Calc 用户界面改进的不同水平

水平	目的	版本	可用性
命令行用户界面	项用户提供文本命令行界面	传统	TCC
模块界面	项用户提供简单输入（仅回答少数问题）来进行某些计算，如凝固模拟	传统	TCC
图形用户界面	在 Windows 环境下提供图形用户界面		TCW
用户编程界面	向编程者提供将 Thermo-Calc 引擎包含在应用程序的可能性	传统与 Windows	TQ TCAPI
软件界面	将 Thermo-Calc 引擎作为第三软件包的组合工具箱来提供	TC 工具箱	TC-MATLAB 界面

这里将介绍前两个级别的用户界面，即 Thermo-Calc 传统（TCC）版本。

Thermo-Calc 传统版本是由通过一菜单给出文本命令控制的交互作用体系，铜鼓一下设计规则，来极大改进系统用户界面的用户友好性：

- 复杂动作以分解为几个独立命令；
- 命令通常是一个全句，使之容易理解，
- 要求用户输入的量通过允许缩写和提供问题的缺省值来最小化；
- 有价值的输出保持最小以便允许慢的终端和低速连接；
- 在任何情况下只要用户键入“ ？ ”就可得到扩展的有价值输出或帮助。
- 计算可在稍后的时间内保存和重新开始。
- 记录各种在线帮助的宏文档可直接用于同一体系或具有略微不同条件的类似体系的以后计算；
- 有一些特定的易于使用的模块，自动计算和绘制某些类型相图或性质图（如二元、三元、势、Pourbaix 等）或模拟材料过程（如 Scheil-Gulliver 凝固），这样的模块中，用户仅需要回答一些简单问题，同时程序自动处理计算击其后处理的所有必要步骤。

按照这些改进命令行用户界面的指导原则，以有可能构建一个易于学习但使用不麻烦甚至对初学者也容易的系统。然而，必须理解用于计算的一个软件数据库系统不可能以书籍数据的恢复系统同样的方法来构建，用户必须知道在软件数据库系统构架内如何定义问题。

3.4.1 普通结构

总是可是从菜单中选择命令和从提示框中输入命令。键入问题提示号“ ？ ”或在一定模块中给出命令 HELP 获得菜单形式的命令。通常以条命令为用下划线连接起来的几个单词，如 LIST_EQUILIBRIUM。因此通过读取菜单容易理解命令执行的内容。键入跟在 HELP 后命令可得到更广泛的解释。

若菜单较长，可尽列出命令的一部分，如以 LIST 开头的所有命令只键入 HELP LIST 即可。

3.4.2 缩写

为节省时间，要求键入的量最小是很重要的，这个对易于出现拼写错误的人或不习惯于计算机的人有特殊重要性，然而，一个字母或数字的输入难于记住准确的命令。

因此，所有 Thermo-Calc 命令可用尽可能不含糊的开头单词来缩写，由下划线分开的每个单词可以分开缩写。

用于将命令单词分开的下划线“ _ ”可用连字符“ - ”代替带不能用空格代替（当键入命令时），因为空格用于分开命令与参数。

命令行输入中几乎所有符号都可用小写字母。

因此用户可选择易于记忆的自己的缩写，这个命令行缩写的规则可用于包括相名和其它主题的几乎所有各类输入。

下面给出一些实例：

正常命令	缩写命令
CALCULATION_EQUILIBRIUM	c-e
CALCULATION_ALL_EQUILIBRIUM	c-a
LIST_EQUILIBRIUM	l-e
LIST_INITIAL_EQUILIBRIUM	li-i-e
LOAD_INITIAL_EQUILIBRIUM	lo-i-e
LIST_PHASE_DATA CBCC	l-p-d cb
LIST_PHASE_DATA CEMENTITE	l-p-d ce
SET_ALL_START_VALUES	s-a-s, or s-al
SET_AXIS_VARIABLE 1 X(FCC,FE)0 0.89 0.025	s-a-v1 x(f,fe) 0 .89 .25
SET_START_CONSTITUENT	s-s-c
SET_START_VALUE	s-s-v
SET_AXIS_PLOT_STATUS	s-a-p
SET_AXIS_TEXT_STATUS	s-a-t-s, or s-a-te
SET_AXIS_TYPE	s-a-ty
SET_OPTIMIZING_CONDITION	s-o-c
SET_OPTIMIZING_VARIABLE	s-o-v
SET_OUTPUT_LEVEL	s-o-l, or s-ou

3.4.3 过程机制（history mechanism）

系统记住最后 20 个命令，通过键入两个感叹号“ !!”可列出。通过键入一个“ !”和前面已渐入的命令数就可再次执行同一命令。通过键入“ ！？ ”将给出过去使用过的工具的全面解释。

在 Windows NT/2000/XP 环境，使用向上“↑”或向下“↓”键也可调回和在以前进行的命令之间切换。通过使用“ ← ”或“ → ”键在该行进行进一步修改，进行变化（保持“ Insert ”键处于开的位置）。不幸的是，在 Windows 95/98/ME 环境不能使用这一容易特性。

3.4.4 工作目录和目标目录(Working directory and target directory)

“ 当前工作命令 ”或“ 当前工作区域 ”表示 TCC/TCW/DICTRA 软件系统在各种模块中能直接打开（读取）或保存二元文档（如 GES5、POLY3 或 PAR 文档）、简单的文本文档（如 TCM、LOG、TDB、SETUP、POP 或 EXP 文档）或图形格式文档（如 PostScript-PS5/6、HPGL\P7/8 等）的目录。“ 目标目录 ”表示软件系统执行程序的特定版本处在的目录。

在成功安装 TCC/TCW/DICTRA 软件/数据库软件报的情况下，目标目录可保留与特别安装（因为安装通常与一些计算机系统管理的修正有关）相关的所有执行结果相同的结果。然而，每个用户可有自己的局域计算机或可访问的已连接的服务器工作目录。

UNIX/Jinux 安装允许所有指定用户在制定场所从自己的工作目录访问软件包（在目标目录下）。用户可以呼叫某些目录下的程序，在正在运行程序的当前 session 中当前工作目录来这些目录。为打开或保存不同目录下的各种文件，用户应从该目录每次独立地启动程序。

Windows Nt/2000/XP 安装提供更多的灵活性，但也许提供可更多相关目录管理工作，说明如下：

正如 2.2.3 节描述的那样，用户可利用适当定义的结构用安装在制定计算机或服务器上的 TCC/ TCW/ DICTRA 软件/数据库包来工作，通过修改或处理这种快捷方式（通过其属性），在**启动**框建立当前工作目录作为已经在局域计算机和联接的服务器上的一个目录。结果，程序随后在工作目录中读取和生成各种二位、文本和图形文件。

用户应了解，无论程序在屏幕弹出**打开文件**或**保存文件**窗口，**访问**框允许改变目录（驱动器或计算机），以便适当找到已存在的文件或查询文件。这将导致为所有随后在现在 session 中执行将当前工作目录改变为其它目录。通过关闭程序，present session 结束，因此可重新以预先定义的启动路径再次作为“ 当前工作目录 ”来启动程序。

在 Windows NT/2000/XP 环境下，可能使用 TCC/DICTRA 程序内在线的各种标准 DOS 命令，但对每个 DOS 命令必须以“ @ ”符号开始。例如@DIR、@TYPE 等（不幸的是，在 Windows 95/98/ME 环境不能用这个方便的特性）。因此，在没有放弃程序时，执行一系列命令@CD <directory>返回预先定义的“ 当前工作目录 ”。

3.4.5 参数转换为命令

键入命令应总是接着按<RETURN>键，大多数命令需要参数的辅助信息，以便执行。在按<RETURN>键之后程序要求这些参数。

一个知道要求参数的命令的专家用户可在同一命令行键入命令与参数，参数值必须用空格与命令分开。

3.4.6 缺省值

程序通常提供适当的缺省值作为指定参数或一个问题的回答，该值将在问题之后的斜线内给出：

OUTPUT FILE /TERMINAL/:

按<RETURN>键接受缺省值作为对问题的回答，在此情况下，若按<RETURN>键，终端接受输出文件。

一些命令由多个参数。这是一个试图保存菜单简略和提供系统所有特征的命令时的一个设计问题。通常首先给出最重要的参数，最后设定通常取缺省值的命令参数。在最后调整参数之后，通过键入逗号“ ，”可接受保留参数的缺省值，每个保留参数用空格分开。每个参数至少应由一个逗号。

在其它情况下，当重新呼叫同样命令时，程序可为一些参数选取以前定义的值作为缺省值，这里也使用以上规则。例如，如第一个 stepping/mapping 轴变量为

SET_AXIS_VARIABLE 1 X(FCC, FE) 0 0.89 0.025

象预先定义的那样一些参数可以改变，而其余保持为缺省值，如

SET_AXIS_VARIABLE 1 , 0.1 , , ,

等同于 SET_AXIS_VARIABLE 1 X(FCC,FE) 0.1 0.89 0.025。

3.4.7 不理解的问题

命令序列中任何时候键入问号“ ? ”将得到所期望回答的简短解释。在某些情况下，可通过键入连续两个问号“ ?? ”获得更广泛的帮助。在中间帮助 session 之后，等到适当回答后问题返回。

3.4.8 帮助与信息

菜单中由两个基本命令来寻求帮助：HELP 和 INFORMATION。不论不理解还是需要更多信息回答问题，最重要的帮助工具是键入一个“ ？ ”的可能性。

命令 HELP 由三个级别：列出全部才]单、列出对共同部分的命令和列出特殊命令的描述。

INFORMATION 命令允许获得关于系统得更通用信息。可给出与系统有关的各种主题，以便更容易理解各种特征。

3.4.9 出错消息

当返回未被恳求的数据库、读取以前创建二进制文件、保存程序状况、进行计算、生成图形或当命令或参数键如不正确或不惟一和不适当时，程序可发出出错消息。一些消息仅对用户信息，而其它错误可以对程序的执行可能是毁灭性的。为更详细了解如何处理不同模块中发生的各种错误消息，请参阅本

手册的其它部分。

3.4.10 控制符

系统的一些部分中控制输出是有用的。在完成之前显示终端的长列的暂停或停止，允许在出现之前读相关信息。如下控制符的键入影响屏幕输出：

ctrl-S　　临时暂停输出和程序并等待 ctrl-Q 来重新开始

ctrl-Q　　重新开始输出和程序

ctrl-C　　终止当前 mpping 区

ctrl-C ctrl-C（快速两次）　终止程序

3.4.11 私人文件

使用 GES 或 POLY 或 PARROT 模块中的 SAVE_WORKSPACE 命令可以用二进制文件保存程序状态，当保存体系和计算结果以便以后使用或有任何原因终止 sessin 时该命令可能有用。该文件依次为 GES5、POLY3 或 PAR 型，同时包含如此多的信息以至于可由相应模块（GES、POLY 或 PARROT）打开，但实用程序以外的文本编辑是不可读的。将保存原始的和修改过的热力学数据、用户设定的最后系列条件和选项以及计算或优化结果。私人工作文件的细节，请参考本手册后面部分中相应章节。

3.4.12 宏工具

若命令交互给出，用户界面可执行具有各种命令的宏文件。该文件最初创建为一个日志（log）文件（SYSTEM 模块中的 SET_LOG_FILE）。通过提问问题和使用其它各部分的回答宏与用户交互作用。更多的信息参阅第 14 部分（系统效用模块 SYS）中中的命令 MACRO_FILE_OPEN。

3.4.13 模块性

Thermo-Calc 由几个利用热力学数据库、进行计算和模拟和提交各种形式的结果的基本应用程序和模块组成。还有一对所谓的特殊的或易于使用的模块，该模块为特定类型的计算和模拟（如二元相图、三元相图、势图、凝固模拟、Pourbaix 图和其它性质图）而设计的，这些特定模块要求只回答系统定义和计算设定的简单问题。下一节和第 5 至 15 部分中对基本和特定模块给出全面描述。

每个基本模块由一个特定用途，即简化新模块的添加和已有模块的改进。每个模块有自己的提示（如 SYS、TDB、GES、TAB、POLY_3、POST、PARROT、ED_EXP），显示系统是否期望用户给出新的命令。每个模块的菜单是不同的，而其中一些可以是公共的或类似的。

有两个与模块结构相关的特殊命令，它们位于所有的模块中。一个命令是 GOTO_MODULE，使用模块名字作为其参数，并将程序转移到特殊模块上。两个例外：在 POLY 和 PARROT 模块中 POST 和 ED-EXP 模块仅分别按命令输入。因此没有必要使用 GOTO_MODULE 命令来访问，因为不可能从 POLY 和 PARROT 以外的模块直接访问 POST 和 EX-EXP 模块。

另一个特殊命令是 BACK，总是切换回到最近的模块。这个命令也可在 POST 和 ED-EXP 模块中工作，但有以上原因连接只是单向的。

3.5 Thermo-Calc 中的模块

表 3-5 种总结了在 Thermo-Calc 软件/数据库/界面软件包中的基本模块和特殊模块，通常不被认为是模块的应用编程界面也列于表中。

3.5.1 基本模块

所有基本模块都是基本命令行并要求研究时化学势的全面理解是执行模块的基础。一下简要介绍基本模块的功能。

表 3-5 Thermo-Calc 软件包中的模块和应用编程界面

级别	缩略名	全称	基本功能
基本模块	TDB	DATADASE_RETRIEVAL	系统定义、数据库选择和数据返回
	GES	GIBBS_ENERGY_SYSTEM	热力学模型与动力学量的处理
	TAB	TABULATION	物质与反应的热力学性质制表
	POLY	POLY	复杂以值平衡计算（单点、一维步进和二维绘图）
	POST	POST_PROCESSOR	所有各种类型计算结果以基于实验数据比较的后处理
	PARROT	PARROT	实验数据评价和热力学数据的建立

	ED-EXP	EDIT_EXPERIMENTS	为优化而进行的实验数据编辑与预处理
	SYS	SYSTEM_UTILITIES	用于工作环境设定和宏创建与打开的通用系统
特殊模块	BIN	BINARY_DIAGRAM	自动计算和绘制二元相图
	TERN	TERNARY_DIAGRAM	自动计算和绘制三元相图
	POT	POTENTIAL_DIAGRAM	自动计算和绘制三元系气体势图
	SCHEIL	SCHEIL_SIMULATION	自动模拟和绘制基于 Scheil-Gulliver 模型的凝固剖面和性质图
	POURBAIX	POURBAIX_DIAGRAM	自动计算和绘制含水系 Pourbaix 图和性质图
	REACTOR	REACYOR	模拟稳定态反应器的化学反应
应用编程界面	TQ	TA-INTERFACE	在 Windows NT/2000/XP 或 Windows 95/98/Me 等下面向应用编程的用户编程界面（以 FORTRAN 语言）
	TCAPI	TCAPI	在 Windows NT/2000/XP 或 Windows 95/98/Me 下，面向应用编程的用户编程界面（以 FORTRAN 和 C 语言）

在 Thermo-Calc 软件中，所有模块与热力学数据分享全部数据区，互相内连接。

TDB 模块允许选择合适的数据库并定义化学系，同时将数据库读入全域数据区；GES 模块允许交互地访问模型同时输入、列表或修改数据；POLY 模块允许设定温度-压力-成分条件并计算平衡与相图；POST 模块可绘制来自平衡计算的各种相图和性质图；TAB 模块允许在一定条件下物质（为化学计量比或溶体相）或化学反应的热力学性质制表；PARROT 模块可将热力学（和在 DICTRA 软件包中动力学）模型参数与实验数据拟合；ED-EXP 模块可帮助编辑实验数据点以便进行可靠的优化；SYS 模块用于与各种操作系统几乎作用并创建和执行宏文档。

3.5.2 特殊模块

特殊的易于使用的模块是以问题行（question-line）为基础的。用户进需要回答某些简单问题来指定化学系和问题。模块自动选择数据、设定所有系统定义和条件、进行平衡计算和模拟、定义绘图变量、绘制和输出期望的相图和性质图。

BIN 和 TERN 模块用于计算二元或三元相图，这两个模块要求特别设计的带有关于各自相图信息的数据库（如 BIN97 和 TERN97）。POT 模块允许快速计算和绘制在给定温度处以两种气体组元的化学势为坐标轴三元系图。SCHEIL 模块模拟固相无扩散的凝固过程，并比平衡凝固更真实。POURBAIX 模块计算包含水溶液的不均匀相互作用体系的 pH-Eh 相图（称作 Pourbaix 图）和性质图。其它具有特定用途的易用的模块最可能在最近将来的 Thermo-Calc 中实现。

另一种特殊的但用户友好性差的模块 REACTOR 允许模拟几种稳定态阶段化学反应，其中第一阶段的输入依赖于其它阶段输出。

用户也可使用基本模块中的工具编写自己的应用模块或程序，这要求具有丰富的应用 Thermo-Calc 软件包的经验和面向应用程序的技巧。对于编程指南和例子，请参考 TCSAB 提供的 TQ 和 TCAPI 文件。

3.5.3 用户与模块之间的交互

在用 Thermo-Calc 软件包进行日常计算和评价时用户与所有基本和特殊模块直接交互，在各种研究与开发活动中应用程序界面显著扩展热力学工具和设备。

3.6 Thermo-Calc 图形用户界面

Thermo-Calc 传统版本 TCC 具有极大的柔性，给出很大的功能性，但也很难学习。记住所有命令和脱离编程要求经常应用。对有经验的用户，还是建议使用 TCC。

然而，连续开发已经对图形用户界面和应用编程界面以及一般模块化的结构界面作了极大改进，这些进步包括更容易的图形用户界面（即 TCW）、应用编程界面（即 TQ 和 TCAPI）和第三方软件工具箱（如 TC-MATLAB 界面），本节和下一节讲座描述。所有这些界面都与很强大的热力学引擎（即 Thermo-Calc 引擎）相连接。这些发展对简单化的材料性质计算和材料过程模拟有重要意义。

3.6.1 Thermo-Calc Windows-完全图形化驱动的 Thermo-Calc

从版本 N 起，全部使用图形的 Thermo-Calc 软件/数据库系统即 Thermo-Calc Windows，TCW 已经发展为在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下应用的版本，TCW 真正容易学习并允许所有各种类型 Thermo-Calc 计算。

初学者发现 TCW 很容易使用。近通过用鼠标点击菜单和按钮而不需要记住命令就可进行复杂的平衡和相图计算。

TCW 的第一个版本(2000 年 6 月发行的 TCW 1.0）略有降低功能化，但是第二版本（2002 年 11 月发行的 TCW 2.1）已经广泛扩展了种类并改进了功能性，可进行 Scheil- Gulliver 模拟、设定开始值、添加成分系列和绘图函数等等。一些函数在特定版本还不能使用，如优化和一些特殊模块（如 POURBAIX、REACTOR 等）。然而，这些函数和特定模块将用于将来的 TCW 版本，在不削减用户友好的情况下改进柔性，完成包含所有 TCC 功能的完整 TCW 版本。

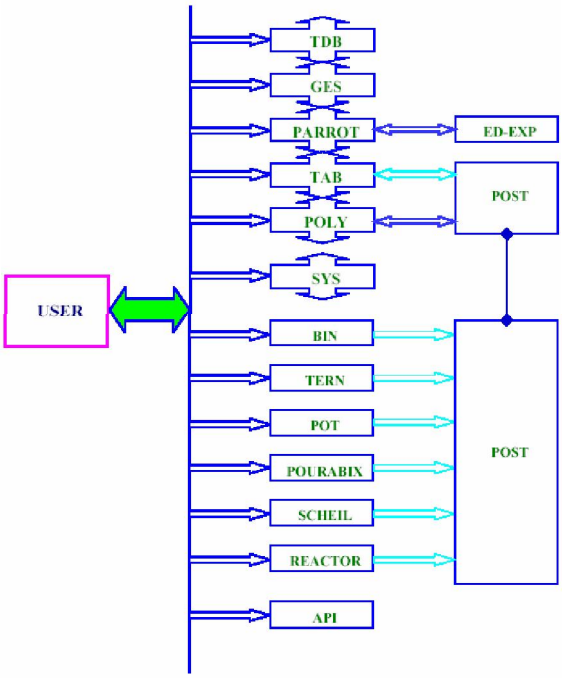


图 3-3　用户与各种 Thermo-Calc 软件包中的模块的交互

运行 TCW 的细节和例子，请参阅 TCW 手册。

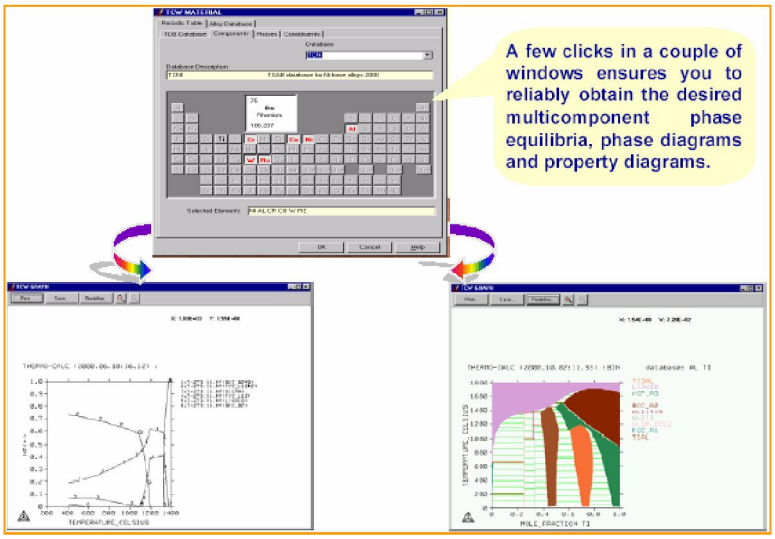


图 3-4 TCW-最容易与 Thermo-Calc 交互的方法

3.6.2 3D 中的 Thermo-Calc 图形

从 TCC 版本 P 起，已经可能通过 VRML（Virtual Reality Modelling Language）浏览器如插入的 web 浏览器或单机程序以高质量三维查看 Thermo-Calc 图，这样的浏览器包括 Cortona VRML 客户（有 ParallelGrraphics 开发的，可从 www.parallelgraphics.com 下载）和其它列于 ww.web3d.org(Wed3D 伙伴)上的 VRML 中的其它查看者。在一些浏览器中，需要设定正确的背景颜色或转向所谓的顶灯以便最佳查看。顶灯总是直接找要在 3D 图上。

这个新的特性适合于表现以两个成分轴和一个温度轴（Z 轴）表示的三元相图，在此情况下，相图可绘制成三角形或四方形。也可用于表现四元相图，其中温度和压力固定下绘制成分空间线。在此情况下，相图可绘制四面体图，其中三个图设定为成分变量。

为了这个特殊目的，已经添加了一个新的命令（CREATE_3D_PLOTFILE），可自动将所有缺省/预定义图形定义信息和选定的数据点（表示和存储在特定表*.TAB 文档中，取自当前和/或以前 MAP/STEP 计算中）转换为适当的格式并为用 VRML 查看创建查看 3D 图的*.WRL 文档。

图 3.5 显示如何用 VRML web 浏览器查看 Thermo-Calc 3D 图的例子。更多细节，请参考 9.7 节。

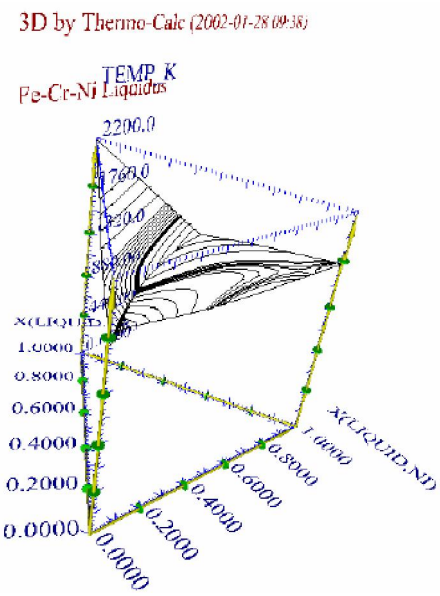


图 3-5 用 VRML 网络浏览器查看的 3Dthermo-Calc 图

3.7 Thermo-Calc 编程界面

3.7.1 Thermo-Calc 作为引擎

对普通用户界面和应用程序界面日益增多的要求在过去的几年里促使开发了热化学引擎，由于强大、有效和灵活 Thermo-Calc 软件/数据库系统，很多 Thermo-Cal 用户也已经使用它作为各种面相应用编程和第三方软件包的引擎。具有如此的联合，可有意义地将 Thermo-Cal 软件的应用扩展到材料性质计算、材料工艺模拟甚至材料工程控制。

Thermo-Calc 引擎被赋予了各个模块的所有重要的功能（图 1-4 和 3-6），可于通过应用编程界面（TQ 和 TCAPI）与用户自己的程序相联接，或通过热化学计算工具框（TC-Toolbox）与第三方软件包（如 MATLAB）相联接。

在材料工艺模拟中使用 Thermo-Calc 引擎最成功的例子是 DICTRA 软件/数据库系统。Thermo-Cal 引擎引导各种关于局域和部分平衡的热力学计算，而 DICTRA 模拟复杂的扩散控制动力学过程（图 3-6）。

在著名的软件包 MATLAB 中最近执行的 TC-toolbox 是另一个应用 Thermo-Cal 引擎的很好例子，利用这个工具箱，用户可在多个研发领域探索 Thermo-Calc 的应用。利用 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件作为热力学于动力学引擎而对全面的材料界面的更复杂的开发，在不远的将来是可进行材料性质计算、材料工艺模拟、材料生产优化和材料利用控制。

3.7.2 Thermo-Calc 应用编程界面：TQ 和 TCAPI

TQ 和 TCAPI 是 Thermo-Calc 应用程序界面的两个独立版本，它们是为应用编程者使用 Thermo-Calc 引擎来编写应用程序，作为核心不需要知道 Thermo-Calc 引擎复杂性或紧跟其不断改进和修正。

利用这个界面，容易使 Thermo-Calc 引擎成为应用程序的一个完整部分，如需要热力学或相平衡数据的工艺模拟或组织演化模型化。使用 TQ 和 TCAPI 可获得的热力学性质和相平衡数据包括：温度、压力化学势、相数量、相成分、分配系数、液相或固相点、不变温度、反应热、绝热燃烧温度及其它。

应用程序编程界面的发展策略如下。应向 Thermo-Calc 用户提供用已经存在得用户界面或 Thermo-Calc 软件包中类似界面编写自己应用程序的可能性。

因此，Thermo-Calc 应用程序编程界面设计了两方面内容（图 3-7）：

- 用 FORTRAN 编写 TQ，目的是可在几乎所有的 CPU 环境下编程，如 PC Windows NT/2000/XP 或 Windows 95/98/ME、PC Linux 和 UNIX 平台（Solaris、SGI 等）。
- 以 FORTRAN 和 C++编写 TCAPI，目的是可在主要的 PC Windows NT/2000/XP 或 Windows 95/98/ME 环境下编写程序。

为了能够运行用户编写的 TQ/TCAPI 界面应用程序，安装在同一计算机或服务器上的 TCC 或 TCW 软件/数据库软件包是有必要，因为要进行各种热力学和平衡计算，该界面必须与 Thermo-Calc 引擎交互作用。

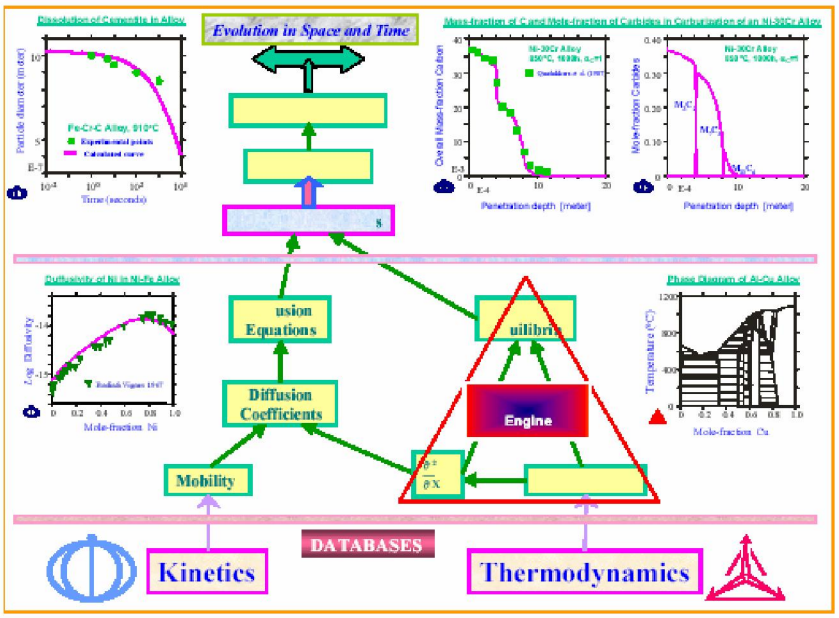


图 3-6 Thermo-Calc 连同 DICTRA 进行扩散模拟

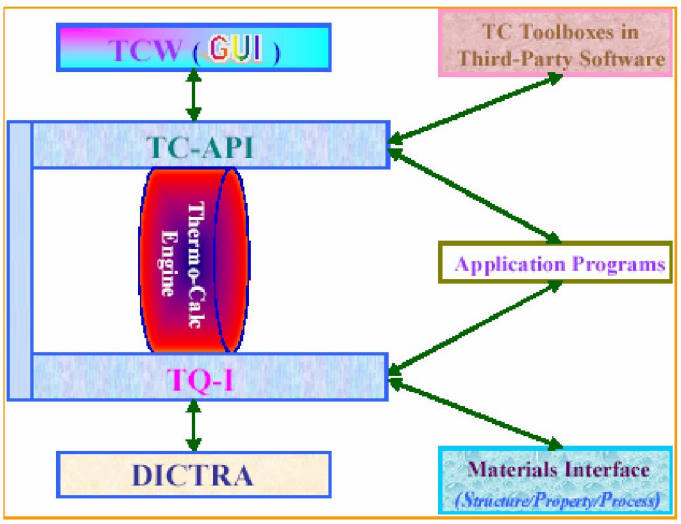


图 3-7 Thermo-Calc 的编程与图形界面

使用 TQ 和 TCAPI 的更多细节和例子请参阅 TQ 和 TCAPI 手册。

使用 TQ 界面计算 T_0 温度的源代码的很简单演示如下：

```
C . . . A number of lines initialising the program
C . . . Do the calculation from minimum carbon content (Xmin) to maxmum carbon
C         content (Xmax) with the increment dX
C
        Do 2000,XC=Xmin,Xmax,dX
          Tmax=Tmax0
          Tmin=Tmin0
          T=(Tmax0+Tmino)*0.5
```

```
      P=101325
      N=1.0
      its=0
C
C Suspend both phase
      call tqcsp(iph1,'SUSPENDED',0,iwsg)
      call tqcsp(iph2,'SUSPENDED',0,iwsg)
C
C Set condition for temperature (T), pressure (P), System size (N) and Composition (X)
      call tqsetc('P',-1,-1,P,numcon,iwsg)
      call tqsetc('T',-1,-1,P,numcon,iwsg)
      call tqsetc('N',-1,-1,P,numcon,iwsg)
      call tqsetc('X',-1,icp,XC,numcon,iwsg)
  100 continue
      its=its+1
      call tqsetc('T',-1,-1,P,numcon,iwsg)
C Calculate the Gibbs free energy for the two phases and store them in gm1 and gm2.
      call tqcsp(iph1,'ENTERED',1,iwsg)
      call tqcsp(iph2,'SUSPENDED',0,iwsg)
      call tqce(' ',0,0,0.0,iwsg)
C
      call tqcsp(iph1,'SUSPENDED',0,iwsg)
      call tqcsp(iph2,'ENTERED',1,iwsg)
      call tqce(' ',0,0,0.0,iwsg)
      gm2=tqggm(iph2,iwsp)
C
C Calculate the relative difference between gm1 and gm2.
C If it is small enough the temperature is approximately the T0-temperature
      gmd=(gm1-gm2)/gm1
      if(abs(gmd).le.eps) goto 200
C
C We did not find the solution, adjust the temperature and do one more iteration.
      if(gmd.lt.0) then
        Tmin=T
        T=(T+Tmax)*0.5
      end if
      if(gmd.gt.0) then
        Tmax=T
        T=(T+Tmin)*0.5
      end if
      goto 100
C
  200 continue
C
```

```
C We have found the solution for this composition.
C Write out composition, T0-temperature and number of iterations.
          write(*,*)'X(C),T,its',XC,T,its
C
   2000   continue
          end
```

图 3-8 为使用 TQ 界面（与一些 DICTRA 扩展）的一个很高级的应用例子。

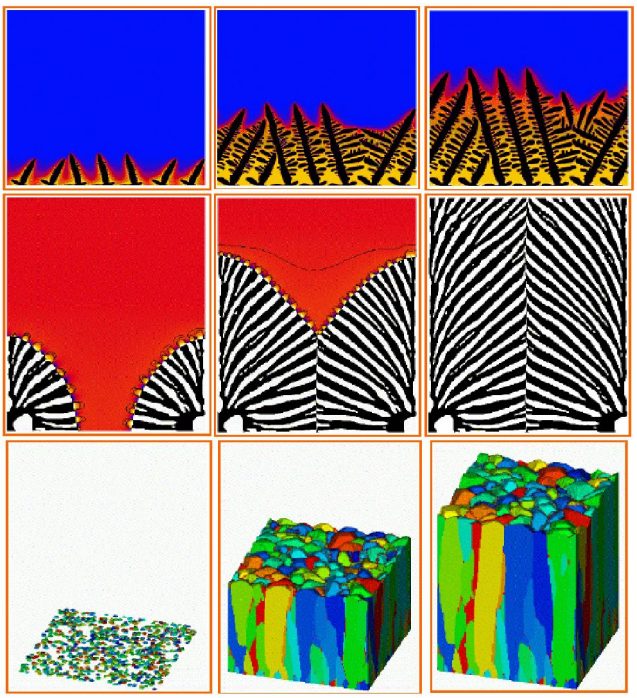


图 3-8 使用 TQ 界面的一个高级例子：MICRESS

MICRESS，以 2 维和 3 维相场软件，现已由我们的德国合作伙伴 ACCESS e.V 发行。该软件为相变过程组织演化模拟而开发，并特别适用于研究不同组织对相变动力学的影响。可研究凝固、固态转变、晶粒长大和再结晶。使用最近版本 TQ4 已与 Thermo-Calc 相连接。适用本版本的 TQ 界面，可将 Thermo-Calc 和/或 DICTRA 中热力学与动力学信息基本上可结合到你的应用软件中。TQ 界面为 MICRESS 处理多元合金中复杂的热力学与动力学行为提供可靠的基础。更多的信息请访问 www.access.rwth-aachen.de。

TCAPI（Thermo-Calc 应用编程界面）是在 MS-Windows 和 Linux 环境下将热力学融合到用户应用程序中的一种通用编程界面。TCW 和 TC-Toolbox 就是形成于这个应用编程界面基础之上的。

TCAPI 在功能上类似于 TQ 界面。然而，在一些重要方面有所不同。

- TCAPI 使用 C 语言编写的，因此它适合于除了 FORTRAN 以外的大多数编程语言的界面。
- TCAPI 包含了 TQ 界面没有的 Thermo-Calc 功能。它提供对 TDB、POLY 和 POST 模块使用的大多数命令和 GES 模块中一些重要命令的访问。

使用 TCAPI，容易建立包含高级热力学计算的特制视窗应用程序。图 3-9 给出使用 TCAPI 界面的简单例子。

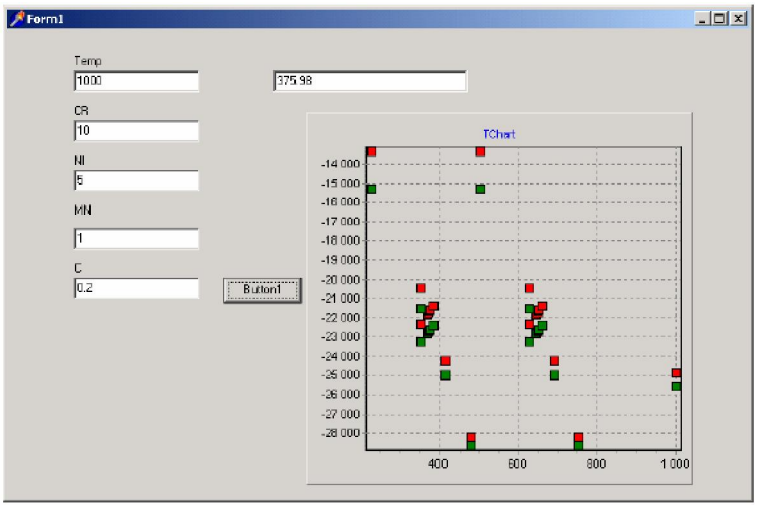


图 3-9 使用 TCAPI 界面的简单例子

3.7.3 在其它软件包中开发 Thermo-Calc 工具箱

从 Thermo-Calc 版本 M 起，在著名的并广泛使用的 MATLAB 软件包为特殊用途的 Thermo-Calc 工具箱（图 3-10）。使用 Thermo-Calc 作为引擎并连接到 TC-API 应用编程界面，该工具箱可用作材料性质计算、材料工艺模拟甚至材料工程控制。

对 MATLAB®与其姊妹软件包（如 SIMULINK®、FEMLAB®）的通用功能和应用，请参照 MathWorks

有限公司（http://www.mathworks.com）和其在世界各地的合作伙伴提供的文件。TCSAB 也向供给者和用户提供一些有帮助的指导，请访问我们的网址（www.thermocalc.com）来得到 TC-Toolbox 文件。

将次工具箱执行到其它第三方编程界面将可能发生在不久的将来。

类似于 TQ 和 TCAPI 应用编程界面的情况，有必要将 Thermo-Calc 软件/数据库胞安装在同一计算机或服务器上，以便运行在这种第三方软件包中的 TC-Toolbox。该工具箱访问 Thermo-Calc 引擎进行各种热力学与平衡计算。

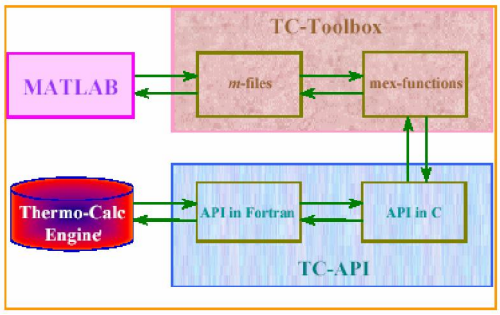


图 3-10 MATLAB®软件包中的 TC-Toolbox

图 3-11 位使用该工具箱进行计算的例子，为使用 MATLAB 中的 TC-Toolbox 进行并绘图三元 A-B-C 表面的液相面的计算。

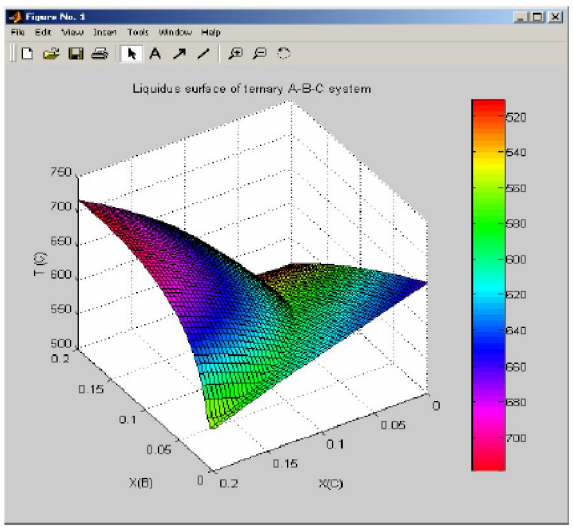


图 3-11 使用 MATLAB 软件中 TC-Toolbox 计算并绘图的 A-B-C 体系的液相面

3.7.4 材料性质计算核材料工艺模拟的应用

在材料性质计算、材料工艺模拟，材料生产优化和材料利用控制方面，有多个使用用户优先应用程序或第三方软件与 Thermo-Calc 引擎互相连络的成功应用。

这种应用已被证实的例子有：

a）高性能合金钢的计算设计

如 North Western 大学（1997）的分级结构材料设计。

b）多元合金中组织演化模拟

如 CISRI（Central Iron & Steel Rresearch Inst.）（1999）的计算机辅助材料设计系统。

利用 Theermo-Calc 和 DICTRA 软件作为热力学与动力学引擎在全面的材料界面领域，在不久的将来会有更有趣的应用。

3.8 Thermo-Calc 的功能

Thermo-Calc 具有宽广的独特功能，表 3-6 总结了该软件与其界面的主要功能。

表 3-6 Thermo-Calc 软件与其界面的主要功能

功能
纯物质或溶体相的热力学性质
化学反应的热力学性质
热力学因数、驱动力
不同种类的平衡（多达 40 种组元和 1000 种组元）
介稳平衡、仲平衡
各种溶体相的最大溶解度
磁贡献（居里温度、磁子数）
静电贡献（Born 函数）、水溶剂/联合
水溶液的传输性质
钢/合金/矿物、气体和超临界流体的高压贡献
特殊量：如 T_0、A_3 温度、绝热 T、激冷系数，∂T/∂X 等
多元相图（多达 5 个轴变量）（二元、三元、等温、iosplethal 等）
性质图（多达 40 种化合物合 1000 个组元）
CVD 图、薄膜形成
气体分亚、挥发物的化学势
涉及水合反应体系的 Pourbiax 图和多个其它图
Scheil-Gulliver 凝固模拟
CVM 计算、化学有序-无序
玻璃转变
钢表面氧化层的形成、钢/合金细化、PRE
热液、变质、火成、沉积、风化过程的演化
侵蚀、再生、重熔、烧结、焚化、燃烧中组元形成
不变反应
基于实验的热力学参数的评价
数据序列或数据库的建立和修正

请参考用户指南中各部分关于 Thermo-Calc 软件（与其界面）中不同模块的各种功能。

3.9 Thermo-Calc 应用

Thermo-Calc 软件包与用于钢、合金、陶瓷、半导体/超导体、汽车工业、食品生产、能量转换、大地材料、环境保护等研发的高质量数据库相连接。有了这些数据库，任何热力学上合理的问题应可定义和计算。

表 3-7 列出了 TCSAB 提供的一些一存在的应用和与 Thermo-Calc 软件和数据库协力的定制数据库。随着新的数据库的不断开发，更全面模型和高级模块的进一步执行，不断矢核心的应用领域。

表 3-7 Thermo-Calc 软件和数据库的一些已存在应用

面向材料	面向工业
钢（包括 SS、HSLA、HS、CI 等	制钢工业
合金(Al-/Ti-/Ni-/Mg-基和其它	合金/超合金生产
硬材料（碳化物、氮化物等）	切削设备、重/精确工具
陶瓷	自动化和航空工业
熔体、矿渣	粉末冶金/流体冶金工业
盐、玻璃	照明设备
半导体/超导体	电子元件
气体、亚超临界流体	能量转换与利用、燃烧
水溶液	环境保护、溶液分离
地球材料	采矿工业（钻石、金、石油等）
核材料	核燃料和废料管理
焊料	建筑工程、化工工程
其它无机材料	再生、烧结、焚化
有机材料	食品生产、脂肪形成

在各种国际杂质和会议上可发现大量 TCC 应用实例。下面列出了最频繁发表 Thermo-Calc 计算与评价结果的杂志：

- Calphad
- Journal of Phase Equilibria
- Metallurgy and Materials Transations (A and B)
- Acta Metallurgy
- Z Metallkde
- Journal of Materials
- Journal of Physics and Chemistry of Solid
- Journal of Alloys and Compounds

第 16 部分中，列出了各种应用的一些选定的参考，可在地方图书馆中找到。

在 TCSAB 网址（www.thermocalc.com）的收藏页上举例说明一些具有代表性的例子。在 Thermo-Calc 例子一书中给出了多个例子。

此外，都与标准化的 Thermo-Calc 引擎内部联接的两个灵活应用编程界面（即 TQI 和 TCAPI）和热力学计算工具箱（MATLAB®软件包中的 TC- Toolbox）已经用在材料性质计算、材料工艺模拟、材料生产优化和材料利用控制中。

第 4 部分 Thermo-Calc 数据库描述

4.1 引言

Thermo-Calc 软件/数据库系统覆盖比任何其它热力学软件包更多的化学计量比和非理想溶体模型和数据库，这些模型和数据库可用于描述大范围温度（高达 6000K）、压力（高达 1Mbar）和成分的钢、合金、矿渣、盐、陶瓷、焊料、聚合物、亚临界水溶液、超临界电解液、非理想气体和水热流体、有机物等。

各种材料的高质量热力学数据是获得可靠热力学计算和模拟的基础，正如第 3 部分（3.3 节）提到的那样，这样的数据必须建立在严格评价的基础上。过去的 20 年里已取得了巨大成绩，通过国际国内合作已经建立了多个内部自洽数据库或数据序列，如 CALPHAD 集团、SGTE 学会、Ringberg 论坛，CAMPADA 协会、STT 基金、NIST 协会、ThermoTech 公司、NPL 实验室，TGG 项目、UES/AEA 合作等。

在 SGTE 学会内部，在为各种材料体系建立热力学数据库上已经取得大量成就，在大范围的元素、无机和冶金物质上已有一些独特的数据库。在这种合作下，KTH-MSE 和 TCSAB 已经对高专业质量数据库的开发做出了连续的贡献。

来自独立来源（如 Thermo-Calc 有限公司、UES 软件股票上市公司、NPL、TGG）的一些其它数据库已经转换为 Thermo-Calc 格式，从 TCSAB 及其带里可以得到。

本部分已给出了各种 Thermo-Calc 数据库的一些简要描述，然而，这种描述将初步包含其元素和相、特殊应用、原始制作者和当前联系人。本手册没有给出详细数据。

至于 Thermo-Calc 数据库的数据结构和格式，可参考第 3、5 和 6 部分的相关章节。

4.2 Thermo-Calc 数据库描述形式

表 4-1 略述来自 TCSAB 或我们的合作者的所有当前 Thermo-Calc 数据库，每个数据库将在下面的页描述。

请注意，由于 TCSAB 为避免在各手册提到的这样产品、形式和情报的文件方面的混淆而残用的对软件/数据库/界面系统产品命名新的策略，一些数据库的名称已掠有修改。对缩写数据库名，可用最大 4 个同样的符号，随意地一个数字参考版本数，若有主要更新（如 PSUB、PAQ2、PURE4、SSUB3、TCFE、NSOL4 等）。数据库的全名可参考主要更新和次要的连续版本号，以及发行日期，如 PURE4-SGTE Pure Element Database (Version 4.4, 2002)；SSUB3-SGTE Substances Database (Version 3.1, 2001/2002)。对数据库名称和数据库版本历史有任何疑问的人可参阅特殊数据库描述格式的说明。

表 4-1 当前 Thermo-Calc 数据库列表

缩写名	全称（和版本数与发行时间）	研制者	Avail.	更新	页
PURE4	SGTE 纯元素数据库(v4.4, 2002)	SGTE	1	Y	73
PSUB	TC 公共物质数据库(v1, 1998)	TCSAB	1	N	74
PBIN	TC 公共二元合金数据库(v1, 1997)	SGTE, TCSAB	1	Y	74
PTER	TC 公共三元合金数据库(v1, 1998)	TCSAB	1	Y	74
KP	Kaufman 二元合金数据库(v1, 1990)	LK	1	N	75
CHAT	Chatenay-Malabry 后过渡二元合金数据库(v1, 1998)	CM	1	N	76
COST2	COST507 轻合金数据库(v2, 1998)	COST507	1	N	77
SSUB3	SGTE 物质数据库(v3.1, 2001/2002)	SGTE	2	Y	78
SSOL2	SGTE 溶体数据库(v2.1, 1999/2002)	SGTE	2	Y	79
TCFE_subset	TC 钢数据库(v1, 1992; TA-Fe, Tc-Alloy)	KTH-MSE	2	Y	80
TCFE2	TCSAB 钢/铁基数据库(v2, 1999)	TCSAB	2	Y	81
TCFE3	TCSAB 钢/铁基数据库(v2, 2002)	TCSAB	2	Y	82
SLAG2	TC 含铁矿渣数据库(v2.0, 2002)	TCSAB, IRSID	2	Y	83
ION2	TCSAB 离子溶体数据库(v1.0, 1998)	KTH-MSE	2	Y	84
PION	TC 公共离子氧化物溶体数据库(v1, 1998)	TCSAB	1	N	85
SALT	SGTE 融盐数据库(v1.3, 1993)	SGTE	2	Y	85
TCNI	TCSAB 镍基超合金数据库(v1.0, 2000)	TCSAB, ND	2	Y	86
G35	ISC III-V 族二元半导体数据库(v1, 1994)	ISC	1	N	87
SEMC2	TC 半导体数据库(v2.0, 2002)	USTB-MSE	3	Y	88
TTAl	TT 铝基合金数据库	TT	3	Y	89
TTTi	TT 钛基合金数据库	TT	3	Y	90
TTMg	TT 镁基合金数据库	TT	3	Y	91
TTNi	TT 镍基合金数据库	TT	3	Y	92
TCMP2	TCSAB 材料工艺数据库	TCSAB, PS	2	Y	93
TCES	TCSAB 烧结/焚化/燃烧数据库(v1,2000)	TCSAB,PS	2	Y	94
PAQ2	TC 适于 Pourbaix 模型公共含水数据库(v2.0,2002)	TCSAB	1	N	95
TCAQ2	TCSAB 水溶液数据库(SIT model; v2.0, 2002)	TCSAB	2	Y	96
AQS2	TGG 水溶液数据库(HKF model; v2.0, 2002)	TGG	2	Y	97
GEO	Saxena 矿物数据库(仅对物质) (v1, 1993	TGG	1	N	98
GCE2	TGG 地球化学/环境数据库(v2.0, 2002)	TGG	2	Y	99
NUMT2	UES 纯放射性核数据库(v2.0, 1999)	UES	3	Y	100
NUOX4	UES 核氧化物溶体数据库(v4.0, 1999)	UES	3	Y	101
NUTA	UES Ag-Cd-In 三元溶体数据库(v1.0, 1991)	UES	3	Y	102
NUTO	UES Si-U-Zr-O 金属-金属氧化物溶体数据库(v1.0, 1996)	UES	3	Y	103
NSOL4	NPL 合金溶体数据库(v4.7, 2001)	NPL	3	Y	104
NAL5	NPL 铝基合金数据库(v5, 2001)	NPL	3	Y	105
NOX2	NPL 氧化物溶体数据库 (v2, 2000)	NPL	3	Y	106
NSLD2	NPL 焊料溶体数据库 (v2, 1999)	NPL	3	Y	107
USLD1	NIST 焊料溶体数据库 (v1, 1999)	NIST	3	Y	107
more*					

研制者：CM-法国 Chatenay-Malabry 大学；COST507-学学技术研究 507 项目欧洲合作组织；FCT-瑞典斯德哥尔摩计算热力学基金会；ISRID：法国 Institut de Recherches de la Siderurgie Franscaise；ISC：Ansara 等（1977）非正式科学协作组；KTH-MSE：瑞典斯德哥尔摩 KTH 材料科学与工程系；LK：美国 MIT 的 Larry Kaufman；ND：法国 Nathalie Dupin；NIST：美国国家标准与技术研究所；NPL：英国国家物理实验室；SGTE：欧洲热数据科学小组；SP：美国纽约飞利浦•斯宾塞；TCSAB：瑞典斯德哥尔摩 Thermo-Calc 软件 AB；TGG：美国佛罗里达国际大学理论地球化学小组和瑞典 Uppsala 大学；TT：英国 ThermoTech 有限公司；UES：美国 UES 软件 plc.；USTB-MSE：中国科技大学材料科学与工程系。

Avilable：1-自由分布于 TCC/TCW 和 TC4A/TC4W；2-来自 TCSAB 及其代理商业性的；3-来自 TCSAB 及其研制者商业性的

更新：Y-不定期更新或扩展；N-不存在正常的更新。

more*：成为新的数据或更新任何数据库，Thermo-Calc 数据库描述的整个文档将很快修订，并在网上（www.thermocalc.com）公开。

Thermo-Calc 数据库描述形式

PURE4

SGTE 纯元素数据库

（版本 4.4，2002）

研制者：SGTE，欧洲热数据科学小组

联系人：瑞典斯德哥尔摩 Bo Sundman 和 Pingfang Shi

描　述：该数据库仅可用于在进行多元系评价工作或纯元素热力学性质制表或绘图中提取纯元素的热力学数据。

在 SGTE 物质数据库 SSUB 和 SGTE 溶体数据库 SSOL（SGTE,1996、2001、2002）以及多个合金溶体数据库（如 TCFE2、TCNI、COST2、SEMC、TTAl/Mg/Ni/Ti、NSLD 等）和其它类型材料（如 TCMP、TCES、ION、SLAG、SALT、TCAQ、AQS、GEO、GCE、NUMT、NUOX 等）专门的溶体数据库中利用了所有纯化学元素的同样描述

SGTE 纯元素数据库的状态：现行版本 PURE4（版本 4）于 2001 年由 SGTE 更新，并由 Bo Sundman 和 Pingfang Shi 转换和编辑为 TC 数据库格式。从 PURE3（从 1998 年起可以使用的）到 PURE4，化学体系已经从 83 种元素扩展到包含 16 个附加元素（Ac-Ar-At-Cf-Cm-Es-Fm-Fr-He-Kr-Ne-Pm-Po-Ra-Rn-Xe）和两个氢同位素（D 和 T）。

体　系：PURE4 现在覆盖总共 99 个元素和两个氢同位素，列出如下：

Ac	Ag	Al	Am	Ar	As	At	Au	B	Ba	Be	Bi	Br	C	Ca	Cd	Ce
Cf	Cl	Cm	Co	Cr	Cs	Cu	Dy	Er	Es	Eu	F	Fe	Fm	Fr	Ga	Gd
Ge	H	He	Hf	Hg	Ho	I	In	Ir	K	Kr	La	Li	Lu	Mg	Mn	Mo
N	Na	Nb	Nd	Ne	Ni	Np	O	Os	P	Pa	Pb	Pd	Pm	Po	Pr	Pt
Pu	Ra	Rb	Re	Rh	Rn	Ru	S	Sb	Sc	Se	Si	Sm	Sn	Sr	Ta	Tb
Tc	Te	Th	Ti	Tl	Tm	U	V	W	Xe	Y	Yb	Zn	Zr			
D	T															

应　用：各种应用

可用性：自由分布于 TCC、TCW、TCC-Demo/TC4C 和 TCW-Demo/TC4U

参　考：Dinsade A. (1991) SGTE data for pure elements Calphad, 15, 317-425.

SGTE(1996) The SGTE Casebook: Thermodynamics at Work(Ed. Hack K.). The Institute of Materials, London, 227p.

SGTE(2000) The SGTE Solution Database (SSOL version 1.2)

SGTE(2001) The SGTE Substance Database (SSUB version 3.0)

SGTE(2000) The SGTE Solution Database (MSSOL version 4.0)

Thermo-Calc 数据库描述形式

PSUB、PBIN 和 PTER

TC 公共物质、二元和三元合金数据库

（版本 1，1997/1998）

研制者：Thermo-Calc Software AB，斯德哥尔摩，瑞典瑞典

联系人：瑞典斯德哥尔摩 Thermo-Calc Software AB 的 Pingfang Shi

描　述：这三个公共数据库特别设计为演示一些特殊数据库（SSUB 物质数据库的 PSUB）或高级模块（BIN 模块的 PBIN 和 TERN 模块的 PTER）的应用。也存在同样意图的类似公共数据库，如 PION（为氧化物/硫化物/氮化物的 ION 离子溶体数据库，参阅 Thermo-Calc 数据库描述形式 ION）、PAQ（为 TCAQ 水溶液数据库和 POURBAIX 模块，参阅 Thermo-Calc 数据库描述形式 PAQ 和 TCAQ）。

这种公共数据库仅包含公开发表的一些小体系的数据，其中一些设计为商业数据库的子集，以便显示简单应用。

体　系：所有这些公开数据库为有限的体系而设计：

TC 公共物质数据库 PSUB

- 覆盖的体系有 Cu-Fe-H-N-O-S
- 包含气相（大约 100 种气体）和大约 50 个凝聚相（固体或液体、化学及量比和溶体相）

TC 公共二元合金数据库 PBIN（注意以前称为 BIN97）

- 覆盖 21 种元素体系 Ag-Al-C-Co-Cr-Cu-Fe-Mn-Mo-N-Nb-Ni-O-Pb-S-Si-Sn-Ti-V-W-Zn；
- 包含大约 40 个二元溶体（液体与固体）和多个化学及量比相，作为 SSOL 数据库的子数据库但仅包含公开发表的数据；
- 目前仅是适合 TCW 二元相图模块的数据库。

TC 公共三元合金数据库 PTER（注意以前称作 TER98）

- 覆盖体系 Al-C-Cr-Fe-Mg-Si-V；
- 包含两个完整三元亚体系（Al-Mg-Si 和 Fe-Cr-C）和一个临时的三元亚体系（Fe-V-C），为 TC-FE 和 COST2 数据的子集。

应　用：合金设计和工程

实用性：自由分布在 TCC、TCW、TCC-Demo/TC4A 和 TCW-Demo/TC4U。

Thermo-Calc 数据库描述形式

KP

Kaufman 二元合金数据库

（版本 1，1990）

研制者：美国波斯坦 Man Labs 公司 Larry Kaufman

联系人：瑞典斯德哥尔摩 Thermo-Calc 小组 Bo SundMan

描　述：该数据库最初发表在 Calphad 杂质的一些列文章中，这些文章覆盖的二元系包括 Fe、Cr、Ni、B、C、Co、Mo、Nb、Ti、W、Mn、Al、Si 和 Cu，依据 1984 年的 Calphad 第 8 卷第 1 期对 C 系进行了修正。

体　系：下面列出的二元合金：

	Al	B	Be	C	Co	Cr	Cu	Fe	Mn	Mo	Nb	Ni	Si	Ti	W
B	*														
Be															
C	*	*													
Co	+	*	+	*											
Cr	*	*		*	*										
Cu	*	*	+		*	+									
Fe	*	*	+	*	*	*	*								
Mn	*	*		*	*	*	*	*							
Mo	*	*		*	*	*		*							
Nb	*	*		*	*	*	*	*							
Ni	*	*	+	*	*	*	*	*	*	*	*				
Si	*	*		*	*	*	*	*	*	*	*	*			
Ti	*	*		*	*	*	*	*	*	*	*	*	*		
W	*	*		*	*	*		*				*	*	*	

注：*=有数据，+ =有数据但尚未加入到数据库

该数据库没有定期更新，数据于 SGTE 数据库不兼容。

应　用：合金设计与工程

实用性：实用性：自由分布在 TCC、TCW、TCC-Demo/TC4A 和 TCW-Demo/TC4U。

参考文献：Kaufman L. (1984-1990)

Thermo-Calc 数据库描述形式

CHAT

Chatenary-Malabry 后过渡二元合金数据库

（版本 1，1999）

研制者：Laboratoire de Chimie Physique Minirale et Bioinorganique, Faculte de Pharmacie, Chatenay-Malabry, France。

联系人：瑞典斯德哥尔摩 Thermo-Calc 小组 Bo Sundman

描　述：该数据库由包含气相数据的多个后过渡二元合金系组成。使用 Lukas 程序优化了体系（没有气相）并借助 Suzana Fries（1998）开发的软件的使用转换为 TC 格式。从 SSUB（SGTE 物质数据库）附加了气相描述。

体　系：该数据库包含以下 11 种后过渡元素：

Au　Bi　Cd　Ge　Sb　Se　Si　Sn　Te　Tl　Zn

数据库中二元系包括：

Au-Ge、Au-Si、Au-Te、Bi-Sb、Cd-Ge、Cd-Te、Cd-Zn、Ge-Sn、Se-Te、Si-Te、Zn-Te

不久体系将包括：Ge-Te、Sn-Se、Tl-Te

注意：对元素 Se 和 Te，气相的 Gibbs 能函数中分别添加了-116522J/mol 和-42000J/mol 以便得到与 ASM 所给的值一致的沸点。

对于 Bi，在 SSOL 中没有气相，介绍的 Bi-Sb 系没有气相

应　用：合金设计与工程。

实用性：自由分布在 TCC、TCW、TCC-Demo/TC4A 和 TCW-Demo/TC4U。

参考文献：ASM(1992) ASM Handbook, Volume 3, Alloy Phase Diagrams, Materials Park, Ohio, USA

Chevalier P. Y. (1989) Thermochimica Acta, 141, 217-226.

Ghosh G., Lukas H. L. and Delaey L. (1988) Calphad, 12(3), 295-299.

Zabdyr L. and ZaKulski W. (1993) Archives of Metallurgy, 38(1), 3-18.

Thermo-Calc 数据库描述形式

COST2

COST2 氢合金数据库

（版本 2.0，1998）

研制者：COST507 Project: Round II, European Commission

联系人：瑞典斯德哥尔摩 Thermo-Calc Sostware, Åke Jansson

描　述：该数据库是在有 EU COST 507 Project, Round II（COST 1998）建立的对氢合金严格评价工作基础上开发的。有来自 14 欧洲国家（奥地利、比利时、芬兰、法国、德国、希腊、荷兰、挪威、葡萄牙、西班牙、瑞典和英国）和瑞士及俄国的 28 个机构参与的计划贡献于新的轻合金的开发。评价的数据的品质可从一个子体系到另一个子体系变化，因此推荐该数据库的使用总是要小心。若用于工业合金，某些子体系可能需要调整。该数据库提出了一个好的教学资源和对轻合金学术研究的公正合理的基础。

体　系：数据库包含如下 19 种元素：

Al	B	C	Ce	Cr	Cu	Fe	Li	Mg	Mn
N	Nb	Ni	Si	Sn	V	Y	Zn	Zr	

应　用：轻合金设计与工程

实用性：自由分布于 TCC 和 TCW，但是只对 TCSAB 请求有相应。

参考文献：COST(1998) COST 507—的 Definition of Thermochemical and Thermophysical Properties to Provide a Database for the Development of New Light Alooys. European Cooperation in the Field of Scientific and Technical Research, European Commission.

Vol 1. Proceedings of the Final Workshop of COST 507, Vaal, the Netherland, 1997

Vol 1. Thermochemical Database for Light Metal Alloys (Eds. Ansara I. Dinsdale A.T., and Rand M. H.)

Vol 1. Critical Evaluation of Ternary Systems (Ed. Effenberg G.)

Thermo-Calc 数据库描述形式

SSUB3

SGTE 物质数据库

（版本 3.1，2001/2002）

研制者：SGTE，欧洲热数据科学小组

联系人：瑞典斯德哥尔摩 Thermo-Calc Sostware AB, Bo Sunman 和 Pingfang Shi

描　述： SSUB3 物质数据库基于以前的 1998 年的 SSUB2 版本于 2001 年更新（2002 年 4 月作了一些小的改动），现在包含 101 种元素的化学构架内（与 PURE4 相同）评价过的的大约 5000 种凝聚态或气体组元。这些数据产生于 SFTE 或来自经过严格评价的不同来源，如 TCRAS、JANAF、Kubaschwski、Barin 和 Knache。对每种化合物或组元，给出参考文献。数据服从 ITPS 90 温度尺度。所有热力学数据取自 1 bar。所有数据的参考态缺生设定为 298.15K 和 1 bar 下的纯元素。

每种化合物或组元的数据包含：

- 298.15K 时的形成焓（相对纯元素），
- 98.15K 时的熵（来自第三定律积分或估计），
- 常压下从 298.15K 到气态热容与温度的关系。

该数据库特别用于

- 热力学数据制表，
- 反应和平衡常数的计算与制表，
- 没有固溶度的多元系复杂气相平衡计算。

元素的描述与 SGTE 纯元素数据库（版本 4）PURE4 种相同，具有明确的磁性和压力函数关系。

使用如下命令将 SSUB3 数据库挂到 SSOL3 数据库上：

```
tc
go data
switch SSOL3
def-sys …list of elemets…
get
append SSUB3
def-sys …list of elemets…
get
go p-3
```

SGTE 物质数据库的地位：该数据库于 1994 年、1998 年和 2001 年由 SGTE 完全修改，并已定期更新和每次用心的化合物来扩展。商业性分发在 Thermno-Calcde 当前版本 SSUB3 为 2001 年的更新版本（2002 年 4 月由 Bo Sunman 和 Pingfang Shi 作了一些微小改动）。从 SSUB2（自 1998 年起的）到 SSUB3，其化学构架已经从 83 种元素（象在 SSOL2 和 PUBE3 一样）扩展了 16 种附加元素（Ac、Ar、At、Cf、Cm、Es、Fm、Fr、He、Kr、Ne、Pm、Po、Ra 和 Xe）和 2 个氢的同位素，其溶量从大约 4000 种到大约 5000 种凝聚态或气体组元。

体　系：SSUB3 现覆盖与 PUBE4 同样的化学构架（即 99 种元素和 2 个氢的同位素，参阅 Thermo-Calc 数据库描述形式 PUBE4），并包含大约 5000 种凝聚态或气体组元。气体混合相为数据库种仅有的溶体相，并在所有温度、压力和成分下处理为里相溶体。对其它的溶体相，从分开的数据库中添加来处理各种特殊合金、离子氧化物/硫化物/氮化物…溶体、炉渣、融盐、焊料、半导体、矿物、核材料、水溶液和有机物/溶体。

应　用：合金设计与工程、无机材料。

实用性：商业分配于 TCC 和 TCW。

Thermo-Calc 数据库描述形式

SSOL3

SGTE 溶体数据库

（版本 2.1，1999/2002）

研制者：SGTE，欧洲热数据科学小组

联系人：瑞典斯德哥尔摩 Thermo-Calc Sostware AB, Bo Sunman 和 Pingfang Shi

描　述：SSOL2 溶体数据库为 83 种化学元素组成的多个非里相溶体相的复杂而重要的数据库。几个评价过的体系的合并可计算和外推高阶多元系。这种外推要求经验和理解，同时若有问题应与研制者和卖主联系。

元素的描述与 SGTE 纯元素数据库（版本 4）PUBE4 种的描述相同。SSOL2 数据库于 PURE4、SSUB3 和 TCAQ2 数据库兼容。

SGTE 溶体数据库的地位：该数据库于 1992 年最初由 SGTE 创建并于 1993 年 11 月第一次发布，1997 年、1999 年及以后进行了完整修订。销售种包含的实际体系可能不同，是由于各种更新和消除有矛盾的地方。商业性分配给 Thermo-Calc 的当前版本 SSOL2 是 1999 年更新的版本（2002 年 4 月由 Bo Sunman 和 Pingfang Shi 作了一些微小修正）。

体　系：SSOL2 覆盖 83 化学元素，列出如下：

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	Rh	Re	Rh	Ru	S	Sb	Sc	Se	Si	Sm	Sn	Sr
Ta	Tb	Tc	Te	Th	Ti	Tl	Tm	U	V	W	Y	Y	Zn	Zr		

评价过数据的 106 种二元系种凝聚相如下

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、Aal-Zr、As-Tl
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
Fe-Si、Fe-Ti、Fe-V、Fe-W、Ga-Ge、Ga-In、Ga-Pb、Ga-Sn、Ga-Zr、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

评价过数据的三元和多元系凝聚相如下

Ag-Au-Ge、Ag-Au-Si、Ag-Cu-Pb、Al-As-Ga-Ge、Al-Ga-Ge、Al-Ga-In、Al-Ge-Sn
Al-Mg-Si、Al-Si-Zn、Au-In-Pb、Bi-Ga-Zn、C-Co-Cr、C-Co-Cr-W、C-Co-Fe、C-CO-Fe-Ni
C-Co-Fe-Ni-W、C-Co-Fe-W、C-Co-Ni、C-Co-Ni-W、C-CO-W、C-Cr-Fe、C-Cr-Fe-Mo
C-Cr-Fe-Mo-W、C-Cr-Fe-W、C-Cr-Ni、C-Cr-W、C-Fe-Mn、C-Fe-Mn-V、C-Fe-Mo
C-Fe-Mo-W、C-Fe-N、C-Fe-Nb、C-Fe-Ni、C-Fe-Ni-W、C-Fe-Si、C-Fe-W、C-Mo-W
C-Ni-W、Co-Cr-W、Co-Fe-Mn、Co-Fe-Ni、Co-Fe-W、Co-Ni-W、Cr-Mo-W
Cr-Fe-Mo-W、Cr-Fe-N、Cr-Fe-N-Ni、Cr-Fe-Ni、Cr-Fe-Ni-Co、Cr-Fe-W、Cr-Mo-W
Cr-Ni-W、Cu-Fe-Ni、Cu-Fe-P、Fe-Mo-W、Fe-Ni-W、Ga-Ge-Sn、Mg-Sb-Sn、Sn-Pb-Te

应　用：合金设计与工程、无机材料。

实用性：商业分配于 TCC 和 TCW。

Thermo-Calc 数据库描述形式

TCFE_subset

TC 钢数据库

（版本 1，1992）

研制者：瑞典斯德哥尔摩 KTH-MSE 计算热力学部门

联系人：瑞典斯德哥尔摩 KTH-MSE Thermo-Calc 小组 Bo Sunman

描　述：TCFE_subset 钢数据库（以前的名称为 TC-FE92 或 TC-Alloy）由自 1978 年起该部门对钢吨；价过的数据所组成，描述了对钢的凝固和热处理有意义的体系。该数据库取代 1978 年以前积累的旧的称作 Fe-base 的数据库数据库。在 1978 年，纯 Fe 的描述变化到包括明确的磁性描述，要求对所有评价进行完全修改。TCFE_subset 数据库是 SGTE 溶体数据库的一个略有修正的子集。最新的版本发布于 1992 年，在 1998-1999 年间，TCFE 数据库被更新包含了另外种元素（Al、B、Cu、Mg、O、P 和 S），并包括更多的经系统评价的实验数据（一些相的模型已经改进）。更新的数据库命名为 TCFE2（详细情况参阅下面的 Thermo-Calc 数据库描述形式 TCFE2）。

体　系：TCFE_subset 覆盖二元和一些三元系以及一些高阶系富 Fe 角完整而又严格的评价，其中有 13 个化学元素：

C　Co　Cr　Fe　Mn　Mo　N　Nb　Ni　Si　Ti　V　W

合金元素推荐极限为（重量百分数）

元素	最大值	元素	最大值	元素	最大值	元素	最大值
C	5.0	Mn	15.0	Nb	5.0	Ti	1.0
Co	15.0	Mo	15.0	Ni	20.0	V	1.0
Cr	30.0	N	1.0	Si	1.0	W	20.0

推荐温度范围从 700ºC 到 2000ºC。略超过推荐极限的计算可能给出合理的结果但要求正确外推数据和节式计算结果的经验和技巧。与已知合金的比较在应用到新材料之前总是要测试计算的有效性。液相、奥氏体、铁素体、渗碳体和 $M_{23}C_6$、M_7C_3 和 M_6C 碳化物的数据良好，氮的数据主要评价了不锈钢，即奥氏体、铁素体、ε 相和 MN 氮化物。金属间化合物 σ，μ，Laves 缺乏可靠性。

注意数据库种下列相的使用

相	数据库	相	数据库	相	数据库
奥氏体	FCC#1	铁素体	BCC	α-Mn	CBCC-A12
$M(C, N)_x$	FCC#2	$M_2(C,N)$	HCP#2	β-Mn	CUB-A13

数字符#用于表示同一相的不同成分组。

该数据库没有定期更新，但是与 SGTE 溶体数据库兼容。

应　用：钢的设计与工程

实用性：商业分配于 TCC 和 TCW。

Thermo-Calc 数据库描述形式

TCFE2

TCSAB 钢/Fe 基合金数据库

（版本 2.0，1999）

研制者：瑞典斯德哥尔摩 Thermo-Calc Software AB

联系人：瑞典斯德哥尔摩 KTH-MSE Thermo-Calc 小组 Bo Sunman

描　述：TCFE2 钢/Fe 基合金数据库由 TCSAB 发布于 1999 年，以前称为 TC-FE2000 或 TCEF2K。与 KTH 的材料科学与工程系在 CAMPADA 方面的合作，TCSAB 在 1998-1999 年间已经开发了新的钢/Fe 基合金数据库，该数据库建立在 TC-FE92 钢数据库基础上并包含了至 1998 年的具有意义的钢和 Fe 基合金系的所有新的评价。Byeong-Joo Lee 博士和 Bo Sunman 教授已经指导了更新。

体　系：TCFE2 覆盖二元和一些三元系以及一些高阶系富 Fe 角完整而又严格的评价，其中有 20 个化学元素：

Al　B　C　Co　Cr　Cu　Fe　Mg　Mn　Mo

N　Nb　Ni　O　P　S　Si　Ti　V　W

该数据库可用于 Fe 含量大于 50wt%并包含下列合金元素的钢（推荐合金含量极限为重量百分数）

元素	最大值	元素	最大值	元素	最大值	元素	最大值
Al	5.0	Cu	1.0	Nb	5.0	Si0	5.0
B	痕量	Mg	痕量	Ni	20.0	Ti	2.0
C	5.0	Mn	20.0	O	痕量	V	5.0
Co	15.0	Mo	10.0	P	痕量	W	15.0
Cr	30.0	N	1.0	S	痕量	Fe	≥50

第 5 部分 数据库模块（TDB）——用户指南

5.1 引言

多元体系相图计算的问题之一是，找到描述各种平衡的有效参数，相关问题是以在所有相中相同状态查阅元素的方法获得参数。

将可能得到的参数转换为相同标准态是单调乏味的工作，同时出错也是很平常的。在将来的应用程序中使用相同的转换参数完成这项工作具有很大优点。世界上几个不同研究小组进行了这项工作，本领域则小组之一是欧洲热数据科学小组（SGTE），该小组已经收集和评价了大量数据，通过两个不同数据库文件可得到这些数据。

为了方便，已经开发了容易返回热力学数据的热力学数据库模块 TDB。

TDB 模块包括在 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件包中来进行管理、选择和返回各种热力学与动力学数据。

在 TDB 模块中有下列命令

```
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:
```

注意，新命令 SET_AUTO_APPEND_DATABASE 命令添加到了 TCCP 中，而两个以前的命令（EXCLUDE_SPECIES

和 MERGE_WITH_DATABASE）分别在 TCCN 和 TCCP 中。

5.2 TDB 模块中用户界面

TDB 模块中用户界面是为交互式计算机会议构建的，其主要特点是命令监视器通过键入适当命令来控制程序动作。也有另一种界面将应用程序发送到监视器。

TDB 命令经常由连字符或下划符分开的几个词组成，连字符和下划符认为是等同的。一些主要关键词有第二关键词。这个第二关键词可用连字符或下划符连接到主要关键词，或者以一般参数相同的方式用空格或逗号与命令关键词分开。命令可用明确的一组字母来缩写以便缩短连字符之间的每部分。

若命令的保留部分对区别命令不必要可以省略命令的这部分。很多命令要求指定一些参数值，按<RETURN>键，程序讲弹出这些值。

通常，在斜线之间建议缺省命令值，并通过按<RETURN>键来选择。若用户知道命令要求的参数可在同一行输入一个命令（如是可应用的，有第二关键词）和所有参数，否则，分开输入命令之后跟着出现提示。

5.3 开始

Therno-Calc 和 DICTRA 系统使用的 TDB 模块允许用户依据选定数据库定义一个体系和返回该体系的热力学和/或动力学数据。这样做的直接方法是使用下面依次描述的命令。一些命令是必要的，而一些命令是可选的但还是有用的和有信息量的。

5.3.1 SWITCH-DATABASE

SWITCH-DATABASE 用于改变缺省数据库。提示 TDB_XYZ 的第二部分显示现在数据库，如 TDB_SSOL 是 SSOL 数据库。

5.3.2 LIST-DATABASE ELEMENT

LIST-DATABASE ELEMENT 给出一列现在数据库中可以得到的元素。关键词 ELEMENT 可用 SPECIES、PHASE 或 CONSTITUENT 代替。

5.3.3 DEFINE_ELEMENTS

DEFINE_ELEMENTS <list of elemente>是提示用户输入体系重要定义的所有元素的命令。

5.3.4 LIST_SYSTEM CONSTITUENT

LIST_SYSTEM CONSTITUENT 给出一列可从定义的体系中形成的相。相名之后列出的元素实干相的组成要素。

5.3.5 REJECT PHASE

REJECT PHASE <list of phases> 告诉数据库无论指定哪个相都不返回任何数据。关键词 SYSTEM 可用于重新开始数据库。

5.3.6 RESTORE PHASE

RESTORE PHASE <list of phases>与 REJECT 命令相反，但这个命令不能使用关键词 SYSTEM。

5.3.7 GET_DATA

GET_DATA 搜索数据库并将定义的体系加入到 GES5 和/或 DICTRA 工作区。只有执行该命令才能进入如 GES、POLY 或 DICTRA 应用程序并利用返回的数据。

5.4 所有 TDB 监视命令的描述

在 TDB 监视其中所有实行的命令以字母顺序出现（如第 5.1 节的引言中所示）。大多数命令将发出次提示请求参数值。本文中并不明确结示所有次提示，只有认为必要的才给出解释。

5.4.1 AMEND_SELACTION

描述：该命令可在（用命令 DEFENE_ELEMENTS 或 DEFINE_SPECIES 或 DEFINE_SYSTEM）定义后的元素或组元或体系之后使用。随后的提示允许改变到预先定义的体系。通过回答 Y（是）或 N（否），每个以前选定的元素、组元或相但不是组成或整个体系，可接受或拒绝。进行其它修改的紧跟着的提示也可用回答 Q（放弃）而放弃。

提要：AMEND_SELECTION [keyword]
紧跟着的提示：keep <name1> NO/Quit /Yes/:
keep <name2> NO/Quit /Yes/:
… … …
选项：keyword --ELEMENTS/SPECIES/PHASE
name& --预先定义或预先选择的元素/组元/相的名称

5.4.2 APPEND_DATABASE

描述：该命令从一个文件或附加数据库将数据添加到已从其它数据库读取的当前数据序列中。已从其它数据库读取并存储在 Gibbs 能系统中的数据保持在 GES5 工作区。

APPEND_DATABASE 命令也将对已存在的相输入所有附加参数（相组成、G0 和交互作用参数等），同时相的所有已有参数（相组成、G0 和交互作用参数等）由来自悬挂数据库返回值替代。

APPEND_DATABASE 命令类似于 SWITCH_DATABASE 命令，但不重新初始化 TDB 模块和 GES5 工作区，因此等同于 SWITCH_DATABASE USER 序列。进一步信息参阅 SWITCH_DATABASE。

按<RETURN>键时没有给定任何讨论则列出由原始数据库初始化文件（PC Windows NT/2000 /XP 或 Windows 95/98/ME 环境下的/DATA/区中 TC_INITD 文件，或各种 UNIX/Linux 工作站\data\区的 initd.tdb 文件）或使用 NEW_DIRECTORY_FILE 命令以后用户指定数据库初始化文件预先定义的所有直接连接的数据库。用户通过先给出讨论 USER 后给出数据库名和正确路径（如不在当前工作目录下）也可补充自己的数据库。

该命令第一次执行后 TDB_XYZ：提示（XYZ 代表起初转换的数据库名）变换到 APP：与悬挂数据有关的进一步进行的命令的提示。

提要 1：APPED_DATABASE <additional database name>
提要 2：APPED_DATABASE
跟着的提示：Use one of these database
PURE = SGTE pure element database
SSUB = SGTE substabce database 1997
USER = user defined database
DATABASE NAME /XYZ/: <additional database name>
选项：additional database name-已有数据库名或与悬挂数据库相应的 USER 数据库定义文件（***setup.TDB）名
注意：Windows NT/2000 /XP 或 Windows 95/98/ME 环境下，若在 APPED_ DATABASE 命令行没有给出 USER 数据库名或其路径或者数据库名或路径不完整，将弹出 Open file 窗口，所以可适当指定路径（在 Look in 框）和数据库名（在 File name 框）。用户可打开选择的数据库，或者可以取消这样的 Windows 对话，后一种情况下，程序将列出预先定义的数据库同时用户可随后指定其中之一来转换或再次进行 USER 选项。

Windows NT/2000 /XP 或 Windows 95/98/ME 环境下，若悬挂两个或更多数据库于最初转换的数据库，该命令可多次访问。在各种 UNIX/Linux 工作平台下，只能使用 SWITCH_DATABASE USER 命令序列连接到第二个和以后的悬挂数据库。

此命令之后，必须重复那些定义体系（依据元素或组元）、放弃/存储相或组元以及返回数据命令，然而，其第二关键词和参数值可以不同于以前的。

5.4.3 BACK

描述：控制回到最近模块，也可参阅 GOTO_MODULE。
提要：BACK

5.4.4 DATABASE_INFORMATION

描述：通过键入次命令正常给出当前数据库的简短描述，包括所覆盖体系、使用的模型温度和成分下的

参数有效范围、主要应用等信息、

提要：DATABASE_INFORMATION

5.4.5 DEFINE_ELEMENTS

描述：该命令可用于依据元素定义体系，从数据库将返回给定元素形成的所有可能组元，元素的不同名称必须用空格或逗号分开。元素名普通部分之后可使用通配符“＊”，以便将以普通部分开始的和当前转换或悬挂的数据库中的所有元素定义到体系中。注意，从 TCC 的版本 N 起，单个体系可定义多达 40 种元素（以前为 20 种元素）。

提要：DEFINE_ELEMENTS <element1, element2, …>

选项：element&　--将一列元素定义。

注意：当悬挂数据库时，该命令或命令 DEFINE_SPECIES 或 DEFINE_SYSTEM 必须用首次转换的数据库定义的相同或相似的元素来重复。细节参阅命令 DEFINE_SYSTEM。

5.4.6 DEFINE_SPECIES

描述：该命令可用于依据组元定义体系。只有给定的那些组元才将返回。组元的不同名称必须用空格或逗号分开。组元名普通部分之后可使用通配符“＊”，以便将以普通部分开始的和当前转换或悬挂的数据库中的所有组元定义到体系中。注意，从 TCC 的版本 N 起，单个体系可定义多达 1000 个组元（以前为 400 个组元）。

提要：DEFINE_SPECIES <species1, species2, …>

选项：species&　--将一列组元定义到体系中。

注意：当悬挂数据库时，该命令或命令 DEFINE_ELEMENTS 或 DEFINE_SYSTEM 必须用首次转换的数据库定义的相同或相似的元素来重复。细节参阅命令 DEFINE_SYSTEM。

5.4.7 DEFINE_SYSTEM

描述：命令依据 ELEMENTS（等同于 DEFINE_ELEMENTS）或 SPECIES（等同于 DEFINE_SPECIES）定义体系。某些数据库有关键词（ELEMENTS 或 SPECIES）的缺省值，该关键词在定义体系时反映最合适的是什么的。

元素或组元的不同名称用空格或逗号分开。元素或组元名普通部分之后可使用通配符“＊”，以便将以普通部分开始的和当前转换或悬挂的数据库中的所有组元定义到体系中。

提要 1：DEFINE_SYSTEM <element1, element2, …>

提要 2：DEFINE_SYSTEM

紧跟的提示：ELEMENTS: <element1, element2, …>

提要 2：DEFINE_SYSTEM

紧跟的提示：SPECIES: <species1, species2, …>

选项：SPECIES 或 ELEMENTS　（缺省关键词）——只有某些情况下询问

elements&　　--将给出定义体系的一列元素

species&　　--将给出定义体系的一列组元

注意：当悬挂数据库时，该命令或命令 DEFINE_ELEMENTS 或 DEFINE_SPECIES 必须用首次转换的数据库定义的相同或相似的元素来重复。然而，用户应知道不同数据库将包含不同元素并具有不同的组元定义，因此应避免定义悬挂数据库中缺少的元素/组元，否则，程序将只是这种缺少的元素/组元并在以后步骤中忽略这些元素/组元。但是，在第一次转换的数据库种每有的附加的元素/组元，当然有附加的相可从悬挂的数据库中定义并返回。

注意到从 TCC 版本 N 起，可将多达 40 种元素和 100 个组元定义到单个体系中（以前为 20 个元素和 400 个组元）。

5.4.8 EXCLUDE_UNUSED_SPECIES

描述：该命令排除了不能输入的从组元列表中（用 LIST_SYSTEM SPECIES 命令序列）当前定义的任何相的组元，以便保存程序工作区。然而，从 TCC 版本 N 起该命令无效，因为现在计算机存储器不

是大的问题。

5.4.9 EXIT

描述：该命令终止程序并返回到操作系统。除非执行 SAVE 命令（在 GES、POLY3 或 PARROT 模块），否则所有的结果将丢失。

提要：EXIT

5.4.10 GET_DATA

描述：该命令将定义体系的元素、组元、相和从最初转换的或附加悬挂的数据库中获得的连接参数输入 GES5 和/或 DICTRA 工作区。该命令对从数据库中返回关于定义的体系的信息是必要的。

提要：GET_DATA

注意：只有执行次命令之后才可能进入如 GES、POLY 或 DICTRA 这样的应用程序并利用返回的数据。当悬挂数据库时，必须重复次命令以便或的附加的体系定义、参数和函数。

5.4.11 GOTO_MODULE

描述：该命令在不同模块之间切换。还必须键入所期望的模块名。为了获得可用模块列表，按<RETURN>键。

提要 1：GOTO_MODULE <module name>

提要 1：GOTO_MODULE

接着提示：module name --随后打开的模块名

注意：没有键入一个指定且唯一的模块名时按<RETURN>键将列出所有 TCC 模块，如下：

```
NO SUCH MODULE, USE ANYTHESE:
   SYSTEM_UTILITIES
   GIBBS_ENERGY_SYSTEM
   TABULATION_REACTION
   POLY_3
   BINARY_DIAGRAM_EASY
   DATABASE_RETRIEVAL
   FUNE_OPT_PLOT
   REACTOR_SIMULATOR_3
   PARROT
   POTENTIAL_DIAGRAM
   POURBAIX_DIAGRAM
   TERNARY_DIAGRAM
MODULE NAME <module name>
```

5.4.12 HELP

描述：该命令列出可以得到的命令或给出指定命令的解释。

提要 1：HELP <command name>

提要 2：HELP

接着提示：COMMAND: <command name>

选项：command name --要获得的命令（TDB 命令之一）的名称

注意：没有键入命令名时按<RETURN>键将列出 TDB 所有命令

指定一个唯一的 TDB 命令将在屏幕上打印出该命令的解释（通常与用户指南中的内容相同）。

键入不是唯一缩写的命令将列出所有匹配的命令。通过键入示意缩写或完整命令名可获得期望的命令信息。

5.4.13 INFORMATION

描述：该命令给出几个关于数据库模块和数据库管理的题目的信息。

提要：INFORMATION
接着提示：WHICH SUBJECT /PURPOSE/: ?

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

PURPOSE
= =>on what the INFORMATION command does for
HELP
= =>on how to get help for various TDB command
USER INTERFACE
= =>on how the user interface of TDB module works
EASY TO USE GUIDE
= =>on how to get started with the TDB module
EXTENDED COMMANDS
= =>on how to use extended commands in the TDB module
DATABASES
= =>on how the TC databasea are developed and provided
MANAGEING DATADASES
= =>on to how to manitain TC databases
INITIALIZATION OF TDB MODULE
= =>on how to initialize the TDB module
SHORT USER-DEFINED DATABASE GUIDE
= =>a short guide on user-defined database
LONG USER-DEFINED DATABASE GUIDE
= =>a long guide on user-defined database
DICTRA EXTENSIONS
= =>on DICTRA extensions in the TDB module
EXAMPLES OF DATABASE DEFINITION FILES
= =>some examples of database definition files

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

选项：下列题目之一应是指定的和唯一的：

PURPOSE --给出 TDB 模块的介绍，如 5.1 节所示。
HELP --介绍如何得到各种 TDB 命令的帮助，如 5.4.12 节所示。
USER INTERFACE --描述 TDB 模块的用户界面，如 5.2 节所示（用户界面）
EASY TO USE GUIDE --列出 5.3 节所示的所有基本命令（启动）
EXTENDED COMMANDS --描述 TC 中数据库频谱，包括免费分配的和其它商业性的
MANAGING DATABASES --描述 TC 数据库的产生与管理，如 6.1 节所示
INITIALIZATION OF TDB MODULE -- 描述如何初始化 TDB 模块，如 6.2 节所示
SHORT USERDEFINED DATABASES -- 给出如何构造用户数据库的简短描述
LONG USERDEFINED DATABASES -- 给出如何构造用户数据库的详细描述，如 6.3 节所示
DICTRA EXTENSIONS --给出如何使用用户数据库 DICTRA 扩展的详细描述，如 6.4 节所示
EXAMPLES OF DATABASE DEFINED FILES –演示两个用户定义数据库的例子，如 6.5 节所示

5.4.14 LIST_DATABASE

描述：此命令列出现在数据库中所有元素、组元、相或项组成。

提要：LIST_DATABASE [keyword]

选项：keyword --关键词 ELEMENTS、SPECIES、PHASES 或 CONSTITUENT 必须用于指示列出的是什么：

ELEMENTS – 所有元素、参考态、原子量、H298-H0 和 S298。一些元素在参考态栏中有空间，这预示着这个元素没有存储参数。

SPECIES -- 同化学计量比因数一起所有组元。

PHASES -- 与每个亚点阵中亚点阵数和位置数一起所有相。

CONSTITUENT – 所有相、每个亚点阵中亚点阵数位置数以及每相涉及的组元。不同亚点阵中的组元用冒号（：）分开。重要的是，认识到若下方面，如一相可由 Fe、Mo、V 和 Cr 组成，其热力学参数来自二元系 Fe-Mo、Fe-V、Fe-Cr 和 Mo-Cr。这些数据可给出 Fe-Cr-Mo 角上相对好描述，但确定给出 Mo-Cr-V 系的不良描述，是由于缺省设定的交互作用参数为来源于数据库中不包括的二元系的零。

5.4.15 LIST_SYSTEM

描述：此命令列出定义体系中所有的元素、组元、相或相组成。只用体系定义后才起作用。

提要：LIST_SYSTEM [keyword]

选项：keyword – 关键词 ELEMENT、SPECIES、PHASES 或 CONSTITUENTS（如在 LIST_DATABASES 之一必须用于指出列出什么。

5.4.16 MERGE_WITH_DATABASES

描述：此文件和数据库从附加数据库中获得数据并将其合并到已从其它数据库读取得当前数据列。已从其它数据库读取并存储在 Gibbs 能系的数据保持在 GES5 工作区。替代旧的 APPEND_DATABASE 命令并几乎等同于更新的 APPEND_DATABASE 命令除非该命令将参数输入到已存在的相中。

然而，该命令从 TCC 版本 P 起已不失效。推荐使用 APPEND_DATABASE 命令来代替。详细情况参阅 5.4.2 节（APPEND_DATABASE）。

5.4.17 NEW_DIRECTORY_FILE

描述：该命令打开由局域管理员或用户生成的一新数据库初始文件（或称作数据库目录文件）来访问元是数据库初始文件没有预先定义的附加数据库。从 TCC 版本 M 起可用。

原始数据库初始文件由 TCC 安装原本自动复制到独立安装定位的局域计算机和服务器安装的相联的服务器的主数据库区。\DATA\区中 TC_INIT（或 TC_INIT.TDB）文件在处在 PC Windows NT/2000/XP 或 Windows 95/98/ME 环境的 TCPATH 参数定义的目录下，或者\DATA\区中 initd.tdb 文件处在 PC Linux 和各种 UNIX 工作站（SUN Solaris, SGI 等）的 TC_DATA 参数定义的目录下。然而，若一次安装过多的数据库或若有为一些特殊目的的一些用户指定数据库，局域数据库管理可能产生一些附加数据库初始化文件，或者每个用户可能有自己的初始化文件。

命令可在原始与附加数据库初始化文件之间切换 TDB 模块中数据库组的工作初始化。TCC 可使用几个定义访问各数据库组路径的附加数据库文件，这些数据库位于由 TCPATH 或 TC_DATA 参数定义的目录下的不同子目录中。所有可直接访问的数据库保持在同一组中，直到访问或撤销该命令。

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

提要 2：NEW_DICTORY_FILE

接着提示：File with database dictionary /TC_INITD/: <database-initiation-file name>

选项：another database-initiation-file name -- 在接着的 session 要切换的下一个数据库初始化文件（或是附加的或是元是的）的名称。

注意：若 TCC 在 Windows NT/2000/XP 或 Windows 95/98/ME 环境下使用，若文件名或其路径在 NEW_DICTORY_FILE 命令的同一行没有给出，或者若是部完整或不正确，在屏幕上弹出一个 Open file 窗口，来指定新的数据库初始化文件。路径（在 Look in 箱中）和数据初始化文件名（在 File name

箱中）可适当选择。取消该窗口则退出程序。

然而，若在 UNIX/Linux 平台上运行 TCC，这个新数据库初始化文件必须位于当前工作目录下（TCC 从这里开始）。

如何构建附加数据库文件的细节参阅 6.2 节的细节（TDB 模块的初始化）。

5.4.18 REJECT

描述：此命令拒绝已定义的元素和组元形成的元素、组元、相或项组成。可能在定义的体系中形成的相/组元/组成从体系的相/组元/组成（用 LIST_SYSTEM 命令显示）的列表中去除。不包含在列表中的相/组元/组成在没有实现存储的情况下不能输入。不同名必须用空或逗号分开。在名称的公共部分之后可使用通配符“＊”以便从定义的体系中拒绝所有的一公共部分开始的并在当前切换或悬挂的数据库中的相/组元/组成。

此命令也能拒绝一个定义的体系，从而重新初始化中各 TDB 模块存储器和 GES5 工作区。

提要 1：REJECT [keyword]　　（若 keyword=ELEMENTS 或 SPECIES 或 PHASES）

接着提示：keyword: <name1, name2, …>

提要 2：REJECT [keyword]　　（若 keyword=CONSTITUENT）

接着提示：PHASE: <phase name>

SUBLATTICE NUMBER: <sublattice number in the phase>

CONSTITUENT: <constituent(s) in the sublattice of the phase>

提要 3：REJECT [keyword]　　（若 keyword=SYSTEM）

选项： keyword -- ELEMENTS/SPECIES/PHASES/CONSTITUENT/SYYSTEM

name& -- 预先定义的元素/组元/相/组成的名称

注意：关键词 ELEMENTS、SPECIES、PHASES、CONSTITUENT 或 SYSTEM 之一必须用于指示拒绝什么：

ELEMENTS：将拒绝给定的元素。

SPECIES：将拒绝给定的组元，使不可能从所定义的元素来形成这些组元。

PHASES：将拒绝给定的相，使不可能从所定义的元素来形成这些相。

CONSTITUENT：将拒绝一相的给定成分。

SYSTEM：TDB 模块重新设置初始条件，GES5 重新初始化并将丢失已经输入到 GES5 的数据。

在拒绝组成的情况下，在后续提示中将指定进一步细节

PHASES：包含要拒绝组成的相的名称。

SUBLATTICE NUMBER：输入组成的亚点阵（第一个亚点阵为 1）。若只有一个亚点阵可忽略。

CONSTITUENT：要拒绝的组成的名称。

5.4.19 RESTORE

描述：该命令与 REJECT 命令相反，也就是，恢复已经明确拒绝的元素、组元、相或组成，但不能恢复完全拒绝的体系。可能从已定义的元素或组元形成的相/组元/组成输入到体系的相/组元/组成（用 LIST_SYSTEM 命令来显示）的列表中。不包含在列表中的相/组元/组成现在不能添加到列表中。不同的名称必须用空或逗号分开。在名称的公共部分之后可使用通配符“＊”以便以此公共部分开头的在当前切换或悬挂的数据库中的所有相/组元/组成在定义的体系中将得到恢复。

提要 1：RESTORE [keyword]　　（若 keyword=ELEMENTS 或 SPECIES 或 PHASES）

接着提示：keyword: <name1, name2, …>

提要 2：REJECT [keyword]　　（若 keyword=CONSTITUENT）

接着提示：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&　　-- 预先定义的元素/组元/相/组成的名称

注意：关键词 ELEMENTS、SPECIES、PHASES 或 CONSTITUENT 之一必须用于指示恢复什么：

ELEMENTS：将恢复给定的元素。

SPECIES：将恢复给定的组元因此可能从所定义的元素来形成这些组元。

PHASES：将拒绝给定的相，因此可能从所定义的元素来形成这些相。

CONSTITUENT：将恢复一相的给定成分。

在恢复组成的情况下，在后续提示中将指定进一步细节

PHASES：包含要恢复组成的相的名称。

SUBLATTICE NUMBER：输入组成的亚点阵（第一个亚点阵为 1）。

CONSTITUENT：要恢复的组成的名称。

5.4.20 SET_AUTO_APPEND_DATABASE

描述：此命令促使为具有当前数据库（也就是 TDB 模块中缺省数据库或用 SWITCH_DATABASE 命令设定的数据库，参见 5.4.21 节）中定义的相的同一体系从悬挂数据库（用此命令设定）来悬挂热力学数据的自动动作。当进行 DICTRA 模拟时为定义的体系同时返回热力学和迁移率数据库是有用的。

此命令将在定义体系（用命令 DEFINE_SYSTEM、DEFINE_ELEMENT 或 DEFINE_SPECIES）和从首先切换的数据库中返回数据（由 GET_DATA 命令来执行）之前使用。

此命令的作用方式类似于 APPEND_DATABASE database-name 命令（参见 5.4.3 节），只能悬挂首先切换的数据库中的相。不能手工列出、拒绝和/或恢复悬挂数据库中的相。当通过执行 GET_DATA 命令后返回数据时，将自动拒绝存在于悬挂数据库中但不在起初切换的数据库中的所有相。此提示将为起初切换数据库所保持为 TDB_XYA（其中 XYZ 表示起初切换数据库的名称），直到实行 GET_DATA 命令为止。

因此，若要有选择地从次级数据库将更多的相悬挂到将定义的并从起初切换数据库返回的体系上，应使用 APPEND_DATABASE 命令或那些相续的命令（如 DATABASE_INFORMATION、DEFINE_SYSTEM、DEFINE_ELEMENT、DEFINE_SPECIES、LIST_SYSTEM、REJECT、RESTORE 和 GET_DATA）。

提要 1：SET_AUTO_APPEND_DATABASE <additional database name>

提要 2：SET_AUTO_APPEND_DATABASE

接着提示：DATABASE NAME /XYZ/: <additional database name>

选项：additional database name – 已存在数据库或与悬挂数据库相应的 USER 数据库定义文件（***setup.TDB）的名称

注意：尽管不可能手工从悬挂数据库列出、拒绝和恢复任何相，但是 TDB 模块将自动忽略在起初切换的数据库和悬挂数据库中不存在的任何相，并仅为来自悬挂数据库的相悬挂数据，当执行 GET_DATA 命令后在屏幕上告知。

5.4.21 SWITCH_DATABASE

描述：此命令将当前数据库切换到（或改变到）新的数据库，同时为定义数据库重新初始化整个 TDB 模块和为存储返回数据重新初始化 GES5 工作区。由原始数据库初始文件（PC Windows NT/2000/XP 或 Windows 95/98/ME 环境的/DATA/区中 TC_INITD 文件，或所有 UNIX/Liux 工作站的\data\区中的 initd.tdb）或由使用 NEW_DIRECTORY_FILE 命令后的用户指定数据库初始文件预先定义的所有直接联接的数据库，在没有给出任何讨论时按<RETURN>列出。用户还可通过首先给出讨论 USER 然后给出数据库名和期正确路径（若其不在当前工作目录下）补充自己的数据库。提示 TDB_XYZ 的第二部分指示现在数据库 XYZ。

提要 1：SWITCH_DATABASE <new database name>

提要 2：SWITCH_DATABASE

接着提示：Use one of these database

…

PURE = SGTE pure element database

…

SSUB = SGTE substance database 1997

…

USER = user define database

DATABASE NAME /XYZ/: <new database name>

选项：new database name – 现存数据库或 USER 数据库定义文件（***setup.TDB）的名称。

注意：DATABASE NAME：通过键入在预先定义数据库之一中的前部给出的缩写指定的新数据库。为了方便，当切换/悬挂自己的数据库或后从 TCSAB 或其代理处购买的数据库时，可简单地将这些数据库添加到预先定义的数据库列表中，该列表存在于安装 TCC/TCW/DICTRA 软件的数据库安装文件 TC_INITD 或 initd.tdb 中，请参考 2.2.2.2 和 6.2 节。

若选定 USER 选项，必须提供包含 USER 数据库定义的文件与其路径。在各种 UNIX/Linux 工作站下，USER 数据库的文件名或预先定义数据库的文件名可在接着提示下使用：

FILENAME：带有正确路径的 USER 数据库定义文件（***setup.TDB）的有效文件名或一线定义数据库名，却省文件名的扩展名为 .TDB。

在 Windows NT/2000/XP 或 Windows 95/98ME 环境下，若在 SWITCH_DATABASE 命令的同一行没有给出 USER 数据库名或其路径，或者若不完整或不正确，将弹出 Open file 窗口，因此要适当指定路径（在 **Look in** 框中）和数据定义（SETUP）文件名（在 **File name** 框中）。接着用户可打开选择的 USER 数据库，或可取消这个 Windows session，后一种情况下，程序将列处所由预先定义的数据库同时用户可接着指定一个要转换的数据库或再次进行 USER 选项。

USER 数据库在没有初始化 Gibbs 能系统时也可使用，来自不同数据库的数据因此可进行组合，所以，SWITCH_DATABASE USER 命令序列等同于 APPEND_DATABASE 命令。必须仔细检查组合的结果，因为标准态、相模型和名字的差异可能是很糟的。若在几个这样的切换或悬挂数据库中出现相同参数，后返回的将用于计算。大数据库使用这种方法是不可取的，因为它们加载很慢。

在此命令之后，可进行定义体系（依据元素或组元）、拒绝/恢复相或组元、返回数局以及从附加数据库悬挂数据等命令。

5.5 扩展命令

以下所有命令可接受通配符 * 作为<list of names>中的一个名字，来指示特殊的含义。特殊名/?和/ALL 已是可以的。问号给出每次登陆时执行命令的选项。这些对 DEFINE，REJECT 和其它 TDB 命令特别有用。

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>

举例：

DEF_SYS /?	（询问定义所有元素）
DEF_SYS /ALL	（要定义所有元素）
DEF_SYS * FROM va TO fe	（要定义从 VA 到 FE 的元素）
DEF_SYS * FIRST LAST	（要定义所有元素）
DEF_SYS /？ FIRST fe	（询问定义到 FE 的元素）
DEF_SYS * va fe	（要定义从 VA 到 FE 的元素）

DEF_SYS * 1 5　　（要定义从 5 个第一元素）

元素等的次序作为 LIST_DATABASE 命令。

一个*也可用在名称的模未来指示参考从后起到*的所有的名称。

第 6 部分 数据库模块（TDB）——管理指南

6.1 引言

Thermo-Calc 是热力学计算和自动绘制相图的复杂软件，使用对给定系列条件的总的 Gibbs 能最小化方法，程序中没有包括描述给定相的热力学性质的实际数据，相反，计算需要的热力学量由一组称作 Gibbs 能系统（GES）的通用子程序来提供。

在定义热力学计算界面之前几次定义子程序和计算程序。到那时，给定相的 GES 需要的 Gibbs 能参数或多或少靠手工键入并存入单独文件。连同计算界面一起，要有界面到存储热力学参数的数据库和数据结构的额外开发。

然而，当开始现在的数据库软件工作时，认为界面和数据结构过多限于 GES 中从分利用重要工具。另一方面，建议的数据结构基于连接的列表概念，有效的搜索算法可容易写。实际执行可能必须使用“关系数据库”软件制作非常依赖硬件的数据总库来完成，因为每个计算机制造者有自己的这样软件。原始数据结构的另一些缺点于更新和维护有关

为获得进一步经验，决定使用更简单方案，利用相续的文件和以字符代码存储的数据。数据的维护可用标准文本编辑起来进行。这种方法允许软件和数据更轻便于其它计算机和操作系统。开发的模块命名为 **Thermodynamic DataBase module**，以下总是称作 TDB⇒。

随着越来越大数据库的需求，原始程序已经略作修改来容纳不同类型随机访问数据存储文件。

近些年，瑞典斯德哥尔摩的 KTH（皇家技术学院）的材料科学开发了扩散控制相变（DIffuson-Controlled phase TRAnsformations）(**DICTRA**)。除了热力学数据之外，DICTRA 还需要动力学数据，也就是，扩散或迁移率数据。DICTRA 的基础是累积的热力学计算软件包和上面提到的数据管理程序。因此，动力学数据扩展到对下面出现的数据库定义文件有效的原始序列关键词。以 TDB 模块能容易适合于计算程序使用的另外类型动力学数据的方式进行这种扩展。DICTRA 扩展在分开的章节（6.4 节）给处。

6.2 TDB 模块的初始化

下面各段将介绍如何来构造数据库初始化文件（或称数据库目录文件）来用 TDB 模块工作，从一开始，TDB 寻找一特殊文件，该文件有已经预先定义的数据库（免费分布于 TCC/TCW/DICTRA 软件包中，从 TCSAB 或其代理处购买或用户创建）的信息。

数据库初始化文件在 PC Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 上目前称作 TC_INITD.TDB 或在 PC Linux 和 UNIX 工作站（SUN Solaris 和 SGI）上称作 initd.tdb，但是更好的方法是定义一个环境，将名字为 TC_INITD（或 initd.tdb）转换为一次安装的所有用户公共的初始化文件名。这个公共文件由 TCC 安装原稿自动复制到由 TCPATH 参数（Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 上）在定义的目录下的\DATA\区，或者由 TC_DATA 参数（在 Linux 和 UNIX 上）定义的目录下的/data/区。数据库管理员可在独立安装定位的局域计算机或服务器安装的联网服务器上找到它。

当编辑或修改 TC_INITD 或 initd.tdb 文件中数据库的初始化参数（包括缩写名、路径和子目录、数据库定义文件名和指示数据库描述）的定义时，应使用特殊的格式，带有三个紧跟的域解释如下：

- 第一个域给出数据库的缩写名（当前限于最大 5 个字符）
- 第二个域指定文件名，包含数据库路径定义和实际数据库定义（SETUP）文件名。SETUP 文件名在 Windows 95/98/ME 环境下必须由最大 8 个字符的主要部分和最大 3 个字符的扩展部分组成（如 SSOLSERU.TDB），而在 Windows NT/2000/XP 或各种 UNIX/Linux 工作站可以任意长（如 SSOLSETUP.TDB 或 ssolsetup.tdb）。对于数据库路径定义，向后斜线‘\’用于 Windows NT/2000/XP 或 Windows 95/98/ME，向前斜线“/”用于 PC Linux 和所有 UNIX 工作站。所有数据库正常位

于 TCPATH 参数（在 Windows NT/2000/XP 或 Windows 95/98/ME 上）定义的或由 TC_DATAC 参数（在 UNIX/Linux 上）定义的目录下的子目录中，或在其在目录\DATA\或/data/下的子目录中。

- 第二个域（最大 60 个字符）详述可选的数据库描述的全名。

每次登陆记录（也就是对一个单个数据库）必须以感叹号“ !”结束。

尽管写每个登陆一行或两行的书库总是对的（还要以符号!结束），通常推荐将第三个域加到 PC Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境的第一和第二个域的同一行上，或加到各种 UNIX/Linux 工作站的接着一行上。下面是定义三个名为 PURE4、SSOL2 和 TCFE2 的数据库的初始化文件的例子：

在 PC Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下：

SSOL2 TCPATH\DARA\SSOL2\SSOL2SETUP.TDB SGTE Solutions Database version 2 !

PURE4 TCPATH\DARA\PURE4\PURE4SETUP.TDB SGTE Pure Elements Database version 4 !

TCFE2 TCPATH\DARA\TCFE2\TCFE2SETUP.TDB TCSAB Steels/Fe-Alloys Database version 2 !

在 UNIX/Linux 工作站下：

ssol2 TC_DATA/data/ssol2/ssol2setup.tdb SGTE Solution Database version 2 !

pure4 TC_DATA/data/pure4/pure4setup.tdb SGTE Pure Element Database version 4 !

tcfe2 TC_DATA/data/tcfe2/tcfe2setup.tdb TCSAB Steels/Fe-Alloys Database version 2 !

在 PC Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下，TCW 安装正常与 TCC 共享多个目录，包括\DATA\区和数据库初始化文件 TC_INITD。DICTRA 安装（在 PC Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下）相同：安装原稿对\DATA\区中在\DATA\区寻址 DICTRA 数据库，数据库管理员或用户将 DICTRA 数据库（正常保存在隶属于 DICTRA 数据库的 TC_INITD.ADD 文件中）的数据库初始化行拷贝到数据库初始化行 TC_INITD 的末端。

为了方便，当切换/悬挂自己生成的数据库或后来从 TCSAB 或其代理处购买的数据库时，可简单地将其添加安装 TCC/TCW/DICTRA 软件包的数据库初始化文件 TC_INITD 或 initd.tdb 中预先定义数据库列表中，参阅 2.2.2.2 阶。

可以总以“ $ ”开始在数据库初始化文件中写一些注释行，改行在 TDB 模块中忽略。若数据库管理员或用户要临时让公共用户从预先定义的数据库列表使任何数据库不能使用，这样做也是可适用的。若 TDB 模块不能适当处理的\DATA\区中有过多的数据库，也可使用$来临时注释一些不不常用的数据库。

从 TCC 版本 M 起，实行 NEW_DICTORY_FILE 命令以便 TCC 可使用几个为位于由 TCPATH 或 TC_DATA 参数定义的目录下不同子目录的各数据库定义访问路径的附加数据库初始化文件。若 TCC 在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下使用，这样的附加数据库初始化文件可位于局域计算机或联网服务器的任何驱动器的任何目录中。若文件名或起路径没有给处在 NEW_DICTORY_FILE 命令的同一行，或者若其不完整或不正确，NEW_DICTORY_FILE 命令弹出 Open file 窗口一点访问数据库初始化文件，以便可适当选择路径（在 **look in** 框）和数据库初始化文件名（在 **File name** 框）。然而，若 TCC 在 UNIX/Linux 工作站上运行，这些文件必须位于当前工作目录（TCC 开始的位置）。

在附加数据库初始化文件中，第一次数据库登陆可需要有相同路径定义结构，象在一般数据库初始化文件 TC_INITD 或 initd.tdb 中一样。所以明智的做法是，为一些公共数据库从原始 TC_INITD 或 initd.tdb 文件简单复制登陆行到这样的数据库初始化文件中。类似于 TC_INITD 或 initd.tdb 文件中预先定义的标准数据库，所有数据库正常位于 TCPAT 参数（在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 中）定义的或由 TC_DATA 参数（在 UNIX 或 LINUX 中）定义的目录下的子目录，或在其子目录\DATA\或/data/下。

下面给出了附加数据库初始化文件的例子（Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 中），命名如 MYINITD1:

```
$
$ DATABASE TCC (Additional TCC Database)
PURE4 TCPATH\DATA\PURE4\PURE4SETUP.TDB    SGTE Pure Database version 4 !
AD1    TCPATH\DATA\ADD1\AD1SETUP.TDB    TCSAB ADD1 Solution Database !
AD2       TCPATH\ADDDATA\ADD2\AD2SETUP.TDB    TCSAB ADD2 Solution Database !
$AD2o    TCPATH\ADDDATA\ADD2old\AD2SETUP.TDB    TCSAB ADD2 Database (old) !
AD3       TCPATH\ADD\NEWDATA\ADD3\AD3SETUP.TDB    TCSAB ADD3 Solution Database !
AD4       TCPATH\ADD\NEWDATA\ADD4\MYPROJ1\AD4SETUP.TDB
                              TCSAB ADD4 Solution Database !
$
$ DATABASE DIC       (Additional DICTRA Database
DCAD1 TCPATH\DICDATA\DCADD1\DCAD1SET.TDB    TCSAB DCADD1 Moblity Databse !
```

6.3 数据库定义文件语法

数据库定义文件由一系列每个后面跟着一个或几个参数（自变数）的关键词代码组成。一个完整关键词条目必须以感叹号“ !”结束，可达 2000 字符长度，但 TDB 文件中一行的最大长度为 78 个字符，所以在几行上继续关键词参数（自变数）可以是必要的，同时在最后一行的末尾必须书写感态好“ !”。推荐**在关键词参数（自变数）的每个继续行的开始部分至少总有一个条目空间**，否则，当读取关键词条目，TDB 模块可发布出错消息。关键词与其各种参数（自变数）由一个空格或一个逗号分开。在行的第一个位置的美元符号“ $ ”指示该行是一个注释行，而 TDB 模块忽略之。

当选定数据库时，TDB 只一次从开头到结尾完整读定义文件。当读取定义文件时 TDB 多次检查它。这意味着（近乎）每件事物在以任何方式使用时都必须声明或定义。例如，若要将石墨相包含在数据库定义中，在声明碳溶解在石墨中以前必须定义元素碳和相石墨。这个定义顺序对构建 TDB 模块（在一致性检查过程中）能够接受的内部数据结构是必要的。

本节给出可以得到的关键词与其合适的自变量的描述。假定读者有关于 Gibbs 能系统模块的基本知识。

使用如下语法：

KEYWORD [arg.1]*# [arg.2]*## {optional arg.3}

以全部长度书写的关键词在文本中，并可缩写为唯一的缩写长度。一个关键词可以有包含几个自变量和可选自变量的语法。符号[…]*#或[…]*##中的数字#或##表示具有最大长度 ASCII 符的自变量。在方括号[…]中的自变量必须一直是给定的，而在大括号{…}中的自变量是可选的。

6.3.1 ELEMENT

ELEMENT [element name]*2 [ref. State]*24 [mass] [H298 [S298] !

元素是在周期表中找到的一种，但不限于命名习惯。然而，TDB 模块仅认可大写元素名。小写将自动转换为大写。元素被自动输入为使用相同名的组元。例如若与 FE 相应的组元由某种原因需要命名为 FE1，可以给它为元素名 FE1，导致命名为 FE 的元素和命名为 FE1 的组元。空位（VA）和电子（气相、液相或固相中记作/-或水溶液相中记作 ZE），若使用，需要作为 TDB 的元素来输入以便正确处理。

参考态（reference state）为用作元素所有热力学数据参考的相。以每摩尔的克数（g/mol）给出的质量（mass）用在各种计算程序中并将总是给出正确的值。H298 和 S298 表示 SI 单位的元素在 0 与 298.15K 之间的焓和熵差，若不知道，其值可设定为零。

例：

ELEMENT AL FCC_A1 26.98154 4577.296 28.3215 !

6.3.2 SPECIES

SPECIES [species name]*24 [stoichiometric formula] !

此关键词定义了数据结构中的组元。每个组元名必须是唯一的。组元从化学计量比式中已经定义的

元素中构建。若涉及未定义元素，TDB 将发出出错消息并可能损害数据结构。组元名不必要由与化学计量比式相同的名称，但大多数情况推荐它。以简化化学符号书写化学计量比式，子群部允许同时数字系数 1 不能略掉。

例子：

SPECIES AL2O3 AL2O3 !

SPECIES Silica SI102 !

SPECIES NaSb(OH>)6 NAISB106H6 ！

SPECIES FE+2 FE/+2 !

SPECIES SB-3 SB/-3 !

6.3.3 PHASE

PHASE [phase name]*24 [date-type code]*8 [numb. Sub1.] [sites in sub1. 1] [sites in sub1. 2] etc …

{auxiliary text string}

此关键词定义项和除了允许输入什么组元以外的性质，相名必须是唯一的，否则 TDB 模块把它看成试图重新定义以前已定义的相，这个错误造成 TDB 发出出错消息并忽略改行其余部分。相名可包括一个冒号：和代表 GES 相码的字母（如 IONIC-LIQUID:Y 和 GAS:G），参阅下面第二个和最后一个例子。

有效的 GES 相码为（注意：其它无效的字符将与冒号：一起处理为相名的一部分）

A⇒含水的位组

G⇒气体位组

L⇒液体位组

Y⇒离子液体位组

日期型码（date-type code）由 1 到 8 个字符组成，其中每个字符表示一种系指或与该相连在一起的特殊数据文件。下面描述的关键词 TYPE_DEFINITION 将指定 TDB 用每个字符码采取什么动作。可选地，附加文本串（最大为 78 个字符）可在最后（亚点阵#中的位置之后）和感叹号“ ！”之前给出，参见下面的第二个例子。该字符串连同 TDB 模块一些列表中相名一起显示出来。

例子：

PHASE FCC_A1 %ZM 2 1 1 !

PHASE IONIC-LIQUID:Y %ZCDQ 2 1.0 1.0

> The ionic liquid mixture is modeled by the ionic two-sublattice model. !

PHASE M23C6

PHASE GAS:G G 1 1.1 !

6.3.4 CONSTITUENT

CONSTITUENT [phase name]*24 [constituent description]*2000 !

相名必须是已定义的相。组成描述是一列输入相的组元。列表以冒好“ ：”开始，包括第一个亚点阵的组元子列表的开始，同时用冒号将不同亚点阵分开。完整序列以最终的冒号结束。随意地，每个亚点阵可指定那个组元被称作主要组成，在组元名上直接添加“ % ”（百分号）来完成这样（指定）。在特定亚点阵上主要组成的位置分数的开始值的和将达 0.99，因此所谓的次要的组成（即没有%的组成）合计达 0.01。在组成描述中可编码最多 2000 个字符，在紧接着的一行来继续书写。若该相有长度超过 2000 个字符的描述，其余部分可在一个或几个 ADD_CONSTITUENT 关键词中编码。

例子

CONSTITUENT BCC_A2 :FE

CONSTITUENT IONIC-LIQUID:Y :FE+2 : SB-3: !

CONSTITUENT M23C6 :CR FE :FE CR W MO : C: !

CONSTITUENT AQUEOUS:A :H2O% AG+1 AGF AGCL AGCL2-1 AGI3-2 AGSO4-1 AGC2H4+1 AGN2H6+1 AGC2N2-1 AGC2H4NO2 AL+3 ALF3 ALO2-1, … : !

6.3.5 ADD_CONSTITUENT

ADD_CONSTITUENT [phase name]*24 [constituent description]*2000 !

此关键词将组成添加到已经有一些组成的一相中，其语法与 CONSTITUENT 关键词中相同。需要注意的是，不是在所有的亚点阵中都必须有组成。在下面的第二个例子中，第一个亚点阵没有附加（组成）。当一相中有如此多的组成以至于 2000 个字符不足以表达组成描述列表时才使用此关键词。若一相很大，如气体混合物或复杂水溶液。此关键词可多次使用。

例子：

ADD_CONSTITUENT GAS :S1 S2 S3 … :!

ADD_CONSTITUENT IM-PHASE : : CR:W … :!

ADD_CONSTITUENT AQUEOUS:A :CUCL+1 CUCL2 CUCL2-1 CUCL3-2 CUOH+1 CUO2H2 CUO3H3-1 CUO4H4-2 CU2OH+3 CU2O2H2+2 CU3O4H4+2 NIO2H2 NIO3H3-1 NIO4H4-2 NI2OH+3 NI4O4H4+4 ZNOH+1 ZNO2H2 ZNO3H3-1 ZNO4H4-2 … :!

6.3.6 COMPOUND_PHASE

COMPOUD_PHASE [phase name]*24 [data-type code]*8 [constituent] !

此关键词是同时定义组元、相和组成的一种简洁方法，用于具有恒定成分的化学计量比相。组元名和化学计量比式必须统一。相将由这个组元作为其仅有组成。执行此关键词来对大的物质数据库更简洁产生数据库定义文件，只是 SPECIES、PHASE 和 CONSTITUENT 关键词的组合。

举例：

COMPOUND_PHASE AL2O3 % AL2O3 !

COMPOUND_PHASE MAGNETITE %MF FE3O4 !

COMPOUND_PHASE QUARTZ % SIO2 !

6.3.7 ALLOTROPIC_PHASE

ALLOTROPIC_PHASE [phase name]*24 [data-type code]*8 [constituent] !

此关键词作用与 COMPOUD_PHASE 关键词相同，但不能作为一个组元将组成输入到数据结构中，若组元已定义则能使用此关键词

例子：

ALLOTROPIC_PHASE BETHA-AL2O3 A AL2O3 !

ALLOTROPIC_PHASE CRISTOBALITE A SIO2 !

ALLOTROPIC_PHASE TRIDYMITE A SIO2 !

6.3.8 TEMPERATURE_LIMITS

TEMPERATURE_LIMITS [lower limit] [upper limit] !

此关键词由 GES 设定 Gibbs 能参数和函数设定缺省的温度上下限，在一个数据库定义文件与其所有后续文件中只能使用一次。

例如

TEMPERATURE_LIMITS 500.0 1800.0 !

6.3.9 DEFINE_SYSTEM_DEFAULT

DEFINE_SYSTEM_DEFAULT [keyword] {G-ref. Type index} !

此关键词设定 TDB 命令 DEFINE_SYSTEM（参见 5.4.7 节）中的 ELEMENT 或 SPECIES 的缺省值。对于物质数据库，尽管大的溶体数据库受益于使 SPECIES 作为缺省值，但此关键词适于使 ELEMENT 作为缺省值。适当的缺省值对初学者有利，但是，高级用户或许将使用 TDB 命令 DEFINE_ELEMENT 和 DEFINE_SPECIES 来覆盖缺省值。

{G-ref. Type index}是当在 GES 模块中输入和列出数据时指示元素参考态的一个整数。下面列出了合法的数与其相应的含义（元素的参考态）：

1⇒符号：G

2⇒符号：H298

3⇒符号：H0

例如：

DEFINE_SYSTEM_DEFAULT element 2 !

6.3.10 DEFAULT_COMMAND

DEFAULT_COMMAND [secondary keyword and parameters] !

此关键词指定在数据库初始化时 TDB 模块执行的命令。可以使用的命令的语法目前不同于用户可用的 TDB 命令但其作用类似。DEFAULT_COMMAND 的语法中可利用的次级关键词与参数有

DEFINE_SYSTEM_ELEMENT [element names]

DEFINE_SYSTEM_SPECIES [species names]

DEFINE_SYSTEM_CONSTITUENT [phase] [sublattice] [species]

REJECT_SYSTEM_ELEMENT [element names]

REJECT_SYSTEM_SPECIES [species names]

REJECT_SYSTEM_CONSTITUENT [phase] [sublattice] [species]

REJECT_PHASE [phase names]

RESTORE_PHASE [phase names]

例如：

DEFAULT_COMMAND DEFINE_SYSTEM_ELEMENT FE VA !

DEFAULT_COMMAND REJECT_SYSTEM_CONSTITUENT LIQUID 2 C !

DEFAULT_COMMAND REJECT_PHASE LIQUID !

6.3.11 DATABASE_INFORMATION

DATABASE_INFORMATION [text]*8000 !

此关键词为当前数据库的详细描述定义一个文本，可用 TDB 命令 DATABASE_INFORMATION 列出该文本。在此文本中使用撇号“′”指示新的一行。要注意的是，在 TCCP 中连续的文本长度（每行最大 78 个字符）已从 2000 个扩大到 8000 个字符。

例如：

DATABASE_INFORMATION This is the XXX-Alloy Solution Database′

in the A-B-C-D-…… System.′

Developed by TCSAB, released in May 2001.″

… more … !

6.3.12 TYPE_DEFINITION

TYPE_DEFINITION [data-type code]*1 [secondary keyword with parameters] !

当执行 TDB 命令 GET_DATA 时此关键词将相连接到 TDB 模块进行的一个动作上。TYPE_DEFINITION 语法中可利用的次级关键词和关联的参数为：

SEQ [filename]

RND# [filename]

GES [valid GES command with parameters]

POLY3 [valid POLY3 command with parameters]

TDB [valid GTDB command with parameters]

IF [conditional statement] [keyword with parameters]

次级关键词 SEQ 指定一个后续文件存储属于使用关联数据类型码（由 TYPE_DEFINITION 关键词定义）的相的参数。文件名以星号“＊”表示的特殊情况预示着数据库定义文件也作为后续数据存储文件。这种情况使特别适于个人数据库的小的数据库具有一个单个文件成为可能。

次级关键词 RND 应与一个正整数#相连接来指出**随机文件**的类型，目前，有三种类型的随机文件。

类型 0（缺省类型）用于完全 Gibbs 能表达式（G0 参数），其中搜索域为未经缩写的参数名；类型 1 指明为函数，其中函数名用作搜索域；类型 2 保存二元交互作用参数，其中搜索域也是未经缩写的参数名而没有任何交互作用次序符号。要注意的是，在后续文件中必须指定三元和高阶交互作用参数。此外，这些随机文件的内部结构受不同 TDB 版本和各种计算机系统上执行 TDB 的变化所支配。进一步信息，可请教可从 Thermo-Calc Software AB 得到的 FORTRAN 程序的 TDBSORT。

次级关键词 GES、POLY3 或 TDB 指定与数据类型码相关的相的修改，如应用于某一相的磁贡献、其它过剩模型或任何其它有效的 GES/POLY3/TDB 命令。通过作为对交互作用的 GES/POLY3/TDB 模块的访问来执行此关键词，达到大的适应性。若在 TDB 模块中实行新的类型的加法，没有重新编程 TDB 模块却在数据库定义文件中立即使用它。注意，在下面最后第三个例子中，“ @ ”（at）的使用指示类型定义 B 用于任何相。

次级关键词 **IF** 允许详述相组成的条件陈述结构，控制下列类型定义（带由参数的关键词）串的执行，参阅下面例子的最后两个。

数据类型（data-type）码（总是作为一个串）可以是一般的或特殊的字符，如 0、5、A、F、M、%、&、(等，并在各种相的定义关键词（PHASE、COMPOUND_PHASE 和 ALLOTROPIC_PHASE）中参考它。

例子：

TYPE_DEFINITION % SEQ TCPATH\DATA\[DATABASE]\PARAMETERS.TDB !
TYPE_DEFINITION I SEQ TCPATH\DATA\[DATABASE]\INTERACTION-PARAMS.TDB !
TYPE_DEFINITION G RND0 TCPATH\DATA\[DATABASE]\GZERO-PARAMS.TDB !
TYPE_DEFINITION F RND1 TCPATH\DATA\[DATABASE]\FUNCTIONS.TDB !
TYPE_DEFINITION & RND2 TCPATH\DATA\[DATABASE]\BINARY-INTERACTION.TDB !
TYPE_DEFINITION A GES AMEND_PHASE_DES AQUEOUS EXCESS_MODEL PITZER !
TYPE_DEFINITION B GES AMEND_PHASE_DESCRIPTION @ MAGNETIC –1 0.40 !
TYPE_DEFINITION 8 IF ((NB OR TI OR V) AND (C OR N) THEN
    GES AMEND_PHASE_DESCRIPTION @ COMP_SET ,, CR NB TI V: C N: !
TYPE_DEFINITION D IF(ALO3/2 OR CRO3/2 OR FEO OR MNO OR SIO) THEN
    GES AMEND_PHASE_DES LIQUID COMP_SET ,, ALN%,ALO3/2%,CRO3/2%,
    FEO%,FEO3/2%,MNO3.2%,MNS%,SIO2%,TIO2% : !

6.3.13 FTP_FILE

FTP_FILE [filename] !

FTP 文件是一个特殊函数随机文件，该函数名与存储记录名与其函数的记录数相对应。FTP 文件急剧减少 TDB 模块中关联数据库的搜索时间。该文件用于带有存储 G0 参数的 SEQ 后续文件或 RND0 随机文件的大的物质数据库，G0 参数访问存储在 FTP 文件的名为 F××××T 的函数。整数××××是当处理这种文件时 TDB 使用的搜索代码。这个文件类型不允许修改。

例子：

FTP_FILE TCPATH\DATA\[DATABASE]\FTP-FILE.TDB !

6.3.14 FUNCTION

FUNCTION [function name]*8 [low temp. limit] [expression 1]; [upper temp. limit 1] Y
    [expression 2] [upper temp. limit 2] Y
    [expression 3]; [upper temp. limit 3] Y
        ……; …… Y
    [expression n-1]; [upper temp. limit n-1] Y
    [expression n]; [upper temp. limit n] N {Ref. Index} !

GES 具有使用以 Gibbs 能参数表达式或其它函数的方式预先定义的函数的能力。当几个参数（或函

数）由一个公共的次表达式时通常使用此关键词，如元素的亚稳修正。FUNCTION 关键词可出现在数据库定义文件和后续存储文件中，但不出现在 FTP 文件中。

函数总是以其适用的低温限开始，接着是编码为常数、其它输入的函数和 FTP 函数的数学关系的一个或多个表达式，每个表达式以分号“ ;”结束，接着是适用的温度上限和继续指示器（继续下一个表达式用 Y，结束函数表达式用 N）。在一个特殊的表达式之后若没有继续指示其，可由选择地给出参考索引。

若函数表达式过长或若有多于一个可适用的表达式，一个完全的函数条目可以用几个连续行书写，可由选择地给出参考索引。

应避免如下的输入函数：

FUNCTION GHSERXY 298.15

-1000+1058*T-38.9*T*LOG(T)+GFUNXY#;6000 N !

这样的函数 TDB 将读成 1000+1058*T-38.9*T*LOG(T)+GFUNXY#，而不是-1000+1058*T-38.9*T*LOG(T)+GFUNXY#。

其原因是，TDB 模块将连接所有行并在试图在 GES5 工作区输入函数之前删除而外的空格，因此，函数应变成

FUNCTION GHSERXY 298.15 -1000+1058*T-38.9*T*LOG(T)+GFUNXY#;6000 N !

同时-号将取作 298.15 与 1000 之间的定界符。

这个错误可通过如下方法来避免，即给出至少一个空格作为在新行的第一个字符，如

FUNCTION GHSERXY 298.15

-1000+1058*T-38.9*T*LOG(T)+GFUNXY#;6000 N !

因此，推荐**在每个继续行的开头总是有至少一个空格**，否则，当读取函数条目时 TDB 模块可能发出一些出错消息。

通常要注意的示，一个函数在被提及之前必须定义，然而，函数名直接后缀数字符号“ # ”时可忽略这条规则。然而在 TCC 的版本 N 中这个规则被简化，函数不再需要后缀#。参数（或其它函数）中适用的但从来没有定义的函数将列在 TDB 命令 GET_DATA 的末尾。未经请求的数据库的用户当得到这个烈表示要小心，并于数据库供应者联系。

可选的参考索引{Ref. Index}是一个指示特定参考文件中在哪里可找到特殊的函数的一个整数。当在 TDB 模块中执行 GET_DATA 命令时列出参考，也可在 GES 模块中用命令 LIST_DATA 命令以选项 R 列出。为了对参考索引计数，参见关键词 REFERENCE_FILE。

参考索引域也可是一个简单表示原始参考的缩写（如 REF:250、REF_002 或 REF-SGTE），在这种情况下，当发布 TDB 命令 GET_DATA 或 GES 命令 LIST_DATA（带有选项 R）时不能得到参考。

然而，自 TCC 版本 N 起，参考在数据库定义文件（***setup.TDB）中直接编码，其以一个发布 TDB 命令 GET_DATA 或 GES 命令 LIST_DATA（带有选项 R）时可显示的字母开头。通常，这样的参考必须位于 LIST_OF_REFERENCE 关键词之后。推荐使用参考编码名如 REF001、REF018 等。用带有 N 选项的 GES 命令 LIST_DATA <file>生成的参考列表也可能被 TDB 模块直接读取。

例子：

```
FUNCTION GFREF    298.15 1000+GFUNXY#; 6000 N !
FUNCTION GFUNXY 298.15 1000+200*T+30*T*LOG(T); 6000 N 505 !
FUNCTION G0_CAO 298.15 –663538.11+352.67749*T-57.7533*T*LN(T)
        +5.3895E-03*T**2-88.879385E-07*T**3+575530*T**(-1);
    1400.00 Y –625196.99+78.896993*T-20.40145*T*LN(T)
        -1.112923E-02*T**2+5.1896733E-07*T**3-6917350*T**(-1);
    2900.00 Y –49226.55-490.37695*T+51.95912*T*LN(T)
        -2.961051E-02*T**2+1.4033905E-06*T**3-48114685*T**(-1);
    3172.00 Y –587711.89+375.04117-62.76*T*LN(T);
```

6.00000E+03 N REF020 !

6.3.15 PARAMETER

PARAMETER [GES parameter name] [low temp. limit]

[expression 1]; [upper temp. limit 1] Y

[expression 2]; [upper temp. limit 2] Y

[expression 3]; [upper temp. limit 3] Y

……; …… Y

[expression n-1]; [upper temp. limit n-1] Y

[expression n]; [upper temp. limit n] N {Ref. Index} !

在关键词 PARAMETER 之后，应给出一个有效的 GES 参数名。PARAMETER 关键词可出现在数据库定义文件和其后续存储文件中，但不出现在 FTP 文件中。

一个参数总是从实用性温度下限开始，接着是编码为常数、其它输入的函数和 FTP 函数的数学关系的一个或多个表达式，每个表达式以分号“ ;”结束，再接着是适用的温度上限和继续指示器（继续下一个表达式用 Y，结束函数表达式用 N）。在一个特殊的表达式之后若没有继续指示其，可由选择地给出参考索引。

若函数表达式过长或若有多于一个可适用的表达式，一个完全的函数条目可以用几个连续行书写，可由选择地给出参考索引。

应避免如下的输入函数：

PARAMETER G(LIQUID,A,B) 298.15

-2000+4568*T+2*GFUNAB#; 6000 N !

这样的参数 TDB 模块将读作 2000+4568*T+2*GFUNAN#，而不是-2000+4568*T+2*GFUNAB#。

原因是 TDB 模块将连接所有行并试图在 GES5 工作取输入参数之前去除而外的空格，因此参数将变成

PARAMETER G(LIQUID,A,B) 298.15 –2000+4568*T+2*GFUNAB#; 6000 !

同时-号将取作 298.15 与 2000 之间的定界符。

这个错误可通过如下方法来避免，即给出至少一个空格作为在新行的第一个字符，如

PARAMETER G(LIQUID,A,B) 298.15

-2000+4568*T+2*GFUNAB#; 6000 N !

因此，推荐**在每个继续行的开头总是有至少一个空格**，否则，当读取函数条目时 TDB 模块可能发出一些出错消息。

可选的参考索引{Ref. Index}是一个指示特定参考文件中在哪里可找到特殊的函数的一个整数。当在 TDB 模块中执行 GET_DATA 命令时列出参考，也可在 GES 模块中用命令 LIST_DATA 命令以选项 R 列出。为了对参考索引计数，参见关键词 REFERENCE_FILE。

参考索引域也可是一个简单表示原始参考的缩写（如 REF:250、REF_002 或 REF-SGTE），在这种情况下，当发布 TDB 命令 GET_DATA 或 GES 命令 LIST_DATA（带有选项 R）时不能得到参考。

然而，自 TCC 版本 N 起，参考在数据库定义文件（***setup.TDB）中直接编码，其以一个发布 TDB 命令 GET_DATA 或 GES 命令 LIST_DATA（带有选项 R）时可显示的字母开头。通常，这样的参考必须位于 LIST_OF_REFERENCE 关键词之后。推荐使用参考编码名如 REF001、REF018 等。用带有 N 选项的 GES 命令 LIST_DATA <file>生成的参考列表也可能被 TDB 模块直接读取。

例子：

PARAMETER G(BCC,FE:VA) 298.15 1000+200*T+…; 6000 N !

PARAMETER G(BCC,FE,CO:VA;2) 298.15 1000+200*T+…; 6000 N !

PARAMETER TC(BCC,FE:VA) 298.15 1043; 6000 N !

PARAMETER G(SIGMA,FE:CR:CR) 298.15 1000+200*T+…; 6000 N 101 !

PARAMETER G(LIQUID,AL;0) 298.15 +11005.553-11.840873*T
+7.9401E-20*T**7+GHSERAL#;
933.60 Y +10471.974-11.252014*T+1.234264E+28*T**(-9)+GHSERAL#;
2900.00 N REF:283 !
PARAMETER G(BCC_A2,PB:C;0) 298.15 UN_ASS#; 300 N REF:0 !
PARAMETER G(BCC_A2,NI:C;0) 2.98150E+02 +400000-100*T+GHSERAL#
+3*GHSERAL; 6000 N REF071 !
PARAMETER G(BCC_A2,MN:VA;0) 2.98150E+02 +GMNBCC#; 6000 N REF285 !

6.3.16 OPTIONS

OPTIONS /[alloy name]([composition limitation for all alloying elements]) !

OPTIONS 关键词定义数据中的一种“合金”，从 TCC 战阵 M 可以使用此关键词，合金有名、主要组成和大量合金元素。定义合金的目的是能够将应当前数据库用于特殊类型合金时的可用成分限度告知用户。在同一数据库中可能有几种合金，在 OPTION 关键此之后给出数据库的合金。

合金名必须用斜线“ / ”来处理，并以打开的圆括号结束，同时两者之间不允许有空格。合金名最长为 8 个字符。圆括号之后接着主元素与在括号内给出的主元素最小质量和摩尔百分数。接着时合金元素名。每个合金元俗名后用括号给出其最大的质量和摩尔百分数。每个合金元素的定义之间必须有空各。合金定义以圆括号结束，整个 OPTION 关键词以感态号“ ！”结束。

例子：

OPTION /Ssteel(Fe(60,60) CR(30,30) NI(15,15) SI(1,1,) N(.1,1)) !

6.3.17 TABLE

TABLE [name]*8 [start temp] [end temp] [delta temp] [table values] !

TABLE 关键词可出现在数据库定义文件和后续的存储文件中，但不能出现在 FTP 文件中。它作出 Gibbs 能与温度关系的表，其中取值范围从开始温度到结束温度，步长为δT(delta temperature)。

也推荐**总是至少有一个空格位于每个继续行的开头**，否则，在读取表条目时 TDB 模块将发布出错消息。

例子：

TABLE DEMTAB 1000.0 1500.0 100.0 –2912.9008 –2834.2416 –2755.5824
-2677.7600 –2600.7744 –2524.2072 !

6.3.18 ASSESSED_SYSTEMS

ASSESSED_SYSTEMS [desctiptions on special treatment for specific assessed systems]*2000 !

关键词 ASSESSED_SYSTEMS 可包含在数据库定义文件（***setup.tdb 文件）中。允许在关键词（当 TDB、GES 和 POLY 模块用评定过的数据处理以存在的体系）描述一些特殊选项之后有最大 2000 个字符后跟感叹号“ ！”。文件中 ASSESSED_SYSTEM 关键词条目数是不受限制的。

数据库中评定过体系与其特殊处理选项在关键此之后键入。在每个评定过体系中的元素（应是**大写**）必须是按字母顺序判列，并由连字号分开，如 Fe-C 系的 C-FE。每个评定过体系之间必须有一个空格。评定过的二元、三元或高阶系的信息以这种方式给出，要注意的是，三元系 C-CR-FE 并不以预示着二元 C-CR、C-FE 和 CR-FE 被评定过！没有办法指示部分评定过的体系。

有一个给出一些特殊相的描述信息的域，各种选项有

- 如何从 TDB 模块的当前数据库中拒绝和恢复相；
- 如何在第一成分组中为 GES 模块的当前数据库中特定相设定主组成和设定第二成分组。
- 如何计算 POLY3 模块中该特定体系。

这是 Thermo-Calc 软件/数据库包中 BIN（二元相图）和 TERN（三元相图）模块使用的工具。

描述信息后紧接着特定体系名，并必须放在括号“ (”和“) ”内，同时右扩号必须直接跟在体系后，如：

AL-NI(TDB +L12 ;G5 C-S:L12/NI:AL:VA ;P3 STP:.8/1200/1 STP:.2/600/1)

对 Thermo-Calc 来说信息是特定的，规定是隐藏的。如上例，

- Ø语法 TDB 意思是 TDB 模块处理命令，例子中的+L12 意思是称为 L12 的相要恢复（以被缺省地拒绝）。
- Ø 指令 ;G5 意味着接着的是对 GES 模块的命令，C-S: 意味着创建一个第二成分组，冒号之后跟着相名，斜线之后是主组成。
- Ø 指令 ;P3 之后跟着 POLY 模块命令。STP: 意思是设定先以 X 轴的值为开始点（二元系中第二元素的成分），斜线分开 Y-轴值（温度），和可能一个和多个方向（-1，1，-2 或 2）。

允许的语法摘要为

- TDB 接受

  +PHASE 和 –PHASE 来恢复/拒绝（应不用语法-*拒绝所有的相）
- ;G5 接受

  MAJ:phase/constituent-array 第一成分组的主成分

  C_S:phase/constituent-array 第二成分组
- ;P3 接受

  * 缺省开始点设定为

    二元系：成分 X(第二元素)=.1234，温度 T=1100K，缺省方向；或

    三元系：成分 X(第二元素)=.1234 和 X(第三元素)=.1234，缺省方向

    STP:x/t/d1/d2/d3 设定为成分 X(第二元素)=x 和温度 T=t(K)，方向 d1、d2 和/或 d3 的二元系的特定开始点。

    STP:x1/x2/d1/d2/d3 设定为成分 X(第二元素)=x1 和 X(第三元素)=x2，方向 d1、d2 和/或 d3 的三元系的特定开始点。

    方向可定义为-1、1、-2 或 2。若没有指定方向，将使用所有缺省方向（意味着在 POLY 模块中没有执行 ADD 命令）。

    若仅指定一个开始点，可省略方向；若指定多于一个开始点，所有开始点中必须给出每个开始点至少一个方向。

给出的一些其它例子可阐明若下：

ASSESSED_SYSTEMS

```
AL-NI(TDB +L12 +BCC_B2 ;G5 C_S:L12/NI:AL:VA ;P3 STP:.8/1000/1
   STP:.45/700/1 STP:.7/700/1)
AL-PB(TDB –HCP –BCC ;G5 MAJ:LIQ/AL MAJ:FCC/AL:VA C-S:LIQ/PB
   C-S:FCC/PB:VA ;P3 *)
CR-FE(;G5 C-S:BCC/VR:VA ;P3 STP:.6/1200/1/-2/2)
AG-CU(;G5 MAJ:FCC/AG:VA C_S:FCC/CU:VA ;P3 STP:.3/1000)
C-NB(;P3 STP:.9/1100/1)    C-SI(;P3 *)
CO-CR(;G5 MAJ:FCC/CO:VA C_S:FCC/CR:VA ;P3 STP:.1/1100)
CR-FE(TDB –HCP ;G5 C_S:BCC/CR:VA ;P3 STP:.6/1200/1-2/2) CR-NI(;P3 *)
CU-FE(TDB –HCP ;G5 MAJ:LIQ/CU MAJ:FCC/FE:VA C_S:FCC/CU:VA
   ;P3 STP:.9/1400)
FE-N(TDB +FE4N ;P3 *)
FE-O(TDB –LIQUID +IONIC ;G5 C_S:ION-LIQ/FE+2:O-2 MAJ:ION_LIQ/FE+2:VA
   ;P3 STP:.2/2000/1)
FE-S(TDB –LIQUID +IONIC ;G5 C_S:ION_LIQ/FE+2:O-2 MAJ:ION_LIQ/FE+2:S-2 ;P3 *)
AL-MG-SI(;P3 *)      C-CR-FE(;P3 *) !
```

主以，分号“ ; ”是 ;G5 和 ;P3 指令的一部分。长的描述信息可在多于一行书写，若上所示的 AL-NI、AL-PB、CU-FE 和 FE-O 系。

若使用缺省开始点则需要指令“ ;P3 * ”，若没有;P3 指令，BIN 或 TERN 模块将生成一些 20 个不同的开始点，以便覆盖所有可能的成分和温度（对二元系）或所有的成分（对指定温度下的三元系）。

6.3.19 REFERENCE_FILE

REFERENCE_FILE [file name]

关键词 REFERENCE_FILE 将参考文件名作为其讨论。这个文件包含数据库中各种参数（和有时为函数）参考的完整列表。该文件必须有一个固定的记录结构：每个参考条目有已格或几个记录，每条记录 80 个字符长些在单独一行。若为参考条目输入的多余一个记录，所有所有的继续行必须以一个“ & ”符号开始。指定参考条目的第一条记录的行号以独特整数来计算指定参考，当参数或函数作为可选的{ref. Index}访问这个整数时将查阅指定参考。有关指定参考索引参阅关键词 PARAMETER 或 FUNCTION。

例子：

```
/-1<G>                    T.C.R.A.S. Class 1
AG1.64TE1                 THERMODATA 01/93
&28/01/93
&SILVER 1.64-TELLURIDE. Solid Standard State.
AG1                       HULTGREN SELECTED VAL.        SGTE **
&AT.WEIGHT 107.870,STANDARD STATE:CODATA KEY VALUE.MPT=1234.93K.
&--U.D. 31/10/85 .
AG1<G>                    T.C.R.A.S Class: 1
AG1/+1<G>                 T.C.R.A.S Class: 1
&Tfusion uncertain and heat vaporization estimated.
AG1BR1<G>                 THERMODATA 01/93
&28/01/93
&Gaseous Standard State.
AG1BR1O3                  BARIN & KNACHE.SUPPL.REF:62,* SGTE **
&AGO3BR                   SILVER OXYTRIBROMIDE
```

在以上例子中，相关参考（为评价元素、组元、相、交互作用等）的独特整数有：

1 /-1<G>
2 AG1.64TE1
5 AG1
8 AG1<G>
9 AG1/+1<G>
10 AG1BR1
12 AG1BR1<G>
15 AG1BR1O3

6.3.20 LIST_OF_REFERENCE

LIST_OF_REFERENCE
NUMBER SOURCE
[REFxxx] ‘[Detailed reference]’
……
……!

关键词 LIST_OF_REFERENCE 开始直接在数据库定义文件（***setup.TDB）中编码的参考列表，这是从 TCC 版本 N 起的一个新特性。其讨论在接着的一行开始，通常跟在各种参考编码后面有一个解释行，

每个参考编码可占据一个或多个行，但必须有参考编码名（以字母开始）和详细的参考信息（在单引号内“‘……’’”书写）。推荐使用如 REF001、REF018 等的参考码名。关键此后到感态号“ !”之前允许最多 40000 个字符（在 TCCP，在 TCCN 中为 2000 个）。

当发布 TDB 的 GET_DATA 命令或 GES 的 LIST_DATA 命令时刻显示这样的参考列表。用带有 N 选项的 GES 命令 LIST_DATA<file>产生的参考列表有这种结构，因此 TDB 模块可能直接读取。

例子：

```
LIST_OF_REFERENCE
  NUMBER SOURCE
    REF283   'Alan Dinsdale, SGTE Data for Pure Elements,
             Calphad Vol 15(1991) p 317-4425,
             Also in NPL Report DMA(A)195 Rev. August 1990'
    REF224   'P-Y Chevalier, Thermochimica Acta, 130(1988) p 33-41; AG-SI'
    !
```

6.3.21 CASE 与 ENDCASE

```
CASE [ELEMENT/SPECIES/PHASE] !
IF (boolean algebra on element, species or phase names) THEN
      [GES/POLY/TDB command] !
ENDCASE !
```

作为其讨论，关键词 CASE 取如下哪种布尔代数学操作定义。使用具有最多为四级扩号的 AND 和 OR 的简单的布尔代数学将起作用。使用 CASE 语句时必须用 ENDCASE 结束。

举例

```
CASE [ELEMENT] !
IF((CR OR TI OR V) AND N) THEN
    GES AMEND_PHASE+DESCRIPTION % C_S ,, CR MO TI V:C N: !
ENDCASE !
```

6.3.22 VERSION_DATA

```
VERSION_DATA [string]*80 !
```

当执行 TDB 命令 DATABASE_INFORMATION 时显示该串（表示数据库的版本数据）

6.4 DICTRA 扩展到数据库定义文件语法

扩散相变的模拟软件包若 DICTRA 需要热力学数据和动力学数据（即扩散率或迁移率），自然地，动力学数据的处理和存储也将从某种数据库管理中获益。因此，TDB 数据库定义文件语法已经扩展来合并存储动力学数据需要的一些新的关键词。

6.4.1 PARAMETER

```
PARAMETER [special GES parameter name] [low temp. limit]
    [expression 1]; [upper temp. limit 1] Y
    [expression 2]; [upper temp. limit 2] Y
    [expression 3]; [upper temp. limit 3] Y
        ……; …… Y
    [expression n-1]; [upper temp. limit n-1] Y
    [expression n]; [upper temp. limit n] N {Ref. Index} !
```

关键词 PARAMETER 允许为热力学数据输入各种标准 GES 参数（如前面 6.3.15 节介绍的那样），以及输入 5 个适合于 DICTRA 软件使用的动力学数据的特殊扩展名。特殊 GES 参数名有效的扩展名有：

MQ⇒迁移率方程的激活焓。

MF⇒迁移率方程的指数前因子。

DQ⇒扩散率方程的激活焓。

DF⇒扩散率方程的指数前因子。

VS⇒计算每摩尔体积传输组元的体积。

例子：

PARAMETER MQ(BCC,FE:VA) 298.15 1000+200*T+…; 6000 N !

PARAMETER MF(BCC,CO:VA) 298.15 1000+200*T+…; 6000 N !

PARAMETER DQ(FCC,FE:VA) 298.15 1043+…; 6000 N !

PARAMETER DF(FCC,CR:C) 298.15 1000+200*T+…; 6000 N 10 !

PARAMETER VS(FCC) 298.15 1000+200*T+…; 6000 N 11 !

6.4.2 DIFFUSION

DIFFUSION [model keyword] [phase name] [additional parameter(s)] !

若不希望缺省的模型，关键词 DIFFUSION 指定一个相使用哪种扩散模型。缺省的模型计算全部扩散矩阵。从不同的迁移率和热力学因子计算扩散率，计算前一个为

M=exp(∑MF/RT)exp(∑MQ/RT)/RT

其中∑表示不同 MF 和 MQ 还可能加上 Redlich-Kister 项的加权求和。有效的模型关键此有：

NONE

此相无扩散

DILUTE

每个亚点阵中依赖组元的组成列表必须作为附加参数给处。扩散矩阵中只计算对角项，

D=exp(∑DF/RT)exp(∑DQ/RT)

SIMPLE

每个亚点阵中组元相关的构成作为附加参数给出。扩散矩阵中只计算对角项，D=∑DF+∑DQ

MAGNETIC

所谓的 ALPHA（α）和 ALPHA2（α_2）参数必须作为附加参数给出。ALPHA 为置换磁性模型，ALPHA2 为间隙磁性模型。通过在 α 关键词后添加一个“ & ”(与符号)和组元名，可为不同组元补充单个值。计算全部扩散矩阵。

例子：

DIFFUSION NONE SIGMA !

DIFFUSION DILUTE CEMENTITE : FE : C : !

DIFFUSION MAGNETIC BCC_A2 ALPHA=0.3 ALPHA2&C=1.8 ALPHA2&N=0.6 !

6.4.3 ZERO_VOLUME_SPECIES

ZERO_VOLUME_SPECIES [list of species] !

在 DICTRA 软件，只适用替代元素传送体积的假定，间隙元素假定具有零摩尔体积。关键词 ZERO_VOLUME_SPECIES 使用一列认为是零体积的组元来讨论

例子：

ZERO_VOLUME_SPECIES VA C N !

6.5 数据库定义文件实例

6.5.1 例 1：一个小的钢数据库

```
TEMP-LIM 500.0 2000.0 !
$
$ELEMENT, NAME, REF.STATE, ATOMIC-MASS, H0, S0
  ELEMENT VA VACUUM                    0.0      0.0 0.0 !
  ELEMENT C  GRAPHITE                 12.011    0.0 0.0 !
  ELEMENT V  BCC                      50.9415 0.0 0.0 !
```

```
  ELEMENT CR BCC-PARAMAGNETIC 51.996    0.0 0.0 !
  ELEMENT FE BCC-PARAMAGNETIC 55.847    0.0 0.0 !
  ELEMENT NI BCC-PARAMAGNETIC 58.69     0.0 0.0 !
  ELEMENT MO BCC                        95.94     0.0 0.0 !
  ELEMENT W    BCC                      183.85     0.0 0.0 !
$
$PHASE, NAME, TYPE, NR-OF-SUBL, SITES-IN-SUNL. !
  PHASE BCC            B1M 2 1.0 3.0 !
  PHASE FCC            F2M 2 1.0 1.0 !
  PHASE HCP            0     2 2.0 1.0 !
  PHASE LIQUID         3     2 1.0 1.0 !
  PHASE CEMENTITE 4     2 3.0 1.0 !
  PHASE M23C6          4     2 23.0 6.0 !
  PHASE M7C3           4     2 7.0 3.0 !
  PHASE M6C            4     4 2.0 2.0 2.0 1.0 !
  PHASE SIGMA          0     3 10.0 4.0 16.0 !
  PHASE MU-PHASE       0     3 7.0 2.0 4.0 !
  PHASE R-PHASE        0     3 27.0 14.0 12.0 !
  PHASE GRAPHITE    4      1 1.0
$
$CONSTITUENT, PHASE-NAME : CONSTITUENTS !
  CONSTITUENT BCC :V CR FE NI MO W:VA C: !
  CONSTITUENT FCC :V CR FE NI MO W:VA C: !
  CONSTITUENT HCP :CR FE NI:VA C N: !
  CONSTITUENT LIQUID :C V CR FE NI MO W VA:VA C: !
  CONSTITUENT CEMENTITE :CR FE:C: !
  CONSTITUENT M23C6 :CR FE:C: !
  CONSTITUENT M7C3 :CR FE:C: !
  CONSTITUENT M6C :FE:W:FE W:C: !
  CONSTITUENT SIGMA :FE:V CR MO:FE V CR MO: !
  CONSTITUENT MU-PHASE :FE:MO W:FE MO W: !
  CONSTITUENT R-PHASE :FE:MO:FE MO: !
  CONSTITUENT GRAPHITE :C: !
$
$TYPE DEFINITIONS:
  TYPE-DEFINITION 0 SEQ TCPATH\DATA\METDATA\TC-THEREST.TDB !
  TYPE-DEFINITION 1 SEQ TCPATH\DATA\METDATA\TC-BCC.TDB !
  TYPE-DEFINITION 2 SEQ TCPATH\DATA\METDATA\TC-FCC.TDB !
  TYPE-DEFINITION 3 SEQ TCPATH\DATA\METDATA\TC-LIQUID.TDB !
  TYPE-DEFINITION 4 SEQ TCPATH\DATA\METDATA\TC-CARBIDES.TDB !
  TYPE-DEFINITION M SEQ TCPATH\DATA\METDATA\TC-CUBIE-BOHR.TDB !
  TYPE-DEFINITION B GES AM-PH BCC MAGNETIC –1 .4 !
  TYPE-DEFINITION F GES AM-PH BCC MAGNETIC –3 .28 !
$
```

```
$DEFAULT_COMMANDS:
  DEFAULT-COMMAND DEF_ELEMENT VA !
  DEFAULT-COMMAND DEF_SYS-CONST LIQUID 1 VA !
$
$DATABASE_INFORMATION:
  DATABASE-INFO The following binary and ternary systems are available: '
     FE-CR-NI    by hertaman'
     FE-MO            Fernandez
     FE-CR-C         Andersson
     FE-W-C           Gustafson
     FE-W              Andersson & Gustafson
```

6.5.2 例 2：Sb-Sn 系个人数据库

```
$
$
$ELEMENT, NAME, REF.STATE, ATOMIC-MASS, H0, S0 !
  ELEM VA VACUUM                          0.0    0.0 0.0 !
  ELEM MG HCP(A3)                       24.305 0.0 0.0 !
  ELEM SB RHOMBOHEDRAL(A7) 121.75    0.0 0.0 !
  ELEM SN BCT(A5)                      118.69    0.0 0.0 !
  ELEM /- ELECTRON-GAS                 0        0    0 !
$
$SPECIES, NAME, STOICHIOMETRIC-FORMULA !
  SPECIES MG1 MG1 !
  SPECIES MG2 MG2 !
  SPECIES MG2+ MG/+2 !
  SPECIES SB1 SB1 !
  SPECIES SB2 SB2 !
  SPECIES SB4 SB4 !
  SPECIES SB3- SB/-3 !
  SPECIES SB5- SB/-5 !
  SPECIES SN1 SN1 !
  SPECIES SN4- SN/-4 !
$
$PHASE, NAME, TYPE, NR-OF-SUBL, SITES-IN-EACH-SUBL. !
  PHASE BCT                Z 1 1.0 !
  PHASE HCP                Z 1 1.0 !
  PHASE RHOMBO        Z 1 1.0 !
  PHASE GAS:G             Z 1 1.0 !
  PHASE LIQUID:L        Z 1 1.0 !
  PHASE IONICLIQ:Y    Z 2 1 1 !
  PHASE SPLIQ:Y         Z 2 1 1 !
  PHASE BMG3SB2:I    Z 2 3 2 !
  PHASE AMG3SB2:I    Z 2 3 2 !
  PHASE MG2SB:I         Z 2 2 1 !
```

```
  PHASE SBSN            Z 2 1 1 !
  PHASE SB2SN2          Z 2 2 3 !
$
$CONSTITUENT, PHASE-NAME : NCONSTITUENT !
  CONSTITUENT RHOMBO :SB SN: !
  CONSTITUENT HCP :MG SN: !
  CONSTITUENT GAS:G :MG1 MG2 SB1 SB2 SB4 SN1:
     > Gas phase, using the Ideal EOS and Mixing Midel. !
  CONSTITUENT LIQUID:L :SB SN: !
  CONSTITUENT IONICLIQ:Y :MG2+:SB SB3- SN SN4- VA:
     > This is the Ionic Liquid Solution Phase. !
  CONSTITUENT SPLIQ:Y :MG2+:SB SB3- SN SN4- VA: !
  CONSTITUENT BMG3SB2:I MG2+:SB3- SB5- VA SN4-: !
  CONSTITUENT AMG3SB2:I MG2+ VA:SB3- VA SN4-: !
  CONSTITUENT MG3SN:I MG2+ VA:SB3- SN4-: !
  CONSTITUENT SBSN :SB SN:SB SN: !
  CONSTITUENT SB2SN3 :SB:SN: !
$
$DEFAULT_COMMANDS:
  DEFAULT-COM DEF-ELEM VA /- !
  DEFAULT-COM REJ-PHASE LIQUID !
  DEFAULT-COM REJ-PHASE SPLIQ !
$
$TYPE_DEFINITIONS:
  TYPE-DEFINITION Z SEQ * !
$
$DATABASE_INFORMATION
  DATABASE_INFO This Sb-Sn sysytem with isentropic temperatures !:
$
$VERSION_DATE
  VERSION_DATE Last updates 1986-05-18 11:39:49
$
$
$ HERE COMES THE THERMODYNAMIC DATA (expressed in function & parameters):
$
  FUNCTION MGLIQUID 298.15 –4630.90976+192.994374*T-34.0888057*T*LOG(T)
        -36544605.6*T**(-2); 6000 N !
$
  FUNCTION MGLIQUID 298.15 –8367.34+143.677876*T-26.1849785*T*LOG(T)
        +4.858E-4*T**2-1.393669E-6*T**3+78950*T**(-1);
          923.00 Y –13804.4772 +202.909445*T-34.0888057*T*LOG(T)
        -3.65446056E7*T**(-2) +1.06753982E28*T**(-9); 6000 N !
$
  FUNCTION SBLIQUID 298.15 9071.98+146.800*T-31.38*T*LOG(T)
```

```
    -2.441646E8*T**(-2); 6000 N !
$
 ……
 ……<more>
$
 FUNCTION LFCT 298.15 –17325.6+5.03600*T; 6000 N !
 FUNCTION GFCTSBSN 298.15 LFCT+SBSOLID+2948.291+3721.286; 6000 N !
 FUNCTION ISB 298.15 15000; 6000 N !
 FUNCTION ISN 298.15 47199.9-95.6270*T; 6000 N !
$
 ……
 ……<more>
$
 PARAMETER G(RHOMBO,SB;0) 298.15 SBSOLID; 6000 N !
 PARAMETER G(RHOMBO,SN;0) 298.15 2035+SNSOLID; 6000 N !
$
 PARAMETER G(HCP, MG;0) 298.15 MGSOLID; 6000 N !
 PARAMETER G(HCP, SN;0) 298.15 32000+SNSOLID; 6000 N !
 PARAMETER G(HCP, MG,SN;0) 298.15 –69566-9.23185+T; 6000 N !
$
 PARAMETER G(BCT,SN;0) 298.15 SNSOLID; 6000 N !
 PARAMETER G(BCT,SB;0) 298.15 1000+SBSOLID; 6000 N !
 PARAMETER G(BCT,SB,SN;0) 298.15 0.5*ISB+0.5ISN; 6000 N !
 PARAMETER G(BCT,SB,SN;1) 298.15 0.5*ISB+0.5ISN; 6000 N !
$
 PARAMETER G(IONICLIQ,MG2+:SB3-;0) 298.15 –204389-4.98506*T
    -2.75637E9*T**(-2)+3*MGLIQUID+2*SBLIQUID; 6000 N !
 PARAMETER G(IONICLIQ,MG2+:SN4-;0) 298.15 –98639.5+881.073*T
    -174.523*T*LOG(T)-1.79808E9*T**(-2); 6000 N !
 PARAMETER G(IONICLIQ,MG2+:SB;0) 298.15 SBLIQUID; 6000 N !
$
 ……
 ……<more>
$
```

第 7 部分 制表模块（TAB）

7.1 引言

Thermo-Calc 软件中制表模块 TAB⇔设计为对所有类型的各种组元、化学计量比或溶体相或反应的热力学函数。

当前 TAB 模块总是评价均匀态或反应中物质的最稳定的组元。以表或绘图的形式列出结果。

此模块也可对一个纯成分相或固定成分处溶体相制热力学函数表。

在当前 TAB 模块中有如下命令：

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:

7.2 一般命令

7.2.1 HELP

描述：此命令列出所有可用命令或给出指定命令的解释。

提要 1：HELP <command name>

提要 1：HELP

接着提示：COMMAND: <command name>

选项：command name—获得帮助的命令名（TAB 模块命令之一）。

注意：没有键入指定的唯一命令名就按<RETURN>键将列出所有 TAB 命令。

指定唯一的 TAB 命令将在屏幕上打印该命令的解释（通常与本用户指南的文本相同）。

键入不是唯一的命令缩写将列出所有匹配的命令。通过键入唯一的缩写或完整命令名可获得所期望的命令的解释。

7.2.2 GOTO_MODULE

描述：此命令实行模块之间切换，也必须键入所期望的模块名。为了获得可用的模块列表，按<RETURN>键（参阅 5.4.11 节）。

提要 1：GOTO_MODULE <module name>

提要 2：GOTO_MODULE

接着提示：MODULE NAME: <module name>

选项：module name—随后打开的模块名。

注意：没有键入指定的唯一模块名就按<RETURN>键将列出所有 TCC 模块，如下：

NO SUCH MODULE, USE ANY OF PHASE:
SYSTEM_UTILITES
GIBBS_ENERGY_SYSTEM
TABULATION_RTEACTION
POLY_3
BINARY_DIAGRAM_EASY
DATABASE_RETRISVAL
FUNC_OPT_PLOT
REACTOR_SIMULATOR_3
PARROT
POTENTIAL_DIAGRAM
SCHEIL_SIMULATION
POURBAIX_DIAGRAM
TERNARY_DIAGRAM
MODULE NAME: <module name>

7.2.3 BACK

描述：此命令切换控制回到最近的模块。参阅 GOTO_MODULE 命令。从 POST 模块（后处理模块）离

开，BACK 仅进入 TDB 或 POLY 模块（POST 模块从其输入）。

语法：BACK

7.2.4 EXIT

描述：此命令终止程序并返回到操作系统。除非执行 SAVE 命令（在 GES、POLY 或 PARROT 模块中），否则所有数据和结果将丢失，

语法：EXIT

7.2.5 PATCH

描述：这是一个要进行系统调试的命令，只有想知道要做什么的人才使用这个命令。

语法：PATCH

7.3 重要命令

7.3.1 TABULATE_SUBSTANCE

描述：此命令可用于在常压和各种温度下对一种（具有给定化学式但形成的相/状态没有确定）物质或（从特定的物质数据库如 SSUB3 或从特定的溶体数据库如 SSOL2 和 TCFE2 中获得数据）纯相，或具有固定成分的（从特定的溶体数据库如 SSOL2 和 TCFE2 中获得数据）溶体相的各种热力学性质制表。

在组元的情况下，缺省数据库设定为 SSUB 数据库，用户可在 TDB 或 TAM 模块中使用 SWITCH_DATABASE 命令设定一个合适的数据库作为随后制表的当前数据库。物质化学是符号大小写相同，因此用单个字母表示的元素符号必须紧跟着化学计量比因子，即使是 1。符号 CO 表示 Co 元素，一氧化碳必须写成 C1O1（或 O1C1）。当键入化学式时如何安排元素顺序是无关紧要的（如方解石为 CaC1O3 或 CaO3C1 或 C1O3Ca 或 C1CaO3 或 O3C1Ca），因为 TAB 将搜索当前数据库中所有可能的路有定义元素核化学计量比系数的组元。如果特定物质在当前数据库的任何相中没有有效的组元，返回数据时在屏幕上将出现关于什么是不完整的或不合适的警告消息，因此制表失败。因为这个原因，对带电组元如 GAS 相中的 H1+1、H1-1、H2+1 等、LIQUID 香中的 Fe1/+2、Cr1/+3、O1/-2 等、AQUEOUS 相中的 H+1、OH-1、Fe+2 等，此命令不能工作。要注意的有模块自动找出在给定压力下的某些温度范围特定物质以什么形式（相）最稳定，因此制表的热力学数据总是针对各种温度下最稳定物质的。

在纯相或具有固定成分的溶体相情况下，在使用此命令之前，用户不许已经定义体系并从 TDB 模块中的适当溶体数据库中获得热力学数据。相名可以是大写也可以是小写或大小写混合的，若是唯一的可以缩写，如用 SSOL 数据库制表是可用 fcc、bcc、cem、liq 等，SSUB 数据库可使用 GAS、FE-S、wustile、Fe2O3-hem 等。当提示输入各组元可能占据亚点阵的位置分数时，模块可从特定亚点阵或所有可能亚点阵搜索指定相，并要搜索当前定义的体系（包括当前数据库中定义的元素/组元以及有必要的话包括缺省定义的空位和电子）。因此，可对纯相、纯端元溶体相（在端元中所有必要的亚点阵上与非交互作用组元相应的成分定义）或真实溶体的溶体相（溶体中所有必要亚点阵上相关的相互作用的成分定义）。

此外，物质、纯相或具有固定成分的溶体相制表性质之一的变化，可绘制对温度的图或保存为实验文件（以.WXP 为扩展明）。

语法：TABULATE_SUBSTANCE

接着提示：Substance (phase) :<name of the species or phase>

假定是物质，给初期化学式，如 Fe、H2、C1H6、FeC1、CaC1O3、MgSi1O3 等。当在 TAB 模块中的第一次使用 TABULATE_SUBSTANCE substance 时，总是使用 SSUB 数据库作为缺省数据库。如果当前 TCC 安装没有 SSUB 数据库，或特定数据库还没有切换，可提示指定合适的物质或溶体数据库（如 SSUB2、SSUB3、SSOL2、TCFE2 等）。在此命令之前，用户也可在 TAB 模型中使用 SWITCH_DATABASE 命令来设定当前数据库。如果溶体数据库设定为当前数据库，则只对本身作为相的有效物质的中性组元制表。

要注意，其它紧接着的提示之前，在屏幕上显示一列使用的数据库、定义的元素、获得数据序列、参考等。从这样的信息中，用户了解到 TDB 模块在执行什么。

假定是纯相或溶体相，给出其相名，如 FCC、CEMENTITE、LIQUID、SLAG、AQUEOUS、GAS、Fe-S、Wustite、Fe2O3-Hematite 等。将自动提示其它选项，同时必须输入指定相成分的定义。

对纯相（如 Fe-S、Wustite 和 Fe2O3-Hematite），不需要进一步定义成分。对具有一个亚点阵的溶体相（如 AQUEOUS 溶体、GAS 混合物和 SLAG 溶体），相成分要求输入 n-1 位置分数（若当前定义体系的整个成分中所定义的相有 n 个组元，包括所有的已定义的元素/组元，以及对当前数据库所必要的已定义的空位和电子），第 n 组元将自动设定为其余。要注意的是，所输入的位置分数的总和不能超过 1，例如，下面的提示和输入可看成 Fe-Cr-Ni-C-N-O 系中 LIQUID 溶体相（来自 SSOL 数据）（缺省设置时，为提示的组元 Ni 将被指定为其余。

FRACTION OF CONSTITUTE (RETURN FOR PROMPT): <RETURN>
C /1/: .5
CR /1/: .1
FE /1/: <RETURN>
SUM OF FRACTION EXCEED UNITY, PLEASE REENTER
FE /1/: <.8>
N /1/: .005

对具有两个或更多亚点阵的溶体相（如 FCC 合金溶体和 ION_LIQ 离子液态溶体），将首先询问要指定哪个亚点阵中组成的位置分数：所有可能亚点阵的缺省值为 0，特定亚点阵为给定的正数（当然，这个属对当前指定相必须是合理的，也就是，必须小于相的总亚点阵数），对给定亚点阵或所有亚点阵，若在定义相中一个亚点阵上有 n 个组元，将 n-1 次提示为每个亚点阵上可能组成所有必须输入的位置分数，每个亚点阵上的第 n 个组元将自动设定为其余。例如，在 Fe-Cr-Ni-C-N-O 系 FCC 溶体相（来自 SSOL 数据库）可看到如下提示和输入（注意缺省时，未提示的亚点阵 1 上 O 组元和亚点阵 2 上 VA 将指定为其余）：

SPECIFY SUBLATTICE (0 FOR ALL) /0/: <RETURN>
FRACTION IN SUBLATTICE
CR /1/: **.1**
FE /1/: **.0995**
FRACTIONS IN SUBLATTICE
C /1/: **.5**
N /1/: **.5**

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

指定以 pa 为单位的常压力条件。

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

指定开始温度 K。

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

指定制表温度步长

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

若键入<RETURN>，选定的物质或指定的纯或具有固定成分的溶体相的一列基本热力学函数作为表的形式显示（演示在下面给出的输出例子中），并终止命令。

若键入文件名，该表显示在屏幕上并保存为*.EXP 或*.TAB 文件，同时程序将进一步提示下列问题：

Graphical output /Y/: <Y or N>

若回答 N（不），程序将在屏幕上创建表输出，同时将同一个表保存为当前工作目录下带有缺省扩展名.TAB 的简单文本文件。此时，不绘制图形。

若回答 Y（是），程序将正常创建所有热力学函数表（显示在屏幕上），并生成以温度为 X 轴、表中某一行上选定性质为 Y 轴的图形（绘制在屏幕上并保存为*.EXP 文件），同时将进一步询问在结果图上绘制哪一行：

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

指定将哪一种性质作为 Y 轴（相对于温度的 X 轴）在屏幕上绘图。同时，图的所有制表性质和 Y 轴设置（即绘图用的行）将用 Dataplot 格式写进*.EXP 文件。缺省的第 2 行为热容、第 3 行为焓、第 4 行为熵、第 5 行为 Gibbs 能，附加的第 6 行是用户定义函数。表照常出现在屏幕上。接着 POST:提示后屏幕上出现图。POST 模块（后处理）自动打开，使用各种类型的 POST 模块命令来细化绘制的图。可能性包括 X/Y 轴的尺度、X/Y 轴文本的改变等。POST:提示中的命令 BACK 或 EXIT 将总是回到 TAB 模块。

举例输出 1：对具有固定成分[Fe0.80、Cr0.10、Ni0.0995、O0.05][C0.05、N0.05、VA0.09]的作为非理想溶体的 FCC 相（使用 SSOL2 数据库），通过在提示“ Output file /SCREEN/ ”时键入<RETURN>获得下表：

OUTPUT FROM THERMO-CALC

2002.10.23 11.55.66

Phase : FCC Pressure : 100000.00

Species : CR1/--2

T (K)	Cp (Joule/K)	H (Joule)	S (Joule/K)	G (Joule)
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	-1.18.52E+03
……	……	……	……	……
2000.00	4.75402E+1	6.87138E+04	1.08704E+02	-1.48694E+5

（注意：对于相，作为端际组元(end-member)或理想溶体，列出的组元名是不相关的）

举例输出 2：对作为纯物质的组员 H2（使用 SSUB3 数据库），在提示“ Output file /SCREEN/ ”处键入<RETURN>获得下表，而在提示“ Plot column /2/ ”处键入 5 则生成图：

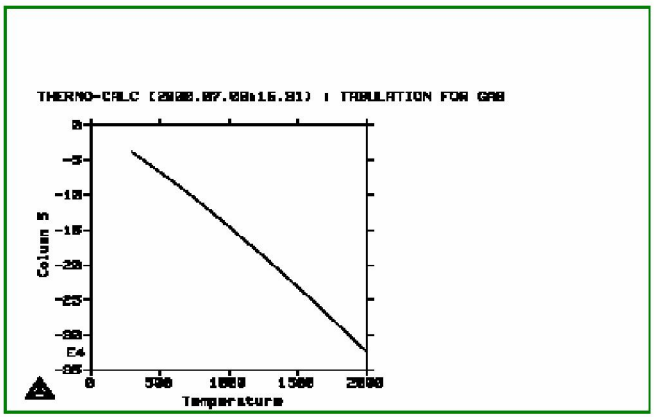
OUTPUT FROM THERMO-CALC

2002.10.23 14. 5.626

Phase : gas Pressure : 100000.00

Species : H2

T (K)	Cp (Joule/K)	H (Joule)	S (Joule/K)	G (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
300.00	2.91591E+01	2.95686E+03	1.39209E+02	-5.27268E+04
……	……	……	……	……
2000.00	3.43045E+1	5.29300E+04	1.88398E+02	-3.23866E+5



产生于 TAB 模块的图，显示纯物质 H2 的 Gibbs 能（即结果表中第 5 行）与温度（K）的关系（从 SSUB 数据库返回的数据。此图可在 POST 模块中细化。

7.3.2 TABULATE_REACTION

描述：用这条命令化学反应的热力学性质的变化可制成一个表，或者性质的变化可绘制成项对温度的图，或保存为实验文件（具有.EXP 扩展名）。来自 SSUB 数据库或由 SWITCH _DATABASE 命令设定的当前数据库自动返回热力学数据，在此命令之前不需要使用 TDB 模块。用户可使用 TAB 模块中的 SWITCH_DATABASE 命令选择其同数据库。

通过给出反应物和生成物来指定反应，如 Ga+S=GaS。化学时可同时大小写（注意：在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 下，TAB 模块仅接受大写，如 GA+S=GAS）。因此，具有单个符号的元素必须后跟化学计量比因子，即使是 1。符号 CO 表示钴，一氧化碳为 C1O1 或 O1C1。

语法：TABULATE_REACTION

接着提示：Same reaction ? /Y/: <Y or N>

若有由命令 ENTER_REACTION 或 TABULATE_REACTION 已经定义的至少一个反应则出现提示。若回答 N（不），定义反应的下一个提示将不出现。

Reaction: <chemical reaction equation>

& <RA+RB=PC+PD>　（一个长的反应式可在几行上键入。反应应由分号“ ; ”或一个空行来终止）

（列表显示使用的数据库、定义的元素、获得数据的序列、参考等）

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

指定以 pa 为单位的恒定压力

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

指定开始温度，K

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

指定结束温度，K

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

指定制表的温度步长。

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

若键入<RETURN>，选定的物质或指定的纯或具有固定成分的溶体相的一系列基本热力学函数作为表的形式显示（演示在下面给出的输出例子中），并终止命令。

若键入文件名，该表显示在屏幕上并保存为*.EXP 或*.TAB 文件，同时程序将进一步提示下列问题：

Graphical output /Y/: <Y or N>

若回答 N（不），程序将在屏幕上创建表输出，同时将同一个表保存为当前工作目录下带

有缺省扩展名.TAB 的简单文本文件。此时，不绘制图形。

若回答 Y（是），程序将正常创建所有热力学函数表（显示在屏幕上），并生成以温度为 X 轴、表中某一行上选定性质为 Y 轴的图形（绘制在屏幕上并保存为*.EXP 文件），同时将进一步询问在结果图上绘制哪一行：

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

指定将哪一种性质作为 Y 轴（相对于温度的 X 轴）在屏幕上绘图。同时，图的所有制表性质和 Y 轴设置（即绘图用的行）将用 Dataplot 格式写进*.EXP 文件。缺省的第 2 行为热容、第 3 行为焓、第 4 行为熵、第 5 行为 Gibbs 能，附加的第 6 行是用户定义函数。表照常出现在屏幕上。接着 POST:提示后屏幕上出现图。POST 模块（后处理）自动打开，使用各种类型的 POST 模块命令来细化绘制的图。可能性包括 X/Y 轴的尺度、X/Y 轴文本的改变等。POST:提示中的命令 BACK 或 EXIT 将总是回到 TAB 模块。

举例输出：对于反应 Ga+S=GaS（使用 SSUB 数据库）在提示“ Output file /SCREEN/ ”中键入<RETURN>获得下表，同时键入 2 于提示“ Plot column /2/ ”则获得如下图形：

```
OUTPUT FROM THERMO-CALC
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        Deta-H            Deta-S          Deta-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 become GA_L ,delta-H=    5589.80
   367.    ---- S become S_S2 ,delta-H=    401.00
   389.    ---- S become S_L ,delta-H=    1721.00
   400.00   -1.22278E+01    -2.17521E+05   -4.07488E+01   -2.01222E+05
   ……       ……              ……              ……              ……
  1100.00    3.71702E -01    -2.22572E+05   -4.97552E+01   -1.67841E+05
  Temperature range exceeded for GA1S1
```

7.3.3 ENTER_REACTION

描述：此命令在指定化学反应和生成反应的热力学性质变化作表和绘图或保存为实验文件（以扩展名 .EXP）时与 TABULATE_REACTION 等同。

通过 SWITCH_DATABASE 命令从 SSUB 数据库或当前数据库组中自动返回热力学数据，所以此命令之前不需要使用 TDB 模块。用户可使用 TAB 模块中 SWITCH_DATABASE 命令选择任何其它数据库。

指定反应的规则于 TABULATE_REACTION 相同。

语法：EATER_REACTION

接着提示：Same reaction? /Y/: <Y or N>

若有由命令 ENTER_REACTION 或 TABULATE_REACTION 已经定义的至少一个反应则出现提示。若回答 N（不），定义反应的下一个提示将不出现。

Reaction: <chemical reaction equation>

& <RA+RB=PC+PD>　（一个长的反应式可在几行上键入。反应应由分号“；”或一个空行来终止）

（列表显示使用的数据库、定义的元素、获得数据的序列、参考等）

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

若键入<RETURN>，选定的物质或指定的纯或具有固定成分的溶体相的一系列基本热力学函数作为表的形式显示（演示在下面给出的输出例子中），并终止命令。

若键入文件名，该表显示在屏幕上并保存为*.EXP 或*.TAB 文件，同时程序将进一步提示下列问题：

Graphical output /Y/: <Y or N>

若回答 N（不），程序将在屏幕上创建表输出，同时将同一个表保存为当前工作目录下带有缺省扩展名.TAB 的简单文本文件。此时，不绘制图形。

若回答 Y（是），程序将正常创建所有热力学函数表（显示在屏幕上），并生成以温度为 X 轴、表中某一行上选定性质为 Y 轴的图形（绘制在屏幕上并保存为*.EXP 文件），同时将进一步询问在结果图上绘制哪一行：

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

指定将哪一种性质作为 Y 轴（相对于温度的 X 轴）在屏幕上绘图。同时，图的所有制表性质和 Y 轴设置（即绘图用的行）将用 Dataplot 格式写进*.EXP 文件。缺省的第 2 行为热容、第 3 行为焓、第 4 行为熵、第 5 行为 Gibbs 能，附加的第 6 行是用户定义函数。表照常出现在屏幕上。接着 POST:提示后屏幕上出现图。POST 模块（后处理）自动打开，使用各种类型的 POST 模块命令来细化绘制的图。可能性包括 X/Y 轴的尺度、X/Y 轴文本的改变等。POST:提示中的命令 BACK 或 EXIT 将总是回到 TAB 模块。

7.3.4 SWITCH_DATABASE

描述：缺省时，TAB 模块将为反应中物质或反应物/生成物或从相或溶体从 SSUB 物质数据库中总是自动返回热力学数据。然而，用户可从其它数据库中（如 SSOL 溶体数据库和 TCFE 钢/铁基合金数据库）选择热力学数据。这从 TCC 版本 N 起才有可能使用 SWITCH_DATABASE 命令来这样做。

此命令将当前数据库切换（或变化）到新的数据库中，并重新初始化定义物质或反应的整个 TAB 模块和存储返回数据的 GES5 工作区。没有给出任何讨论而按下<RERURN>则列出由原始数据库初始化文件（PC Windows NT/2000/XP 和 Windows95/98/ME 环境下/DATA 区中的 TC_INITD 文件或各类 UNIX/Linux 工作站的\data\区中的 initd.tdb 文件）来预定义的所有可直接连接的数据库。如果通过首先给出讨论 USER 然后给出数据库名以及不位于当前工作目录下时的正确路径，用户也可使用自己的数据库。

在 TAB 模块中对物质执行命令 TABULATE_SUBSTANCE、对反应执行 ENTER_REACTION 或 TABULATE_REACTION 之前必须使用此命令（当使用其它数据库进行后续制表时）。

当切换到预先定义的数据库或适当的 USER 数据库时，自动执行 TDB 命令 GET_DATA（5.4.11 节），因此，TAB 模块将立即在屏幕上显示如下消息（当指定 PSUB 数据库时）：

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 1：SWITCH_DATABASE

接着提示：Database /XYZ: <new database name>

指定适当的数据库名。XYZ 表示缺省数据库或以前切换过的当前数据库。若没有给出合适的数据库名和没有使用 USER 选项，将列出：

Use onn of these database
…
PURE4 = SGTE Pure Element Database v4
…
SSUB3 = SGTE Substances Database v4
…
USER = user defined database
DATABASE NAME /XYZ/: <new database name>

选项：new database name—合适的数据库名

注意：DATABASE NAME：键入预先定义数据库之一的前几个符号缩写来指定新的数据库。为了方便，当切换/悬挂自己的数据库或后来从 TCSAB 或起代理处购买的数据库时，可简单地将这些数据库添加到安装 TCC/TCW/DICTRA 软件包的数据库初始化文件 TC_INITD 或 initd.tdb 中的预先定义的数据库中，参阅 2.2.2.2 和 6.2 节。

若选择 USER 选项，必须提供包含 USER 数据库定义与其正确路径的文件。在各种 UNIX/Linux 工作站下，USER 数据库或预定义名之一可在接着提示下使用：

FILENAME：USER 数据库定义文件（***setup.TDB）的有效文件名或预先定义数据库名，及正确路径。缺省的文件名的扩展名为.TDB。

在 Windows NT/2000/XP 和 Windows95/98/ME 环境下，若 USER 数据库名或其路径在 SWITCH_DATABASE 命令的同一行没有给处或不完整或不正确，则弹处**打开文件**（Open file）窗口，此时可指定合适的路径（在 **Look in** 框）和数据库定义（setup）文件名（在 **File name** 框）。接着用户打开选择的 USER 数据库，或可取消这样的 Windows session，在后一种情况下，程序将列出所有预先定义的数据库，同时用户可指定其一来切换或再次进行 USER 选项。

与 TDB 模块不同，若使用 USER 数据库，Gibbs 能系统也要初始化并且将为制表返回来自 USER 数据库的数据。

7.3.5 ENTER_FUNCTION

描述：此命令可用于定义新的数据库于所制表输出的第 6 行中。最后输入的函数列在所有表的第 6 行，同时对所有后续制表的物质或反应可绘制在所有图中（若选择 Plot Column 值 6）。

有限数的状态变量 G、H、S、T、P、V 和 H298 可用在函数定义中，例如-(G-H)/T 可定义为等同于物质的 S 或反应的ΔS 的函数，G+T*S-P*V 可定义为物质的 U（内能）或反应的ΔU（内能变化）的函数。

语法：ENTER_FUNCTION

接着提示：Name: <name>

Function: <definition>

选项：name – 函数名（最大 8 个字符）

definition – 函数的定义。长的函数可在几行上键入。函数应以分号“ ; ”或空行结束。

举例输出：对纯物质 Fe（使用 SSUB 数据库），通过输入函数 G+T*S-P*V，在提示“ Output file /SCREEN/ ”中键入<RERURN>可获得下表，或在提示“ Plot column /2/ ”中键入 6 绘图。

TAB: ENTER-FUNCTION
Name: InEnergy
Function: G+T*S-P*V
&
TAB: TABULATE_SUBSTANCE
Substance (phase): Fe
Low temperature limit /298.15/:
High temperature /2000/:
Step in ytemperature /100/:
Output file /try1/:
Graphical output? /Y/:
Plot column? /2/: 6

OUTPUT FROM THERMO-CALC
2000. 7. 6 12.31. 3
Column 6: InEnergy G+T*S-P*V

Phase : FE_S Pressure : 100000.00
Species: FE

T (k)	Cp (Joule/K)	H (Joule)	S (Joule/K)	G (Joule)	InEnergy
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
……	……	……	……	……	……
1100.00	4.55851E+01	2.99025E+04	7.19412E+01	-4.92328E+04	2.99025E+04
$ Stable phase is FE_S2					
1300.00	3.40840E+01	3.51037E+04	7.64466E+01	-5.66322E+04	3.51037E+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
   1800.00    4.60000E+01    8.20165E+04    1.04736E+02    -1.27456E+05    8.20165E+04
```

7.3.6 TABULATE_DERIVATIVES

描述：此命令主要是为系统调试目的。将自动计算纯相或给定成分溶体的所有偏导数。注意，与化学势不同。

此命令之前，用户必须已经定义体系和已获得使用此命令之前在 TDB 模块的适当的溶体数据库中热力学数据。相名可用大写或小写和大小写混合，制表时可用缩写（只要是唯一的），如用于 SSOL 数据库的 FCC、BCC、cem、Liq 等，或 SSUB 数据库使用的 GAS、FE-S、wustite、FE1O3-hem 等。当提示输入可能占据亚点阵的各种组元的位置分数，模块将随意地搜索特定亚点阵或特定相的所有可能亚点阵，并将搜索当前定义体系的全部构架（包括所有定义的元素/组元，若对当前数据库有必要则包括缺省定义的空位和电子）。因此，可对纯相或具有纯端际成员（end-member）的溶体相（具有端际成员中所有必要亚点阵上相应非交互作用组元的成分定义）或真实溶体的溶体相（具有溶体中所有必要亚点阵上相对交互作用组元的成分定义）的热力学性质制表。

语法：TABULATE_DERIVATIVES

接着提示：Phase Name /XXXX/: <name of the phase>

指定纯相或溶体项的相名，如 FCC、CEMENTITE、LIQUID、SLAG、AQUEOUS、GAS、FE-S、Wustite 等。

XXXX 为 TAB 模块考虑的末尾相。为特定项的成分定义自动提示其它选项和必要的输入。对纯相（如 Fe-S、Wustite 和 Fe2O3-Hematite），不需要进一步成分定义。对于具有一个亚点阵的溶体相（如 AQUEOUS 溶体、GAS 混合物和 SLAG 溶体）要求为相组成 n-1 位置分数输入（若在当前定义体系的整个框架内定义相由 n 个组元，包括所有定义的元素/组元，以及当前数据库必须的缺省定义的空位和电子），第 n 个组元将自动指定为其余。要注意的是，输入的位置份数之和决不能超过 1。例如，下列提示和输入可看成是 Fe-Cr-Ni-C-N-O 构架内来自 SSOL 数据库的 LIQUID 溶体相（缺省时，不提示的 Ni 组元将设定为其余）：

FRACTION OF CONSTITUENT (RETURN FOR PRMPT): <**RERURN**>
C /1/: .5
CR /1/: .1
FE /1/: <**RERURN**>
SUM OF FRACTION EXCEED UNITY, PLEASE REENTER
FE /1/: <**.8**>
N /1/: .005

对具有两个或两个以上亚点阵的溶体相（如 FCC 合金溶体和 ION_LIQ 离子液态溶体），应首先哪个亚点阵要指定组成的位置分数：所有可能亚点阵的缺省值为 0，特定亚点阵为给定的正数（当然，这个正数对当前指定相必须是合理的，也就是，必须小于相的总亚点阵数）。接着，对给定亚点阵或所有亚点阵，若所定义的相中这种亚点阵由 n 个组元，将 n-1 次提示为每个亚点阵的可能组成输入所有必要的位置分数，每个亚点阵上第 n 个组元将自动指定为其余。例如，下列提示和输入可看成是 Fe-Cr-Ni-C-N-O 构架内来自 SSOL 数据库的 FCC 溶体相（缺省时，亚点阵 1 上不提示的 O 组元和亚点阵 2 上 VA 将设定为其余）：

SPECIES SUBLATTICE (0 FOR ALL) /0/: <RETURN>

FRACTIONS IN SUBLATTICE
CR /1/: .1
FE /1/: .8
NI /1/: .08995
FRACTIONS IN SUBLATTICE
C /1/: .05
N /1/: .05
Temperature /2000/: <temperature of interest, in K>
指定感兴趣的温度（K）
Pressure /100000/: <pressure of interest, in pa>
指定感兴趣的压力（pa）

举例输出：对 Fe-Cr-Ni-C-N-O 系中 FCC 相（使用 SSOL 数据库），或的特定成分的下列表：

TAB: **TAB_DER**
Phase name /BCC/: **FCC**
SPECIFY SUBLATTICE (0 FOR ALL) /0/:
FRACTIONS IN SUBLATTICE
CR /1/: .1
FE /1/: .8
NI /1/: .3
SUM OF FRACTIONS EXCEED UNITY, PLEASE REENTER
NI /0/: .0995
FRACTION IN SUBLATTICE
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
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 derivation with respact to CR in sublattice 1
of Gibbs energy: …… -1.26034739E+05
of enthalpy: …… 4.63000206E+04
……
TAB:

7.3.7 LIST_SUBSTANCE

描述：此命令使列出具有某系列元素的当前数据库中所有组元成为可能，对在 TABULATE_SUBSTANCE 命令将组元指定为纯元素是有用的。

语法：LIST_SUBSTANCE

接着提示：With elements /*/ <* or a set of elements>

必须指定组成各种组元的元素。*表示当前数据库中所有元素。

若指定某些元素，液体是如何以这样的元素列出组元

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

将在当前数据库中搜索所有组元（不是相）。若回答 Y（缺省），除了这些指定的外，将允许不搜索其它元素，若回答 N，将列出至少包含指定元素的所有组元。

举例输出：对 SSOL 数据库，各种选项给出不同列表，象如下

```
TAB: l-sub
With element /*/:
VA          AG          AL
AM          AS          AU
B           BA          BE
…           …           …
H2O         O1H1/-      H1O1/-1
SI1O2       CA1O1
TAB:
```

7.4 其它命令

7.4.1 SET_ENERGY_UNIT

描述：此命令在当前计算操作中的所有后续输出（表、图和文件）的能量单位设定为卡（calories）或焦（joule）。

提要 1：SET_ENERGY_UNIT <unit>

提要 1：SET_ENERGY_UNIT

接着提示：Energy unit (C=Cal, J=Joule) /J/: <unit>

选项：unit -- C（卡）或 J（焦耳）

7.4.2 SET_PLOT_FORMAT

描述：此命令在将结果在屏幕上绘图或文件保存为 EXP 文件（使用 Dataplot 格式，请参阅第 12、13 和 15 部分）和 TAB 文件（在屏幕上显示的简单文本文件）时设定绘图格式。**重要提示**：此命令不同于 POST 模块中的 SET_PLOT_FORMAT 命令，但等同于 SYS（系统实用程序）监视器的 SET_PLOT_ENVIRONMENT 命令。

用此命令，用户可将图形输出格式设定到不同图形设备上。缺省单位（Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 上为 1、Linux 和各种 UNIX 工作站上为 9）可用 SYS 监视器中的 SET_PLOT_ENVIRONMENT 命令或用 TC.INI 文件来改变。

语法：SET_PLOT_FORMAT <unit>

选项：unit -- 屏幕上表达图形时 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 上缺省设定单位为 1，Linux 和各种 UNIX 工作站上为 9，输出的所有其它单位于*.EXP 和*.TAB 文件相同。

7.4.3 MACRO_FILE_OPEN

描述：宏是在文件上定义序列命令的方便方法，通过此命令可执行宏。当经常进行很小变化（体系定义、条件、绘图设置等）的同一计算时这条命令绝对有用。从评价中计算相图时最好使用此命令。用

宏文件（通常具有缺省扩展名“ TCM ”），各种合法的 Thermo-Calc 命令都可存储在一个文件中，仅键入由文件名所继续的宏命令。

宏文件可包含任何合法的 Thermo-Calc 命令。宏必须用命令 EXIT 来终止，或者在 SYS、GES、PLOT、PARROT 或 POST 用命令 SET_INTERACTIVE 来终止。

宏的有趣功能是允许于用户进行交互。因此，可以如下方式输入：

GO POLY-3

SET AXIS VAR 2 T

@?Low-temperature-limit

@?High-temperature-limit

宏将停止在“ @? ”，在屏幕上的“ ？ ”后写文本并等待用户输入。将使用用户的输入作为 Thermo-Calc 程序的输入，此时限制最低和最高轴值。

可由宏变量，记为#1、#2 等。最多有 9 个变量。可由以下方法赋值

@#3First element?

当体使用户和等待用户输入时，将在“ @#3 ”之后写文本。输入将为宏变量 3 赋值。可使用宏不同部分中的这些变量。例如：

DEFINE-SYSTEM ##3

将在“ ##3 ”处插入宏变量 3 的内容的文本复制。可在更复杂命令中使用这个宏。

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

将宏变量 3 的摩尔分数设定为轴 1。

再次注意，当在 POLY、POST、SYS、GES 或 PARROT 模块中用命令 SET-INTERACTIVE 终止宏命令。

宏命令也可有用“ @@ ”符号开始的尽可能多的注释行。注释行将在容易存档宏文件方面提供很大的帮助，而不考虑命令行和当 TCC 访问时不影响所有正常 Thermo-Calc 命令的进行。

若在 SYS 模块中使用 SET_LOG_FILE 命令同时在 SYS/TDB/TAB/GES/POLY/POST/PARROT/ED-EXP 命令和特定模块命令之前给出*.LOG 文件名，宏文件可有 Thermo-Calc 软件自动生成。这种*.LOG 文件是一个简单文本文件，通过使用简单文本编辑器（如 Notepad、Worgpad、Emacs、PFE 等）可进一步编辑，如取走不必要的行、修改一些命令、设置与定义、添加一些暂停点、添加以“ @@ ” 开头的一些有帮助的注释行等。然后用标准扩展名“ TCM ”保存为宏文件。

从版本 N 起，宏文件可套入 5 级，即一个宏文件可以访问另一个宏文件，若用 SET_INTERACTVE 命令终止宏将在前一个宏中一个命令来继续。若宏被 end-of-file 来终止，则将异常终端 Thermo-Calc 程序。

语法 1：MACRO_FILE_OPEN <name of a macro file>

语法 2：MACRO_FILE_OPEN

接着提示：Macro filename: <name of a macro file>

用宏命令指定文件名，缺省扩展名为“ TCM ”。

注意：在 Windows NT/2000/95/98/ME 环境下，若命令之后没有给处适当的宏文件，屏幕上将弹处 Open file 窗口，以便指定路径（在 **Look in** 框）和文件名（在 **File name** 框），如图 14-2 所示。

不能改变文件类型（就象在 **File of type** 框中的 TCM）。按 Open 键，程序继续执行各种 Thermo-Calc 命令。用户也可取消这个 Open file 窗口 session。因此将不打开当前宏文件。

若宏文件包括为了设定 LOG 文件、保存/读取 GES3/POLY3/PARROT 工作区、切换 USER 数据库、编译实验（来自存在的*.POP 文件）、创建新的*.PAR 文件、悬挂实验数据文件、绘制/卸载图等的一些 SYS/TDB/TAB/GES/PLOY/POST/PARROT/ED_EXP 模块命令，屏幕上将弹出相应窗口（如 Save as、Open file、print 等），详细情况参阅相关命令。

进一步提示：当使用宏文件在屏幕上绘图，而用命令 SET_PLOT_FOEMAT 改变缺省的绘图环境时，主要

的是先再次使用命令 SET_PLOT_FOEMAT 变回到缺省值 1（Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME）或 9（Linux 和各种 UNIX 工作站）。

更多的例子参阅 TCC 安装区\TCEX\上 TECX12.TCM 和 Thermo_Calc Exaples Book。如何构建宏的更详细情况参阅 8.11.8 和 14.2.7。

7.4.4 SET_INTERACTIVE

描述：此命令重新安排初始值的输入与输出，即键盘与屏幕。记住添加此命令作为宏文件的最后一条命令。

语法：SET_INTERACTIVE

7.5 绘制表

如 7.31、7.3.2、7.3.3 和 7.3.5 所示，绘制物质、纯或溶体相或反应的热力学性质（如在所制的表中的各行）对温度的德图形势很方便的。

为获得物质的、纯或溶体相或物质之间反应的热容或焓的图形，必须首先键入 TABULATE_SUBSTANCE、TABULATE_REACTION 或 ENTER_REACTION 命令，并必须限定物质、相与其固定成分或反应。必须回答温度范围、温度步长、压力条件等问题，必须用一个文件名指定问题“ Output file ”。

两个问题必须回答如下：

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

若回答 N，程序将在屏幕上创建表输出，同时在当前目录下用缺省扩展名.TAB 保存为简单文本文件。此时，不会制图形

若回答 Y，程序将正常创建所有热力学函数表同时生成温度为 X 轴、选定的表中某一行上的性质为为 Y 轴的图形（在屏幕上绘图并保存为*.EXP 文件），并将进一步提问在结果图上绘制哪一行：

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

指定哪种性质（作为行数）作为 Y 轴（相对于温度为 X 轴）在屏幕上绘图。同时，将使用数据绘图（Dataplot）格式将图的所有制表性质和 Y 轴设定（即绘图行）写进一个*.EXP 文件。缺省的行 2 为热容、3 为焓、4 为熵、5 为 Gibbs 能，附加的行 6 为用户定义函数。表通常将出现在屏幕上，接着是 POST:提示。POST 模块（后处理）自动打开，可使用各种 POST 模块命令来细化绘制的图形，可细化的包括 X/Y 轴标尺、X/Y 轴文本的变化等。在 POST:提示处命令 BACK 或 EXIT 总是将你带回到 TAB 模块。

若需要图形绘制、具有绘图 X/Y 坐标的*.EXP 文件和输出表的*.TAB 文件，只要两次给出相同的 TABULATE_SUBSTANCE 或 TABULATE_REACTION 命令即可（“ Output file ”提示下用两个不同文件名）。

第 8 部分 平衡计算模块（POLY）

8.1 引言

热力学平衡的知识时理解材料性质和工艺的重要因素。用热力学模型参数数据库可以预测这些性质。还可获得扩散控制相变和其它动力学过程的驱动力。

用广泛的平衡计算模块 POLY⇓，可计算多种不同类型的平衡和相图，特别是多元相图。因此这是开发新材料和新工艺的重要工具。现行的 POLY 模块是其第三版本，这是为什么在 Thermo-Calc 软件中称为 POLY_3 的原因。

不同类型的数据库可用于 POLY 模块，因此该模块可用于合金或陶瓷以及气相平衡、包括不均匀反应系的水溶液。从 TCC 版本 N 起，在平衡计算使单个系统中可定义多达 40 种元素或 1000 个组元（以前为 20 种元素和 400 个组元）。

相用户提供最灵活的工具是非常仔细的。所有标准的热力学状态变量可用于设定计算平衡的条件和绘图的坐标轴。唯一的便利是将单个相的成分或任何性质设定为条件。任何状态变量可沿一个轴变化以

便生成图形。

相图计算过程中，存储所有计算的平衡的完整描述，在图形中可使用任何状态变量作为坐标轴。

与 PARROT 模块一起，POLY 模块也可用于严格评价实验数据，以便开发热力学数据库。POLY 模块使用 Gibbs 能系统（GES）来对每个相的热力学性质模型化和数据处理。

在 POLY 模块中由以下命令：

```
PLOY_3:?
  ADD_INITIAL_EQUILIBRIUM        HELP                        SET_EQUILIBRIUM
  AMEND_STORED_EQUILIBRIUM       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_EQUILIBRIUM    SET_INTERACTIVE
  CRATE_NEW_EQUILIBRIUM          LIST_STATUS                 SET_NUMERICAL_LIMITS
  DEFINE_COMPONEMTS              LIST_SYMBOLS                SET_REFERENCE_STATE
  DEFINE_DIAGRAM                 LOAD_INTIAL_ EQUILIBRIUM    SET_STATE_CONSTITUTION
  DEFINE_MATERIAL                MACRO_FILE_OPEN             SET_STATE_VALUE
  DEFINE_INITIAL_EQUILIM         MAP                         SHOW_VALUE
  DEFINE_SYMBOL                  POST                        SPECIAL_OPTIONS
  ENTER_SYMBOL                   READ_WORKSPACES             STEP_WITH_OPTIONS
  EVALUATE_FUNCTIONS             RECOVER_START_VALUES        STEP_WITH_OPTIONS
  EXIT                           REINITIATE_MODULE
  GOTO_MODULE                    SAVE_WORKSPACES
PLOY_3:
```

8.2 开始

计算平衡或象图的基本步骤描述如下。更详细的内容请参阅本手册特定部分。

返回数据：

体系的热力学数据必须首先从 TDB 模块中的适当数据库返回。在这专业的高级模块如 BINARY、TERNARY、POURBAIX 和 SCHEIL，自动返回必要的热力学数据。也可使用 POLY 模块中的 DEFINE_MATERIAL 命令。若已经进行的计算并被保存（SAVE），可用保存（SAVE）来带代替读（READ）。

设定条件：

为定义的体系获得所有热力学数据后，用户必须在 POLY 中给出大量条件，以便是多元系的自由度等于 0。用 SET_CONDITION 命令设定条件，如处在 FIXED 状态的特定相有一个条件，即作为稳定相，也可使用 CHANGE_STATUS 命令。体系组成的定义与其参考态可分别用 DEFINE_COMPONENT 和 SET_REFERENCE_STATE 命令来改变。除了标准态和导出变量外，附加变量、函数和表也可用 ENTER_SYMBOL 命令来定义。

计算平衡：

POLY 模块中的 COMPUTE_EQUILIBRIUM 命令试图对不均匀反应相找到给定条件下稳定相的集合，用 LIST_EQUILIBRIUM 命令获得其结果。若计算步收敛，可设法修改条件使之尽量简单。最简单类型的条件是固定温度和压力以及整体成分。即使不是要计算的，也有助于用这样的条件作为第一步来计算初始平衡。之后，可设法使用相状况、焓条件、单独相的成分等。容易设定不切实际的条件，程序不会以任何其它方式告诉条件是不可能的，除非计算平衡失败。

产生图性质：

当平衡计算已经收敛时，下一步是要在 POLY 模块中设定 steping/mapping 轴变量并进行 steping 或 mapping 计算。用 STEP 或 MAP 命令产生各种预先定义的标准态和导数性质，以及可用于绘制相图和性

质图的用户输入符号（变量/函数/表）。

绘图：

在后处理器即 POST 模块中绘制相图和性质图。在 STEP 或 MAP 命令之后，使用一些缺省变量（通常在 steping 或 mapping 之前设轴变量）作为 X/Y 轴变量来自动设定轴，否则，必须首先使用命令 SET_DIAGRAM_AXIS 来定义 X/Y 轴。使用各 POST 命令可进一步细化图的外观，并能以各种图形格式导出生成的图。

8.3 基本热力学

在第 3 部分已经给出 Thermo-Calc 软件/数据库/界面包中使用的一些热力学术语的广泛介绍。更多细节，参阅 2.2 节。

8.3.1 体系与相

热力学中总是要处理与环境交换或不交换物质、热和功的体系。在多元体系中，一种物质总是出现在一个或多个稳定相中，一相意味着体系的一个均匀部分，而均匀则意味着成分和温度是一致的，各处有同一种结构。相同相经常出现在体积内的分离部分，如空气中的粉尘粒子。若有几个均匀相，则体系是不均质的，热力学支配着体系内不均质的反应。

平衡计算可为单个体系定义 40 种元素（即 40 个组成）和 1000 个组元（在 TCC 版本 N 之前只有 20 种元素和 400 个组元）。个别的溶体相可有多达 10 个亚点阵，一个理想混合物相（如气体）可至多覆盖 1000 个组元，而费里相溶体相（如水溶液、液体、炉渣）最多含有 200 个组元（在 TCC 版本 P 中，在 TCC 版本 N 中由 80 个）。

8.3.2 组元（Species）

正如第 3 部分提到的那样，一相的热力学性质与成分的关系可使用 Gibbs 能与相中组成分属关系表达式来模型化，组成可以是元素或分子状集合体，可是中性的或带电的。所有这样的组成称作组元。一个组元可以以相或几相的组成，在一相中的出现可以是真实的或虚拟的（来自模型的假定）。

模型化的一个特定组元是空位，总是记作 VA。空位用作有位置但是是空的亚点阵的组成。VA 缺省定义为系统成分，其化学势总是设定为 0。

玲一个特定组元是电子，气相、液相或固相中记作/-或在水溶液相中记作 ZE。在此情况下 ZE 定义为一个组元，也缺省定义为体系的一个成分，同时其化学势通常由 GES 模块使用与水溶液相联系的是当模型来计算（参阅 8.12 节）。

8.3.3 状态变量

POLY 在由状态变量描述的热力学体系上操作。状态变量的例子由温度、摩尔分数、成分的化学势和活度（在体系或特定相中）、（体系的或特定相的）焓等。在 POLY 模块中，已经为重要序列状态变量指定了一般表示法。

普通的例子有：

T	温度
N(H)	氢的摩尔总数
X(FE)	FE 的全部摩尔分数
X(LIQUID,FE)	FE 在液相中的摩尔分数
W(AL2O3)	Al2O3 的质量分数
NP(BCC)	BCC 的摩尔数
ACR(C)	C 的活度
HM	每摩尔成分总焓
HM(FCC)	FCC 的每摩尔成分的焓

要注意的是，包含成分的状态变量可用作定义成分，但不能用作定义组元。在定义的体系重要定义新的成分，应使用 DEFINE_COMPONENT 命令。下面给出的状态列表是不详尽的，使用预先定义的状态变量的组合和获得保留的（remaining）状态变量。（参阅 3.2.5 节）。

8.3.3.1 内禀性质

助记符	含义
T	温度
P	压力
ACR(<component>)	活度
MUR(<component>)	化学势

数据库中预先定义成分的活度和化学势，用户使用 SET_REFERENCE_STATE 命令不能改变它。

对具有气相的体系，直接使用气体组元作为活度或化学位条件有时是方便的。象所有其它相一样，这些与组元相关的状态变量也可在后处理器中使用。

8.3.3.2 广延性质的正规化

对所有的广延性质，可在助记符名添加后缀来指明正规化的广延性质。助记符名是容易记忆其所表示的涵义的字母的组合。

整个体系的广延性质 Z：

Z	整个体系中广延性质 Z
ZM	体系中每摩尔成分的广延性质 Z
ZW	体系中单位质量（每克）的广延性质 Z
ZV	体系中单位体积（每 m^3）的广延性质 Z

一相的广延性质 Z：

Z	当前量相的广延性质 Z
ZM	相的每摩尔成分的广延性质 Z
ZW	相的单位质量（每克）的广延性质 Z
ZV	相的单位体积（每 m^3）的广延性质 Z
ZF	相的每摩尔化学势单位的广延性质 Z

8.3.3.3 能量广延性质

下列助记符名用作体系或相的能量广延性质

S	体系的熵
S(phase)	一相的熵
V	体系的体积
V(phase)	一相的体积
G	体系的 Gibbs 能
G(phase)	一相的 Gibbs 能
H	体系的焓
H(phase)	一相的焓
A	体系的 Helmhotz 能
A(phase)	一相的 Helmhotz 能

注意：后缀 M、W、V 和 F 可用于这些量。

一些能的量只可用于一相而不能用作条件。

DGM(phase) 每摩尔成分的析出驱动力（以被 RT 除，所以是无量钢的）

8.3.3.4 化合物的量

下列助记符名用于体系或一相的量：

N(component)	体系中的摩尔数
N(phase,component)	一相中的摩尔数
B(component)	体系的质量
B(phase,component)	一相中的质量

注意：后缀 M、W、V 和 F 可用于这些量。

备注：用 X 和 W 用于指定摩尔分数和质量，而不是助记符 NM 和 BW。

8.3.3.5 体系中的总量

下列助记符名用于体系中的化合物的总量：

N	体系的摩尔数
B	体系的制量

注意：后缀 M、W、V 和 F 可用于这些量。

备注：组合 BW 是合法的但它总唯一个单位所以不是很意义的，BV 是密度。

8.3.3.6 体系中一相的量

下列助记符名用于体系中的相的量：

NP(phase)	一相的摩尔数
BP(phase)	一相的质量
VP(phase)	一相的体积

注意：后缀 M、W、V 和 F 可用于这些量。

备注：标准化性质是针对作体系的。

8.3.3.7 组成

相的组成使用位置分数来表示：

Y(phase,species#sublattice)	一相中特定亚点阵上位置分数

注意：这个量依赖于相模型的选择。

8.3.3.8 偏导数

可用在两个状态函数之间加点“ . ”的来求状态变量的导数值，例如：

HM.T	热容

注意：变量后的点必须作为计算体系中已经定义的一个条件。必须使用更多更详细导数，因此 T.W(LIQUID,C)意思是与碳有关的液相变节的斜率。

8.3.4 组分

缺省时，元素用作 POLY 模块中的组分，在一些情况下，如氧化物和含水体系中，这样是很不方便和很不合适的。然而，组分组可用 POLY 命令 DEFINE_COMPONENT 来改变。POLY 模块中定义的新组分也必须是当前定义体系中的组元。

要注意的是，仅可给出组分的关于状态变量 AC、MU、N、X、W 等的条件（参阅 8.3.3）因此命令

SET_CONDITION H(H2)=100

是不合法的，除非组分已经定义为 H2 而不是缺省的 H。可以使用如下命令来去除这种不方便性：

SET_INPUT_AMOUNT N(H2)=100

这里仅要求 H2 为体系中的组元，随后程序将其转换为条件：

SET_CONDITION N(H)=200

8.3.5 条件

为了进行平衡计算，依据 Gibbs 相规则必须有 0 自由度。自由度等于组分数加 2（温度和压力）。

利用 SET_CONDITION 命令定义每种条件和用 CHANGE_STATUS PHASE 命令设定具有固定态的各相中的一相可减少自由度。

最简单的条件是，设定温度、压力和组分的量。但可将条件设定为（体系的或特定相中）组分的活度或化学势，或任何内禀或广延状态变量。使用 INFO STATE_VARIABLE 命令序列以及 3.2.5 中的命令来理解如何表示状态变量。

对 Fe-Cr-C 细，简单例子是

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

意思是，温度为 1200K、压力为 1bar、Cr 摩尔分数是 0.18（即 18%摩尔）、C 的质量分数为 0.0013（即重

量百分数为 0.13），材料的量等于 1 摩尔（意味着 Fe 为其余）。C-H-O 系的一组条件为

SET_CONDITION T=2173K、P=101325、N(H2)=14、N(O2)=18、N(C)=5

意思是，温度为 2173K、压力为 1atm、H2 的摩尔数为 14、O2 的摩尔数为 18、C 的摩尔数为 5。这里已经将 H2 和 O2 设定为组分。

为了用户的方便，非组分的组元的输入也可能在条件中使用，但必须用 SET_INPUT_AMOUNT 命令，将其转换为依据体系中定义组分的可接受条件。参阅 SET_INPUT_AMOUNT 命令。

规定无意义的一组条件是可能的，因此用户必须仔细。通常地，程序只有在计算中收敛失败才能发现无意义的一组条件。

POLY 模块中重要特征是可以设定关于相成分的条件。大多数平衡程序仅能处理全部成分上的条件，但使用 POLY 可指定个别相的成分或焓或熵。当然该相应是稳定的，例如

SET_CONDITION W(LIQ,C)=0.012

意思是液相中 C 的质量分数应为 0.012（即重量百分数为 1.2）。

将状态函数的线性表达式作为条件给出是可能的，例如

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

可用于计算 Fe-S 系中磁黄铁矿的全等熔化温度。

固定（FIX）相状态可用于直接计算不变或单变点或极值，例如，为了计算熔化温度，可通过改变 LIQUID 相状态温度条件替换成体系中固定为 0 摩尔

SET_CONDITION T=NONE

CHANGE_STATUS PHASE LIQUID=FIX 0

FIX 相状态也可用于计算体系处于与一个或几个给定稳定相平衡的相图。

8.4 不同类型的计算

8.4.1 计算单一平衡

用户通常从计算单一平衡开始，通过设定所有必要的条件以使自由度为零来完成计算。参阅 SET_CONDITION 命令的信息。

当适当设定必要的条件时，通过给定 COMPUTE_EQUILIBBTIUM 命令计算第一个平衡。程序可为相成分提供自动的开始值，这个通常会工作正常，但在一些情况下计算第一个平衡会有问题。在 8.13（Trouble Shooting）中给出如何处理中一些问题的一些提示。

<u>若计算不收敛，试着使用尽可能简单的条件</u>。最简单型的条件是固定温度和压力，以及给定的总成分。即使不是需要的，也有助于先使用这样的条件计算平衡。之后，可试着一起使用相状况、焓条件、单个相的成分等。要注意容易设置表现不可能平衡的条件，此时程序不会告诉你这些，除非不能计算这个不可能的相图。因此，用户必须知道什么与每个条件的计算平衡有关。

计算第一个单个平衡以后，在计算相图和性质图之前用户达到满意同时也可通过改变条件继续计算其它单个平衡。将定义的条件之一设定为轴变量并使用 STEP 命令（参阅 STEP 命令上的信息）可计算机算性质图，将两个或更多条件设定为轴变量可用 MAP 命令计算相图（参阅 MAP 命令的信息）。更详细内容参阅 8.4.2 到 8.4.5。

8.4.2 性质图的 Steping 计算

在 POLY 模块中，可以计算一系列一个条件是步进轴变量的平衡。通过先计算单个相平衡，然后将选定的条件之一作为轴变量。也必须给出最小和最大值以及沿轴的增加步。

STEP 命令有流中选相：

Ø NORMAL	每步之间变化步进轴选相
Ø INITIAL_EQUILIBRIA	每个计算点添加初始平衡。这对生成一组等温计算是有用的。
Ø EVALUATE	当在 steping 计算过程中要改变附加条件（而不是 steping 变量）时。利用这个选项，通过改变总成分为每次步进之后的新液相成分可模拟 Scheil-Gullive 凝固过程。参阅 8.3.4 凝固路径模拟

的信息。

Ø SEPARATE_PHASES　　每步分开计算输入的相。按此方法，可计算许多相的 Gibbs 能随可变成分的变化。

Ø T-ZERO　　可计算所谓的 T_0（T-ZERO）线，其上一个成分而不是其它成分的化学势在部分平衡的两相中相等的线，。

Ø PARAEQUILIBRIUM　　可计算在两个部分平衡相中一个组分的化学势相等而其它组分化学势不等的所谓的仲平衡线，见 8.4.4 中仲平衡与 T_0 温度模拟中的信息。

注意：在 TCC 版本 P 中有最后两个选项。

8.4.3 凝固路径模拟

Thermo-Calc 仅是要进行平衡计算，因此不能模拟与时间和空间有关的转变过程。然而，一个简单类型的转变，即液相中有扩散很快而固相中的扩散很慢并可忽略的的凝固，可使用 Thermo-Calc 软件包来模拟。

在这种情况下，液/固界面处的情况可使用局与平衡来描述。通过以温度（或焓或液相量）的小增量步进，可决定液体新的成分，然后去除通过在进行下一步步进之前重新设定总成分为新的液相成分而形成的固相量。这可使用 POLY 命令 STEP 的特定选项 EVALUATE，即命令序列 STEP EVALUATE 来达到。

为了引导这种以用户友好方式凝固模拟，使用 Thermo-Calc 软件包中一个特定模块即 SCHEIL 模块。对 SCHEIL 模块的更详细描述可在 10.8 中找到，使用此模块的两种情况包含在 Thermo-Calc 例子书中（即例 15 和 20）。

8.4.4 仲平衡与 T_0 温度模拟

除了凝固过程的 SCHEIL 模块模拟之外，两种部分平衡仲平衡与 T_0 温度模拟也可用 Thermo-Calc 软件包模拟。

仲平衡意味着一个部分平衡，多元合金中一种间隙成分（如碳 C 氮 N）可比其它成分（包括主元素和合金元素的置换成分）扩散快很多，因而间隙成分的化学势不是其它元素在两个部分平衡相相等，在这种仲平衡状态下，可能有部分无分配转变，其中新相由不同量的可移动成分来形成但具有与慢扩散成分相同的化学成分。仲平衡计算是有用的，如当研究研究扩不同元素的扩散有较大差别的体系中的相变时。在仲平衡状态下发生的转变可以比相界面处保持全区域平衡更有刚性。

例如，在三元合金系（如 Fe-M-C）中经常出现一种元素（间隙溶质 C）的扩散比其它两种元素（置换型主元素 Fe 和置换型合金元素 M）快很多。通常可能的是形成具有不同可移动元素含量而其它两种元素（Fe 和 M）相对含量没有变化的新相。因此，两相中维持部分平衡，同时相转变通过局域平衡的两相界面将部分无分配。在界面处，无驱动力。可移动元素的化学势（μ_C）在两侧有相同的值，但不可移动元素的化学势（μ_{Fe} 和 μ_M）由不同的值，取代的是，化学势和不可移动元素的所谓的 u 分数[u_{Fe} 和 u_M，定义为 $N_i/(N_{Fe}+N_M)$或 $x_i/(x_{Fe}+x_M)$]的乘积有相同的值。所谓的 u 分数（成分变量），即整个体系中多元系中特定相的第 i 成分（可能是置换型主成分 Fe 或置换型合金成分或间隙成分）的 u_i 一般定义为 $x_j/\sum_{j\in S}x_j$，其中 x_j 的求和是对整个体系中或特定相中置换型主成分和置换型合金成分，x_i 表示整个体系中或特定相中第 i 成分本身的摩尔分数。在仲平衡状态下，$dT=dP=d\mu_C=d\mu_{Fe}=d\mu_M=0$，驱动力应为零，界面两侧 T、P、μ_C 和 $u_{Fe}\mu_{Fe}+u_M\mu_M$（Fe 和 M 的组合化学势）必须有相同的值。在摩尔 Gibbs 能图中（如图 8.1 所示），仲平衡中两相之间的连线指向 C 角，落在两个 Gibbs 能表面的公共正切线上但不在公共正且平面上。

T_0-温度（T-zero）定义为多元系中两相的某一成分有相同 Gibbs 能的温度。T_0-温度位于两相之间的双相区仲，是无扩散转变的理论极限。因此当研究无扩散转变时对 T_0-温度的计算感兴趣。

具有固定成分的多元系中 T_0-温度是位于共切线上的一单个点，该公切线上无扩散转变的部分平衡中两相的 Gibbs 能相等而不是组分的化学势相等。一个或两个组分的成分改变，无扩散转变的部分平衡中两相的公共 Gibbs 能变成一个平面或表面，T_0 相应地变成一条线或平面。

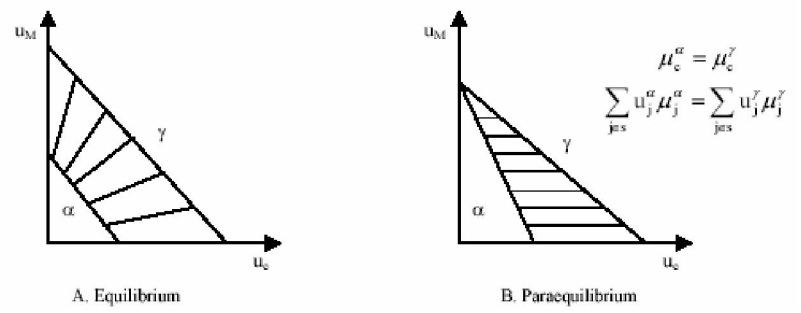


图 8-1 平衡与仲平衡状态：三元 Fe-M-C 相图中 M 为置换型合金元素，C 为快速扩散的碳。图 A 显示平衡条件的等温断面和两相区 $\alpha+\gamma$，而图 A 为仲平衡状态相同的等温断面和两相区

计算 T_0-温度的原理如图 8.2 所示。

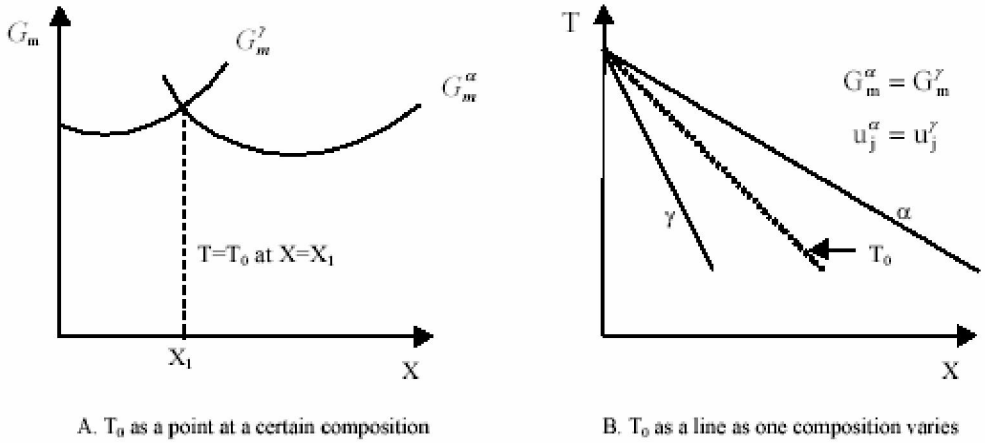


图 8-2 多元系中计算 T_0-温度的原理。图 A 显示某一成分 X_1 的 α 与 γ 相在 T_0 处 Gibbs 能相等，而图 B 显示 T_0 随体系成分的变化。（注意：作为直线 T_0 的变化不是必要的）

对这两个概念的更详细描述，其参阅 Hillert(1998), p358-366。

以前，这两种类型的部分平衡模拟只能使用 PARROT 模块（见 Thermo-Calc Examples Book 中的例 23）。

从 TCC 版本 P 起，在 POLY 模块中有模拟多元系仲平衡和 T_0-温度的两个特定选项：

- 单个平衡计算仲 SPECIAL_OPTIONS 命令（即分别使用公共序列 SPECIAL T-ZERO 和 SPECIAL PARAEQUILIBRIUM）；
- 用一个轴变量计算计算的 STEP_WITH_OPTIONS 命令（即分别使用公共序列 STEP T-ZERO 和 STEP PARAEQUILIBRIUM）。

如何进行模拟的更详细情况请参阅 8.10.16（SPECIAL_OPTIONS 命令）和 8.9.4（STEP_WITH_OPTIONS 命令），以及 Thermo-Calc Examples Book 中的例 42 和 43）

8.4.5 相图的 Mapping 计算

相图有两个或更多独立轴变量。任何已经定义的条件（8.3.5）可用作 mapping 计算的 mapping 变量和相图的轴变量。除了轴变量之外，若体系有多于两个变量可能就有多个条件。从 mapping 计算中，使用 mapped 变量之一作为一个轴变量，并用其它 mapped 变量或任何可变性质（状态或导出变量）或输入的符号作为另一个轴变量，也可绘制多种类型的相图。因此，可产生很普通类型的相图。

不管体系中有多少个附加条件，都可以多个相同方法计算二元、三元和多元相图。（见 8.5.1、8.5.2 和 8.5.4）。在 mapping 程序中也可有固定相（见 8.5.3）。有两个特定模块，即 BIN 和 TERN 模块分别为自动计算二元和三元相图而开发的，更详细的描述简 10.4 和 10.5。

8.4.6 势图计算

一定温度和压力条件金属氧化物/硫化物气体相互作用体系中所谓的势图，可用气体混合相中两个主要组元的活度或化学势作为 mapping 变量来计算，然后，通常使用这两个组元的活度（即逸度，以常用对数形式）作为 X/Y 轴来绘制势图。气体混合物与各种金属形态、金属氧化物、金属硫化物或其它金属相关固体之间的相关系用由这两个势量控制的不同区来表示。特定温度和压力处相互作用体系的各种性质图仲，多个其它性质可能用作轴变量。

特定模块 POT 势为自动计算这种势图和其它相关相图而开发的，详细描述简 10.6。

8.4.7 Pourbaix 图计算

在某些温度和压力条件处包括不均匀相互作用体系的水溶体的所谓 Pourbaix 图（即 pH-Eh 图）是一种特殊类型的相图，其熵的连线不在平面中。两体系组分的化学势或活度 H^+和 EA 用作 mapping 变量，pH 与 Eh 量通常定义为 X/Y 轴。水溶体与各种金属形态、氧化物、氢化物、硫化物、硫酸盐、硝酸盐、硅酸盐、碳酸盐或其它固体或气体混合物之间的象关系，可用由酸度和电势控制的不同区来表示。很多其它性质可能用作特定温度和压力处交互作用体系的各种性质图中的轴变量。特定模块 POURBAIX 是为自动计算 Pourbaix 图和其它相关相图而开发的，详细描述简 10.7。

8.4.8 绘制图

若已经操作 STEP 或 MAP 命令，那么将独立使用后处理器以便产生和细化计算结果的高品质图形输出，结果中可进一步加入实验数据以便比较。POST 命令将控制传递到后处理器（即 POST 模块）。后处理器中命令的详细描述有第 9 部分给出。

8.5 相图

8.5.1 二元相图

迄今为止，二元相图在文献中最常见，也最常用计算机计算。然而最真实的体系具有多于两个组分，因此二元相图更是一种训练以便计算更多实际相图。

注意到有计算二元相图的特定模块 BIN。然而，必须使用特定此模块能够采用的数据库，Thermo-Calc Examples Book 中例 1 给出了一个例子。

使用 POLY 模块可以计算多种不同类型的二元相图，但是传统的只有一个成分轴和一个温度轴。计算首先指定单个平衡，设定的条件如下：

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

这意味着温度应为 1200K、压力为 1bar、C 的质量分数为 0.02（即重量百分数为 2）和体系包含 1 摩尔院子。注意到不能对第二组分的量设定条件。这简单地开始体系其余部分。

设置这些条件后可通过给出以下命令来计算平衡：

CALCULATE_EQUIBRIUM

当计算收敛时，通过设定相图计算轴来继续。在大多数情况，对完全成分范围感兴趣但温度范围可变。

SET_AXIS_VARIABLE 1 W(C) 0 .1 0.002

SET_AXIS_VARIABLE 2 T 900 1900 25

这意味着号码为 1 的轴取作最大增幅 0.002 的在 0 和 0.1 之间变化的 C 的质量分数。号码为 2 的轴取作最大增幅 25 的在 900 到 1200 之间变化的温度。

在开始 mapping 之前，好的惯例是保存（SAVE）工作区。若仅在 MAP 命令之前完成保存，同时因为一些原因 MAP 命令失败，用户可从 mapping 之前重新开始，并试图找到更好开始点。

SAVE

MAP

在后处理器中绘制相图。后处理器将自动设置与 mapping 相同的绘图轴。

POST

PLOT

Thermo-Calc Examples Book 中例 4 种演示了计算二元相图的传统方法。

绘制结果图的更多选择，查找 POST 模块中的信息。

8.5.2 三元相图

有多种类型三元相图而也许更普通的是等温断面。在此情况下，温度是常数，意味着连线位于计算的平面内。可用传统方法计算等温断面和液相面上的单变线（见 Thermo-Calc Examples Book 中例 37）。也可在高级的 TERN 模块中计算（10.5 节）但要求特定数据库（如 PTER），详细情况参阅 Thermo-Calc Examples Book 中例 3）。

为了设定 Al-Mg-Si 系中三元等温断面计算，完成（从数据库模块中返回数据后）：

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

注意：对 Al 的量没有条件，所以为其余。N=1 指定体系是封闭的。这个计算给出体系内一个点。现在定义的各轴如下：

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

结果可在 POST 模块中绘成图。

三元等值面可简单地同样计算。若对 Mg 的摩尔分数为 1 的断面感兴趣，可使用与上面相同的条件。仅定义不同的轴：

```
S-A-V 1 X(XG) 0 1 0.01
S-A-V 2 T 500 2000 25
SAVE almgsi-1mg
MAP
```

在结果途中，连线将不在图的平面内，因此杠杆规则不能适用。但可计算更详细的断面。感兴趣相图是从纯 Al 到 Mg_2Si 的断面，几乎是准二元断面。为了计算这个，必须一点不同的条件，如下所示：

```
SET_CONDITION T=823, P=1E5, N=1, X(MG)-2*X(SI)=0, W(MG)=.01
C-E
```

特殊类型的三元相图是液相面。这仍是简单计算，即每个温度处每个分开的线需要分开的开始点。

然而，按如下方式可容易地计算液相与两个凝聚相一起稳定的单变线：

```
SET_CONDITION T=823, 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
```

现在应有一个只有液相稳定的平衡。设定轴为成分。

```
S-A-V 1 X(MG) 0 1 .01
S-A-V 2 X(SI) 0 1 .01
SAVE almgsi-luni
MAP
```

表 8-1 总结了设定三元系各种类型相图的平衡条件和 mapping 变量的一般规则。也给出了如何定义不同垂直断面的提示，

表 8-1 在 TCC 软件中三元系各种相与性质图的处理

相图类型	相图描述	三角形相图	垂直面向图	Mapping 计算*与图形绘制
等温面	在特定 T（和 P）处相界遍及整个或部分成分空间	X(A)-X(B)-X(C)	X(A)-X(B)	在特定 T（和 P）下以 X(A)和 X(B)绘图
				在特定 T（和 P）处绘制相界

液相面	单变线	在特定 T（和 P）处遍及整个或部分成分空间的液相与两个凝聚相稳定的所有单变线（或称不变）的投影，	X(A)-X(B)-X(C) [-T]	X(A)-X(B) [-T]	在特定 T（和 P）下以 X(A)和 X(B)绘图，其中液项具有固定的相状况（具有固定的量 0-1.0 摩尔）
					绘制液相面上单变线，作为线上结标记绘制或不绘制变化的 T（K 或°C）
	等温面投影	遍及整个或部分成分空间的所有单变线（其中在变化的 T 和特定 P 处）液相与两个凝聚相一同稳定与液相面的一些T等高线(等温不变线，K 或°C）的投影	X(A)-X(B)-X(C) [-T]	X(A)-X(B) [-T]	在特定 T（和 P）下以 X(A)和 X(B)绘图，其中液相有固定的相状况（具有固定的量 0-1.0 摩尔)。每个分开的 T 等高线必须有单独的开始点。
					与投影的液相温度 T 等高线（等温不变线，K 或°C）一起绘制液相面上单变线
等值断面		特定 P 处与 T 和成分变量之一有关的稳定相（保持另一个为常数)。为特定情况垂直断面（见如下）		X(A)-T X(B)-T	在常数 X(C)下和特定 P 处以 X(A)或 X(B)与 T 绘图
					在特定 X(C)和 P 处在各种 X(A)或 X(B)与 T 下绘制稳定相关系
垂直断面		特定 P 处与 T 有关的稳定相和特定成分断面（用两个成分变量之间的关系来表示#)		X(A)-T X(B)-T X(C)-T	在定义的成分关系下和特定 P 处以 X(A)或 X(B)或 X(C)与 T 绘图
					在特定 P 下沿定义的成分断面和 T 绘制稳定相关系

* 在 POLY 模块定义平衡计算条件和绘制与成分有关的变量图，不仅可以是成分的摩尔分数 X(组分)，而且可以是摩尔数 N(组分)、质量 B(组分)、质量分数 W(组分)、化学势 MUR(组分)、活度 ACR(组分)。从而，可产生这些类型的很多可变的相图。然而，此表中，仅指 X(组分)。

\# 三元相途中垂直断面的成分关系为：

一般关系：表示沿从三元系(A-B-C)中已知成分点($X_{A'}$，$X_{B'}$，$X_{C'}$)到($X_{A''}$，$X_{B''}$，$X_{C''}$)之间特定垂直断面的成分变量(X_A, X_B, X_C)的关系为：

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

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

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

8.5.2 准二元与准三元相图

准二元相图以及准三元相图等通常被误解和误用。真实的准二元相图是三元系，其中一个组元具有固定的或度活化学势；真实的准三元相图是四元系，其中一个组元具有固定的或度活化学势。

准三元相图的典型例子是固定 C 活度下计算的四元系 Fe-Cr-Ni-C。条件可设定如下：

```
SET-REF-STATE C GRAPH , , , ,
SET-CONDITION T=1273, P=1e5, N=1, X(CR)=.1, X(NI=.1, ACR(C)=.02
```

在一些情况下，若有一相固定（并且其中改变相的成分），准二元断面中可改变活度。准二元断面的优点是，结线将处在相图的平面内，因此服从杠杆定律等。

当液态氧化物与液态 Fe 平衡时，Ca-Fe-O 中准二元断面可指定如下：

```
DEFINE-COMPONENTS CAO FE FEO
SET-CONDITION T=1850, P=1e5, N=1, X(CAO)=.1
CHANGE-STATUS FE-LIQ=FIX 0
```

同使用下列轴可完成绘图：

```
S-A-V 1 X(CAO) 0 1 .01
S-A-V 2 T 1500 2000 25
```

然而，问题是，在 1811 以下对纯 Fe 来说 FE-LIQ 不是稳定相。将必须计算以来于 Fe 的稳定修正的分开的断面。

Thermo-Calc Examples Book 中一个例子即例 17 给出计算准二元断面的一些提示。

8.5.4 更高阶相图

多元相图的灵活计算势 Thermo-Calc 软件的一个独有特性。尽管一些软件可计算多元系特殊断面，而 Thermo-Calc 是可计算成分空间任意二维断面的唯一软件。然而，关于这些图没有任何事情是特殊的，除了必须为每个组分添加更多的条件外可象二元相图一样简单地计算多元相图。可以任何方式组合活度条件、固定相状况和分数条件（(只要它们描述合法的平衡)。例如 15%Cr、5%Co、2%Mo、5%Ni、1%V、0.2%N，余为 Fe 的钢在 0-1.5%C 和 700-1500°C 下可计算如下：

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

8.5.5 性质图

仅使用一个独立的轴来计算这些类型的图。在 Thermo-Calc 软件中，通常用 STEP 命令来计算（见 8.4.2 “ Stepping calculation of proper ” 和 8.4.3 “ Solidification path simulations ” 中的信息）。

普通类型的性质图是所有成分固定仅温度改变的时候。在 POST 模块仲，可将多种不同量作为温度函数来绘图，例如，稳定相的量、特定相的成分或一组分的活度（整个体系中或特定相中）。

注意到优势图是通常以温度、pH、Eh 或主组元的成分作为轴变量之一的特定类型性质图，其中曲线将具有占优势的物种（通常依据活度来确定）的区域分开。

当进行了 MAP 计算或特定模块（BIN、TERN、POT 和 POURBAIX）计算时，整个体系的很多性质，稳定相、体系或特定相中的组分、特定相中的物种可用作轴变量来绘图。有时，这种图可能已经成为 “ 性质图 ”。然而，这些图必须被看成特定类型的相图，因为它们代表绘图的性质沿相边界的变化，即是仅有绘图变量中一个用作这样图的轴变量。

8.6 普通命令

8.6.1 HELP

描述：此命令列出可用到的命令或给出特定命令的解释。

提要 1：HELP <command name>

提要 2：HELP

接着提示：COMMAND <command name>

选项：command name – 要获得帮助的命令名（POLY 模块命令之一）。

注意：没有键入命令名而按<RETURN>键将列出所有 POLY 命令。

指定唯一的命令仅在屏幕上打印命令的解释（通常与用户指南中相同的文本）。

键入不唯一的命令缩写将列出所有匹配的命令。期望的命令信息可通过键入唯一的缩写或完整命令名来获得。

8.6.2 INFORMATION

描述：使用此命令能获得适合于大量主题的关于各种 POLY 主题的基本信息（概念与模型），就象本章的不同部分描述的一样。

提要：INFORMATION

随后提示：WHICH SUBJECT /PURPOSE/: <a subject and unique subject>

必须给出特定主题的名（或只要是唯一的给出其缩写，如 SIN、SIT、SOL、SPE、STATE、

STEP、SYM、SYS、SUB 等)。各种主题的广泛信息列出如下（只要键入问号“ ？ ”这个列表就可见到）：

PURPOSE	GETTING STARTED	USER INTERFACE
HELP	MACRO FACILITY	PRIVATE FILES
BASIC THERMODYNAMIC	SYSTEM AND PHASES	CONSTITUENTS AND SPECIES
SUBLATTICES	COMPONENTS	SITE AND MOLE FRACTIONS
COMPOSITION AND CONSTITUTION	CONCENTRATION	SYMBOLS
STATE VARIABLES	INTENSIVE VARIABLES	EXTENSIVE VARIABLES
PARTIAL DERIVATIVES	REFERENCE STATES	METASTABLE EQUILIBRIUM
CONDITIONS	SPECIES OPTIONS	AXIS-VARIABLES
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

描述：使用此命令在模块之间实现切换。所期望的模块名也必须键入。为了获得一组可以得到的模块，按<RETURN>见（键 5.4.11 节）。

提要 1：GOTO_MODULE <module name>

提要 2：GOTO_MODULE

接着提示：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 – 随后打开的模块名。

8.6.4 BACK

描述：此命令将控制切换回到最近的模块，参阅 GOTO_MODULE。从 POST 模块（后处理器）离开，BACK 仅进入（访问 POST 模块的）TAB 或 POLY 模块。

提要：BACK

8.6.5 SET_INTERACTIVE

描述：此命令重新设定输入与输出单位到其初始值，即键盘和屏幕。记住将此命令作为最后命令添加到宏文件。

提要：SET_INTERACTIVE

8.6.6 EXIT

描述：此命令终止程序并返回到操作系统。除非已经执行了 SAVE 命令（在 GES、POLY3 或 PARROT 模块），否则所有的数据和结果将丢失。

提要：EXIT

8.7 基本命令

8.7.1 SET_CONDITION

描述：这是为计算指定平衡条件的主命令。

提要 1：SET_CONDITION <conditio(s)>

每个条件必须明确给定，但可在同一行给处，或以分开行给出，每行以命令开始。见 8.3.5 节中描述的条件细节，更多的描述如下：

例子：

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

SET_COND ACR(N)=.2

此例中，用户将温度设定为 1273K，压力为 1bar（1E5 帕斯卡），C 的质量（重量）分数为 0.001 和 Cr 的质量（重量）分数为 0.22 以及 N 的活度为 0.2。

提要 2：SET_CONDITION

接着提示：State variable expression:<state variable name or linear expression>

这个问题是相当含糊的，而用户期望只给出状态变量或状态变量的现行表达式。

一些状态变量可用在用在条件中的是：

T	体系中的温度
P	体系中的压力
W(<component>)	体系中组分的摩尔分数
X(<component>)	体系中组分的摩尔分数
ACR(<component>)	体系中组分的活度
MUR(<component>)	体系中组分的化学势
W(<PHASE>, <component>)	一相中组分的摩尔分数
X(<PHASE>, <component>)	一相中组分的摩尔分数
ACR(<PHASE>, <component>)	一相中组分的活度
MUR(<PHASE>, <component>)	一相中组分的化学势
H	体系中的焓
HM(<PHASE>)	一相中（每摩尔）的焓

有多个状态变量能用于条件仲。为得到更多的信息，给出 INFO STATE_VARIABLES 命令。

条件通常仅是有值单个状态变量的值。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

条件也可以是包含多于一个状态变量的现行表达式的值，如

X(LIU, S)-X(PYRR, S)=0

这意味着它是一个条件，即 LIQUID 与 PYRRHOTITE(磁黄铁矿)相中 S 的摩尔分数是相同的。实际上应是适合的熔点。注意，表达式中等号之后只允许一个数值。

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

这个问题更含糊，它意味着拥护不回答以前的问题。程序正执行单个状态变量或一个完整状态变量表达式，或具有一个状态变量中表达式中数值系数。在状态变量表达式中状态变量可用常系数来优先。例子是：

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

这意味着两倍的 FE 化学势加上三倍的 O 的化学势应为-35000J/mol 是一个条件。

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

若在提示“ State variable expression ”或“ Factor ”没有给出单个状态变量名，或已经给出状态变量表达式但表达式不完整如“ T- ”或“ 2*MUR(FE)+ ”，程序期望继续未完成的表达式，将提示这个问题。这里用户需要指定一状态变量或完整状态变量表达式，或完成未结束的状态变量表达式。若数值系数在提示之前给出，可指定仅一个状态变量。否则，程序将只取第一个状态变量来完成表达式（即状态函数的系数倍数。

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

条件值。可以是数字值、常数或变量。作为缺省值给出建议。特定值 NONE 意味着删除条件。

8.7.2 RESET_CONDITION

描述：此命令不存在（！），而用新的值再次使用 RESET_CONDITION 命令来重新设置条件。一组条件用值 NONE 来取消。

提要 1：SET_CONDITION <condition>=<new value>

提要 2：SET_CONDITION <condition>=NONE

例子：SET_CONDITION T=1673.15

这将重新设定 T 为 1673.15K。

SET_COND T=NONE

这将取消 T 上的条件。

更多：通过给出如下命令可能取消所有的条件：

SRT_CONDITION *=none

8.7.3 LIST_CONDITIONS

描述：在屏幕上列出通过命令 SRT_CONDITION 和命令序列 CHANGE_STATUS PHASE …=FIX 0 or1 设定的所有条件。

用命令 LIST_EQUILIBRIUM 列出当前条件，也给定自由度。若自由度为零，可执行 COMPUTE_EQUILIBRIUM 命令。若自由度大于零，必须设定一些条件。若自由度为负值，此时有过多的条件。

提要：LIST_CONDITIONS

举例输出：P=100000, T=800, N(NI)=1E-1, N=1

FIXED PHASES

FCC_Al=1 LIQUID=0

DEGREE OF FREEDOM 0

8.7.4 COMPUTE_EQUILIBRIUM

描述：对给定的一组条件计算平衡。迭代数和 CPU 时间在命令结束后列出。

提要 1：COMPUTE_EQUILIBRIUM

提要 1：COMPUTE_EQUILIBRIUM *

注意：不稳定的相在此命令之后可能没有其最有利的成分，因此其驱动力可能不正确。通过简单地给出重复的 C_E 命令直到迭代数为 2，可施加程序来正确计算介稳相的驱动力，也参见 POLY 命令 SET_NUMERICAL_LIST（8.11.11 节），该命令可在当前 TC 运行中在所有并发的 PLOY 计算中设定“ Approximate driving force for metastable phases ”选项（Y 轴）。

若收敛有任何问题，可尝试非常有力的 C_E * 命令序列。字符*将迫使命令使用更坚固的技术来获得复杂平衡。然而，值得注意的是，在成功 C_E * 计算之后，可选择相/物种/组分的状况（使用 LIST_STATUS CPS 命令序列）与平衡条件（使用 LIST_CONDITION 命令），因为这个动作可告诉如何进一步修正当前计算的各种设置。C_E * 命令序列已经进一步改进了。

在 TCC 版本 P 中，若在用 C_E 命令或 C_E * 命令序列进行的一般平衡计算的任何阶段时在寻找稳定固溶体有任何收敛问题（除了已经切换到特定选项 NEVER_ADJUST_MINIMUM_Y 的情况之外），则在屏幕上将出现下列消息：

Convergence problems, increasing smallest site-fraction from 1.00E-30 to hardware precision 2.00E-14. You can restore using SET-NUMERICAL-LIMITS

暗示着当前 POLY3 工作区中最小的位置分数已经自动从缺省的 1.00E-30 增加到依赖硬盘的精度（PC Linux，为 2.00E-14）。对于当前 TC 运行中其它后来的 POLY 模块计算，可使用 POLY 命令 SET_NUMERRICAL_LIMITS 来恢复或重新设定最小位置分数到以前的或其它优选的值，以及重新设定其它数值极限（见 SET_NUMERRICAL_LIMITS 命令上 8.11.11 节）。

若没有找到平衡，给出出错消息。在这种情况下，对开始变量和开始值、对某些相的开始构成和对某些组分的参考态，可试着重复几次 C-E 命令，或改变数值极限的一些设定，或核实一些定义的条件，此前参考 8.13 节（Trouble shooting）.

8.7.5 LIST_EQUILIBRIUM

描述：来自最后计算平衡的结果在屏幕上或在文本文件中列出。注意若没有进行计算或计算失败也可执行这个命令。解释结果是用户的责任。

提要 1：LIST_EQUILIBRIUM <Return or file name> <option(s)>

提要 2：LIST_EQUILIBRIUM

接着提示：OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/: <file name>

将写出列出计算结果的文本文件名。缺省为 SCREEN（仅在终端线时）

Options /VWCS/: <option(s)>

用户可有可选地指定下列字母的组合选择输出单位与格式：

Fraction order:	V 意思是 VALUE ORDER
	A 意思是 ALPHABETICAL ORDER
Fraction type:	W 意思是 MASS FRACTION
	X 意思是 MOLE FRACTION
Composition:	C 意思仅是 COMPOSITION
	N 意思是 CONSTITUTION 和 COMPOSITION
Phase:	S 意思是仅包括 STABLE PHASE
	P 意思是包括 ALL NON-SUSPENDED PHASES

缺省是 VWCS。若以摩尔分数输出，给出 VXCS 或仅给出 X。

8.7.6 DEFINE_MATERIAL

描述：此命令使体系从 PLOY 模块中的数据库读取数据成为可能。当存在主组分和其它元素的量（质量

（重量）百分数）已知时合金中使用此命令是方便的。此命令将从特定数据库中读取体系、设定成分和温度（压力等于 1bar）并在相用户提示新命令之前计算平衡。用户可用 LIST_EQUILIBRIUM 命令列出结果或设定新的成分或为 STEP 或 MAP 命令设定轴。

以前，总是从 TBD 模块返回数据，这仍是推荐的命令。Thermo-Calc 的非经常用户的增加，除了并行开发各种 Windows 界面之外，有必要通过程序提供简单的方法。注意，可以这种方法从不同数据库悬挂数据。一种方法也为 USER 数据库使用它。

提要：DEFINE_MATERIAL

接着提示：Same elements as before /Y/? <Y or N>

只有当用户已经从数据库中读取数据或以前使用了命令 DEFINE_MATERIAL 或 DEFINE_DIAGRAM 才问这个问题。提供一种方便的方法来用一个命令改变成分和温度。

注意，DEFINE_MATERIAL 命令只有在材料体系的成分已经定义为摩尔百分数或质量百分数时才能完全工作。

Mole percent of <element> /##/: <value>

或

Mass percent of <element> /##/: <value>

若用户已经决定通过接受缺省回答（Y）为以前提示“ Same elements as before /Y/? ”的响应而使用相同材料体系（当前 POLY3 工作空间可以得到），对定义的体系中每个组分，上面给出的两个提示之一将出现，取决于以前如何定义成分（或以摩尔百分数或者以质量百分数）。

这种提示将重复直到所有定义的组分全部全部通过。然后，程序将提示指定温度条件。

……

Database /ABCDE/: <database name>

必须给出带有材料描述的数据库，若使用当前数据库仅须按<RETURN>。可能给出 USER 数据库。

Major element or alloy: <element name>

材料必须有“ 主 ”元素，通常为以最大量出现的元素。该元素的分数将不设定而是为“ 其余 ”。

在一些数据库仲，有预先定义的“ 合金 ”。合金有缺省的主元素和合金元素量的极限。若用户停留在这个极限范围内，计算给出合理结果。

Composition in mass (weight) percent? /Y/: <Y or N>

缺省设置为输入取质量百分数，而对这个问题回答 N（N）来改变摩尔分数是可能的。

注意，应在 PERCENT 不是在 FRACTION

中给出成分，在 SET_CONDITION 中命令要求 W 和 X 状态命令。

1st alloying element: <element name>

必须给出第一个合金元素。

依次提问所有合金元素，可用任何顺序给出它们。用户必须知道数据库中它们是否作为评定过的体系。如数据丢失，没有出错或警告消息。请在选定的数据库文件中选仲。

若选择一种合金，将在线列出一组合法的合金元素与其最大百分数。

Mass (weight) percent: <amount of the specified element>

以质量（重量）百分数表示的合金元素的量。使用 DEFINE_MATERIAL 命令则不能利用条件的 Thermo-Calc 正常灵活性，而所有合金元素必须用质量百分数给定。然而之后可使用 SET_CONDITION 命令改变条件。

2nd alloying element: <element name>

必须给出第二个合金元素。若仅有一种合金元素，仅按<RETURN>即可。若给出元素名，

则程序接着询问其质量（重量）分数。

Mass (weight) percent: <amount of the specified element>

以质量（重量）百分数表示的上述特定合金元素的量。

Next alloying element: <element name>

用户继续给出元素与质量（重量）分数，直到指定所有元素。

当已经指定所有合金元素与其成分（象以上提示），仅按<RETURN>作为对这个问题的回答来完成材料定义。

……

Temperature (C) /1000/: <Temperature of interest in °C>

为此温度返回数据后 POLY 将进行第一次计算。按<RETURN>接受缺省温度。以°C 给出值。

注意：在此命令中压力设定为 1bar。

Reject phase(s) /NONE/:<list of phase(s) to be rejected>

这是由数据库允许用户选择相而产生的问题。通常，应包含所有相同时使用户仅需按<RETURN>。

若拒绝一相，则必须提供相的名。一行中可指定几个相的名。

给出一个星号“＊”则可能拒绝所有的相。若所包括的相的数目元小于相的总数，可方便地先拒绝所有的响，然后仅恢复要包含的那些相。

注意：这个问题将不断重复知道拒绝所有不希望以后或星号“＊”以后按<RETURN>。

Restore phase(s) /NONE/: <list of phase(s) to be restored>

用户可恢复偶然或故意拒绝的相。也可能恢复一些“隐藏的”相。

若要恢复相，必须提供相的名称。一行中可指定几个相的名称。

给出一个星号“＊”可恢复所有的响。

注意：这个问题将不断重复知道恢复所有期望的相以后按<RETURN>。

OK? /Y/: <Y or N>

列出要从数据库种选择的所有相，同时用户必须确认所进行的选择。若已经产生一些错误或要该正所进行的选择，可回答 N（不）并将回到关于拒绝相的问题。

若通过回答 Y（是）来确认所进行的选择，软件将从数据库返回所有热力学数据和可以得到的参考。

Should any phase have a miscibility gap check? /N/: <Y or N>

数据库通常为具有溶解度的相创建两个或更多“成分组”。然而，对于一些相不能自动完成（创建成分组），例如，通常忽略 Fe-Cr 中 bcc 相的溶解度。但是，若包括富 Cr 的 bcc 相不重要，用户应在这里指定。它将耗费一些计算时间并使后续的 MAP 或 STEP 更难于收敛。

若用户不想计算中有任何这样具有溶解度的相，仅按<RETURN>即可。然后，DEFINE_MATERIAL 命令将开始计算并终止这个命令。

若用户要在计算中设定这样的具有溶解度的响，应回答 Y（是），接着软件将提问一些关于相名称与其组成的问题，如下：

Phase with miscibility gap: <phase name>

用户必须提供相名，该相在特定体系和条件下具有溶解度。

Major constituent(s) for sublattice #:/AA/: <constituent(s)>

软件将依据所选数据库中存在的相定义显示亚点阵#(1, 2, 3, …)中缺省的组分。用户可为相中亚点阵#指定一个或多个主要组分。

将不断重复这个问题直到全部指定所有亚点阵。

Phase with miscibility gap: <phase name>

用户可提供特定体系与条件下具有溶解度的其它相名，并回答涉及相关亚点阵中主要组分

的问题。

按<RETURN>，DEFINE_MATERIAL 命令将开始计算平衡并终止这个命令。

……

注意：从 TCC 版本 M 起。使用这个命令从数据库（如 TCNI Ni 基超合金数据库）中选择“合金”是可能的。数据库用 OPTION 键预先定义合金，并有其缺省主元素和合金元素的成分极限（详细情况见 6.3.16 节）。

若在提示“Major element or alloy: ”上键入“？”号，则可在屏幕上列出（在提示“Database /ABCDE/: ”处）所选数据库中这样的合金。当选择了特定预定义合金（而不是主元素），将从合金定义中指派主元素并在屏幕上显示（用如“Alloy found with major element NI”）。

仅允许用户指定合金元素与其成分（重量百分数或摩尔百分数）。在任何提示下为合金元素名键入“？”，如“1st alloying element: ”，“2nd alloying element: ”，将列出合金中所有合金元素与其成分极限。

若合金元素的成分超出其极限，将有警告消息（象“Amount above limit: 30.0000”）和提示“Override limit? /N/: ”。若用户在此提示（如“Amount of major element below limit: 70.0000”）和提示“Override limit ? ?N?: ”下通过回答 Y（是）决定施加超量。接着用户可决定是否施加过量：若为 Y（是）则接受极限以下的主元素的成分；若为 N（不）则使用预先定义的主元素成分极限。

“alloy OPTION”特性的目的是为缺乏经验的用户提供一套保险。目前，在 Thermo-Calc 内不无选项，选定的一组成分条件处在数据库的适用成分极限内。有经验的用户还可使用没有保险特性的旧命令。

8.7.6 DEFINE_DIAGRAM

描述：此命令是 DEFINE_MATERIAL 命令的扩展，并从 TCC 版本 M 起可以得到。允许用单个命令自动计算和绘图。它对第一次计算的平衡点时与 DEFINE_MATERIAL 完全相同。因此，“alloy OPTION”特性（见 8.7.5 节）对在选定数据库中按 OPTION 键预先定义的特定合金的指定合金成分来说，此命令中也有“alloy OPTION”特性（见 8.7.5 节）。

可使用此命令在指定所有成分值和初始温度（若使用温度轴）来计算所有类型相图。然而，对二元和三元相图，可优先指定 BIN 和 TERN 模块。

用此命令将列出定义体系的所有独立变量（如温度和成分）并提问 X 轴变量。第二个轴（Y 轴）为从独立表量列表中的另一个成分（若温度不是 X 轴可选温度）。程序接着将计算并绘制相图，其中有两个成分轴。

另外，用户可从屏幕第二个列表中选择非独立的量作为 Y 轴（如所有相的量、指定相的成分或所有相中一组分的分数），同时程序将计算并绘制这个量如何依赖于 X 轴上的条件的徒刑。此图称性质图。

此命令将在 POST 模块监控中结束。可细化计算的相图或性质图到所期望的那样。

而且，也使用后续的 POST 监控中正常的 SET_AXIS_VARIABLE 命令可绘制具有非成分轴性质图。

提要：DEFINE_DIAGRAM

接着提示：Same elements as before /Y/ <Y or N>

Mole percent of <element> /##/: <value>

或

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>
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 rejected>
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>
……

⇒ 这里将计算第一个平衡，利用的是 DEFINE_MATERIALS 命令。

⇒ 接着程序给出适于选作 X/Y 轴变量的所有独立条件的列表。

Give the number of the condition to vary /1/:<a condition number>

通过给出数字选定其中一个作为 X 轴变量。

Minimun value /XXX/: <minimun value for X-axis>

指定所选 X 轴变量的最小值。程序自动显示缺升值，按<RETURN>接受它或输入其它值。

Maximum value /YYY/: <maximum value for X-axis>

指定所选 X 轴变量的最大值。程序自动显示缺升值，按<RETURN>接受它或输入其它值。

⇒ 接着程序给出具有一些非独立量的另一个列表，可选作 Y 轴变量。

Give the number of the quantity on the second axia /#/: :<##>

（通过简单地给出来子第一个或第二个列表中的相应的数字）选择其一，同时计算性质图。若选择“相的成分”，随后将询问相名。

若在第一个列表中选择任何其它独立变量作为 Y 轴，则将计算相图。

Save file /RESULT/: <file name>

存储计算的文件名（保存为*.POLY3 文件），缺省的文件名为 RESULT.POLY3（在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下）或 RESULT.poly3（在 UMIX 和 Linux 环境下）。

8.8 保存和读取 POLY 数据结构的命令

8.8.1 SAVE_WORKSPACES

描述：Thermo-Calc 具有允许保存程序的当前状态或工作区的唯一特性，包括热力学数据、条件、选项和来自*.POLY3 文件的单个 stepping 或 mapping 计算的结果。用户用这样做是为了以后使用或因为任何元因而必须终止一个对话。

POLY3 和 GES5 工作区保存在具有此命令的文件仲。在 GES5 工作区，存储所有热力学数据。在 POLY3 工作区存储所有热力学数据、所有最后一组条件、改变的状态、输入的符号、特定选项等，因此也包含 GES5 工作区。SAVE 命令之后，当简单地给出 READ 命令而发出 SAVE 命令时用户总是准确回到以前的状态。

在文件中保存 POLY3 和 GES5 工作区之后，可离开程序，以后 READ 文件并从保存状态继续。要注意，STEP 或 MAP 命令自动保存在具有最近指定名称的工作文件中。在 STEP 或 MAP 之后不需要 SAVE。

SAVE 破坏来自 STEP 或 MAP 命令的结果。可用 STEP 或 MAP 悬挂几个结果而不破坏以前的结果，而 SAVE 将全部擦掉它们。要悬挂一些 STEP 或 MAP 结果，使用 AMEND 命令。

提示 1：SAVE_WORKSPACES <file name> <Y or N>

选项：file name – 必须指定用户期望的文件名。POLY 工作区文件的缺省扩展名为“ *.POLY3 ”(在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境）或“ *.poly3 ”（在 UNIX 和 Linux 环境），而用户可有所期望的任何扩展名。

提要 2：SAVE_WORKSPASCES

接着提示：File name /RESULT/: <file name>

通过按<RETURN>，可将 POLY3 和 GES5 工作区用缺省扩展名为“ *.POLY3 ”（在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境）或“ *.poly3 ”（在 UNIX 和 Linux 环境）保存到缺省名 RESULT 下的文件上。

或者用户可指定一个希望的文件名，其缺省扩展名为“ *.POLY3 ”或“ *.poly3 ”，而用户也可有其它期望的扩展名

Overwrite current file content /N/: <Y or N>

（在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境）

或

Proceed with save /N/: <Y or N>

（在 UNIX 和 Linux 环境）

只有既有同名文件时才提问，同时以下消息出现在屏幕上

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 command.

若回答 Y，以前内容将被覆盖。注意到来做 STEP 或 Map 命令的结果被 SAVE 所破坏。可不破坏以前结果的前提下 MAP 或 STEP 可悬挂几个结果，而 SAVE 将刷新所有以前结果。要悬挂几个 MAP 或 STEP 结果，则使用 AMEND 命令。

若回答 N，不保存任何东西，以前的内容将不被重写。可以后使用带有未指定名的 SAVE 命令来保存 POLY3 和 GES5 工作区。

注意：在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下，若命令之后没有给出文件名，屏幕上将弹出 Save as 窗口，以便适当指定路径（在 **Save in** 框中）和文件名（在 **File name** 框中），如图 8-4 所示。可不改变文件的类型（即在 Save as type 框中的 POLY3）。按 **Save** 钮，程序在特定的*.POLY3 文件中保存 POLY3 和 GES5 工作区。用户也可取消 Save as 窗口对话，因此不保存当前 POLY3 和 GES5 工作区。

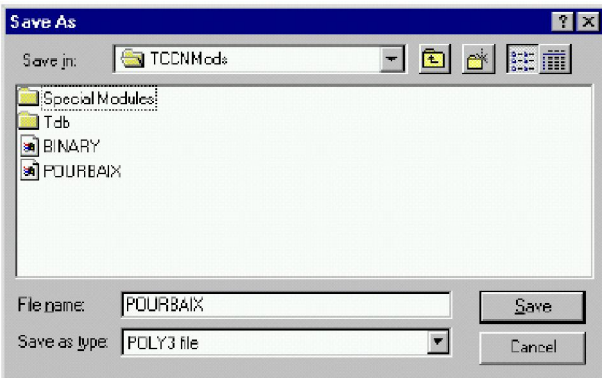


图 8-4 “ 另存为 ”窗口：将 POLY3 和 GES5 工作区保存为*.POLY3 文件

然而，若在目录下（由 **Save as** 框显示）已有同名文件，屏幕将弹出警告消息，如图 8-5 所示若点击 **No** 钮，程序返回到 **Save as** 窗口，以

图 8-5 警告消息：若将 POLY3/GES5 工作区保存在以存在的*.POLY3 文件

便用户可选择其它 **Save in** 路径或不同 **File name**。若点击 **Yes** 钮，程序接着将询问“ Overwrite current file name /N/: ”，以便用户决定是否在以存在的*.POLY3 文件上重写当前的 POLY3/GES5 工作区。

在 UNIX 和 Linux 环境下按<RETURN>，可将 POLY3 和 GES5 工作区保存在具有*.poly3 缺省扩展名下的文件中（若第一次使用 Save 命令），或保存在以前用的具有缺省扩展名“ *.poly3 ”特定文件名中（SAVE 命令已经至少使用过一次）

8.8.2 READ_WORKSPACES

描述：POLY3 和 GES5 工作区与来自 MAP 和 STEP 命令的计算结果可从必须用 SAVE_WORKSPACES 命令已经保存的文件中 READ。这样的 POLY3 文件是不可打印的。

提要 1：READ_WORKSPACES <file name>

选项：file name – 必须指定从中读取 POLY3 和 GES5 工作区的以前保存的 POLY3 文件名。若由缺省的“ *. POLY3 ”（在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下）或“ *.poly3 ”（在 UNIX 和 Linux 环境）用户不需要键入扩展名，否则用户必须键入完整的 POLY 文件名。

提要 1：READ_WORKSPACES

接着提示：File name /ABCDEF/: < file name >

程序将“ ABCDEF ”显示为最近指定的 POLY3 名或者运行中没有保存工作区则显示为“ RESULT ”。按<RERURN>或键入特定文件名，可从文件中读取 POLY3 和 GES5 工作区。

注意：在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下，若命令之后没有给出文件名或路径不正确则屏幕上将弹出 **Open file** 窗口，以便可以适当指定路径（在 **Look in** 框）与文件名（在 **File name** 框），如图 8-6 所示。可不改变文件类型（即在 File of type 框中所示的 POLY3）。按 Open 钮，程序从特定的以前保存的*. POLY3 文件中继续打开 POLY3 和 GES5 工作区。用户也可取消这个 **Open file** 窗口对话，因此不打开以前保存过的 POLY3 和 GES5 工作区。

图 8-6 “ 打开文件 ”窗口：从*.POLY3 文件中读取 POLY5/ GES5 工作区

8.9 计算与绘图命令

8.9.1 SET_AXIS_VARIABLE

描述：为了计算相图，必须至少设定一个轴。对性质图，一个轴就足够了，对于相图必须两个或更多轴。能设定要计算的任何条件可使用 SET_AXIS_VARIABLE 命令设定为轴变量（具有最小和最大极限和步长），在 STEP 或 MAP 命令之后，程序将在轴上设定的极限之间改变条件值。

在轴变量上以前没有设定条件可给出 SET_AXIS_VARIABLE 命令，将自动创建条件并在最小和最大轴极限值建设定值。作为次要作用，若用户设定已不是条件的轴变量，POLY 将创建两个条件 P=1e5 和 N=1。

计算过程中可使用对数轴，这对象在气相中感兴趣的范围 1e-7 到 1e-2 的小分数示有用的。压力液使用对数步长。增量值之后给出一个*来指定对数轴。注意到此种情况下增量处理为一个系书，如：

S-A-V 1 P 1E5 1E25 5*

将使轴 1 为对数轴，其中两个计算值之间的差值最大是一个因数 5。注意到因数必须大于 1.0。

注意到在某些情况下，如当使用了 DEFINE_DIAGRAM 命令或访问了特定先进模块（如 BIN、TERN、POT 或 POURBAIX），程序将自动设定一些轴变量，不必要使用此命令。

提要 1：SET_AXIS_VARIABLE <axis number> <condition> <min> <max> <length>

提要 1：SET_AXIS_VARIABLE

接着提示：Axis number /#/: <an axis number>

指定 1 与 5 之间的一个数，轴数 3、4 和 5 必须用势作为条件。

Condition /NONE/: <one condition>

这里必须给出沿轴变化的条件。在 SET_CONDITION 命令指定条件，例如 W©为碳的质量分数。接受 NONE，取消轴。

Min value /0/: <min value>

指定轴条件的最小值。

Max value /1/: <max value>

指定轴条件的最大值。

Increment /.025/: <step length>

8.9.2 LIST_AXIS_VARIABLE

描述：用此命令列出已经用 SET_AXIS_VARIABLE 命令设定的所有轴。

提要：LIST_AXIS_VARIABLE

将显示在当前 POLY3 工作区已经设定的所有轴变量，如：

Axis No 1: W(C)	Min: 0.001	Max: 0.010	Inc: 0.001
Axis No 2 T	Min: 1073.15	Max: 2073.15	Inc: 25

8.9.3 MAP

描述：此命令从一个或多个平衡中绘制相图。注意相图由相量为零的线组成。用此命令产生所有不同类型的相图。

提要：MAP

注意：在绘图（MAP）计算过程中，将列出个计算的平衡绘图轴变量的值同时显示一组稳定相。从 TCC 版本 N 起，已经去除了计算的平衡的过长输出，然而，若用 SPECIAL_OPTION 命令切换（见 8.11.16 节）新的特定选项可设定顺着列表再次的往回。

用户通过按单个 CTRL-A（在 PC Windows 上）或 CTRL-C（在 UNIX 或 PC LINUX 上）可终止线的绘制。这对不丢失已经计算的结果而停止略长的计算势有用的。

在 TCC 版本 P 中，在用 MAP 命令施加的计算程序过程中的任何阶段寻找稳定溶体时若有收敛问题（除了已经切换到特定选相 NEVER_ADJUST_MINIMUN_Y），屏幕上将出现如下消息：

Convergence problems, increasing smallest site-fraction from 1.00E-30 to hardware precision 2.00E-14. You can restore using SET-NUMERRICAL-LIMITS

暗示着在当前 POLY3 工作区最小位置分数已经自动从缺省的 1.00E-30 增加到依赖于硬盘精度（在 PC Linux 中为 2.00E-14）。对于当前运算中的其它后续 POLY 模块计算，可使用 POLY 命令 SET_NUMERICAL_LIMITS 来存储或重新安排最小位置分数为以前的或其它优选值，以及重新安排其它数值极限（见 8.11.11 节的 SET_NUMERICAL_LIMITS 命令）。

在所有新的版本中 MAP 命令计算相图中过程已经不断改进，在未来的版本中将继续改进！

特别地，具有平面内联线的相图即大多数二元系或三元等温界面，现有特定的 MAP 程序，选中最好相来利用轴变量，以便确保连线之间合理的增量。这给出更平滑曲线，同时在寻找近邻取中也给出更好稳定性。

若一相有两个或更多成分序列在 mapping 过程重将发现溶解度。

8.9.4 STEP_WITH_OPTIONS

描述：此命令初始化 stepping 程序，启动之前必须已经计算了平衡并给出 SET_AXIS_VARIABLE 命令。程序将为每个计算的平衡列出轴变量的当前值和稳定相组变化的时间。对 STEP 命令有六个选项，为：

Ø NORMAL　　意思是仅改变轴变量

Ø INITIAL_EQUILIBRIUM 意思是每个计算的平衡都将存储出时平衡（还没有执行）。

Ø EVALUATE 意思是可改变其它条件的每步之后都评价给出的变量。

Ø SEPARATE_PHASES 意思是每步分开计算每个输入的相。

Ø T-ZERO 意思是将沿成分变量（设定为 stepping 变量）计算扩散转变（两个特定部分平衡相有相同 Gibbs 能）中 T_0(T-zero)线。从 TCC 版本 P 其可以这样做。

Ø PARAEQUILIBRIUM 意思是部分无分配转变中[对间隙组元，两个部分平衡相有相同的化学势（但不同含量）]，仲平衡状态沿变化的温度或沿成分变量（置换组分或基体的）来计算。从 TCC 版本 P 其可以这样做。

注意到，通过按单个 CTRL-A（在 PC Windows 上）或 CTRL-C（在 UNIX 或 PC LINUX 上）可终止控制方式中的 stepping。

提要 1：STEP_WITH_OPTIONS <a chosen option, N or I or E or S or T or P>

提要 1：STEP_WITH_OPTIONS

接着提示：Option? /NORMAL/: <a chosen option, N or I or E or S or T or P>

必须选择以下四个选项之一：

NORMAL 给定条件步进

INITIAL_EQUILIBRIUM 每步存储初始平衡

这还没有执行。已经打算产生计算平衡的“矩阵”。因此可使用一个轴变量如温度，并给出 STEP_INITIAL 命令。这将计算大量平衡并自动添加（ADD）每个平衡作为 STEP_NORMAL 或 MAP 命令的初始平衡。第二个 STEP 命令之前，可选择成分作为轴变量，同时 STEP 命令接着将使用不同温度的开始点并进行成分步进，这将给出值的“矩阵”。实际上可更深层地进行。

EVALUATE 评价每步之后指定的变量

这个命令为 Thermo-Calc 专家级的高级命令，允许单轴步进，每步之后同时评价一个或多个变量。变量可象条件一样使用，意味着在步进过程中可改变条件。使用这个命令的例子在关于 SOLIDIFICATION（凝固路径计算）的 INFORMATION 命令描述。

用这个选项，需要指定如下提示：

Variable name(s): <variable name>

这里必须键入每步之后将评价的变量名。

一些早期版本的 STEP 计算过程中，用于计算各种性质图和相分数绘图等，特别是当要出现新相时，将出现各种问题。这些问题已经使用收敛的一般改进而简化，但附加固定数已加倒 STEP 命令中来处理问题。若项有两个或更多成分序列则在 stepping 过程中自动使用溶解度测试。

溶解度测试意味着钢从高温开始计算，其中 MC 碳化物不是稳定的，在 STEP 命令过程中 MC 碳化物虽成分不同从金属性的 fcc 变成介稳的，后来也是稳定的。以前的这种计算必须从低温进行。

SEPARATE_PHASES 分开计算每个相

当用户要绘制给定温度的 Gm 对成分曲线时使用这个选项。

T-ZERO 两个计算的特定相之间的 T_0 线

从 TCC 版本 P 起有这个新的选项，允许沿成分变量计算无扩散相变中 T_0（T-ZERO）线（两个特定部分平衡相有相同 Gibbs 能），该成分变量用 SET_AXIS_VARIABLE 命令设定为步进变量。注意，如要进行 STEP T-ZERO 计算温度条件不能设定为步进变量。

为确保当前体系中初始化平衡计算之后成功计算两个特定相之间的 T_0 线，推荐在进行 STEP_WITH_OPTION T-ZERO 命令序列之前使用 SPECIAL_OPTION T-ZERO 命令序列进

行单个 T_0 点计算，尽管对一些体系这样做并不总是必要的。

使用这个选项，需要指定下列提示：

Name of first phase: <phase A>

Name of second phase: <phase B>

T_0 线上 Gibbs 能彼此相等的两个目标相的名称必须在上述两个相继的提示中键入。

在 STEP T-ZERO 计算过程中，计算的 T_0 值在（步进成分变量的）相应浏览条件之后显示，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
```

成功 STEP T-ZERO 计算后，可进入 POST 模块绘制 T_0 线对步进成分变量或其它变化轴的图，或将计算的 T_0 线加到正常的 T-X 相图上，见 Thermo-Calc Examples Book 中的例 23 和例 41。

PARAEQUILIBRIUM　　两个计算的特定相之间仲平衡状态

从 TCC 版本 P 起有这个新的选项，允许沿变温或沿（基体和间隙组分）成分变量计算部分无分配转变中仲平衡状态（两个部分平衡相其间隙组元化学时相等），该成分变量用 SET_AXIS_VARIABLE 命令设定为步进变量。注意，目前这个选项只对以 C 为间隙相的体系起作用，同时还有如要进行 STEP PARAEQUILIBRIUM 计算间隙组元的成分条件不能设定为步进变量。

为确保当前体系中整个成分初始平衡计算之后的两个特定相之间仲平衡状态的成功计算，推荐在进行 STEP_WITH_OPTION PARAEQUILIBRIUM 命令序列之前使用 SPECIAL_OPTION PARAEQUILIBRIUM 命令序列进行单个仲平衡计算，尽管对一些体系这样做并不总是必要的。

用这个选项，下列提示需要指定：

Name of first phase : <phase A>

Name of second phase : <phase B>

之间建立仲平衡状态两个目标相的名称必须在上述两个相继的提示中键入。

在 STEP PARAEQUILIBRIUM 计算过程中，在（步进成分变量的）相应浏览条件之后显示计算的仲平衡状态，包括以摩尔百分数表使的相 A 和 B 以及间隙组分在以 u 分数 [u(phase, C)]表示的相 A 和 B 的含量，如：

```
Interstitial component assumed to be C with U(C)- 1.0101010E-02
```

Output during stepping is:
Phase Rergion from 8.000000E+02 for:
BCC_A2
FCC_A1

8.000000E+02	0.747	0.253	6.717331E-03	2.433036E-05
7.925000E+02	0.451	0.549	1.109567E-02	3.886513E-05
……				
7.550000E+02	0.150	0.850	3.302296E-02	9.679912E-05
7.475000E+02	0.132	0.868	3.739408E-02	1.055071E-04

成功 STEP PARAEQUILIBRIUM 计算之后，可进入 POST 模块绘制仲平衡相图，或将计算的仲平衡状态加到正常的相图中，见 Thermo-Calc Examples Book 中的例 23 和例 42。

注意：在 STEP 计算过程中，将列出每个计算平衡的步进轴变量的值和稳定相序列。从 TCC 版本 N 起，已经去除了过长的计算平衡输出，然而，若用 SPECIAL_OPTION 命令来切换则再次沿列表后面设定新的特定选项“ OUTPUT_AT_MAP_AND_STEP ”。

用户通过按单个 CTRL-A（在 PC Windows 上）或 CTRL-C（在 UNIX 或 PC LINUX 上）可终止线的绘制。这对不丢失已经计算的结果而停止略长的计算势有用的。

在 TCC 版本 P 中，在用 STEP_WITH_OPTION 命令序列施加的计算过程中的任何阶段寻找稳定溶体时若有收敛问题（除了已经切换到特定选相 NEVER_ADJUST_MINIMUN_Y），屏幕上将出现如下消息：

Convergence problems, increasing smallest site-fraction from 1.00E-30 to hardware precision 2.00E-14. You can restore using SET-NUMERRICAL-LIMITS

暗示着在当前 POLY3 工作区最小位置分数已经自动从缺省的 1.00E-30 增加到依赖于硬盘精度（在 PC Linux 中为 2.00E-14）。对于当前 PC 运算中的其它后续 POLY 模块计算，可使用 POLY 命令 SET_NUMERICAL_LIMITS 来存储或重新安排最小位置分数为以前的或其它优选值，以及重新安排其它数值极限（见 8.11.11 节的 SET_NUMERICAL_LIMITS 命令）。

在所有新的版本中性质图的 STEP 计算已经不断改进，在未来的版本中将继续改进！

8.9.5 ADD_INITIAL_EQUILIBRIUM

描述：此命令用于添加起始平衡点，从中绘制相图。对 STEP 命令不需要此命令。在多种情况下，ADD_INITIAL_EQUILIBRIUM 对 MAP 命令也不需要，因为绘图将从当前平衡开始。为了计算简单相图，用户仅设定条件和轴，并给出 MAP 命令。但是若相图有断开的线，还需要 ADD 命令来添加量各或更多平衡，所以 MAP 计算将从这个特定方向上的初始平衡开始，寻找所有相边界线。

提要 1：ADD_INITIAL_EQUILIBRIUM <direction code>

提要 2：ADD_INITIAL_EQUILIBRIUM

接着提示：Direction /default/: <direction code>

当起始平衡点处在单相区时或相图为等值线（连线不在计算的平面内）时方向是重要的。在此情况下，程序将在给定方向搜索相图中的线（即相数量为零的线）。

选项：direction code(s): 1 或 2　　分别为轴 1 或 2 的正方向。
-1 或-2　　分别为轴 1 或 2 的负方向。
Default　　所有的方向。

注意：从 TCC 版本 M 起，以新的方式处理缺省的方向。带有缺省方向的 ADD 命令将沿轴变量扫描，每次程序穿过相界都产生开始点。此外，若有没有到达轴的固溶度线，扫描穿过每个轴中间将产生 4 个开始点。对 MAP 命令，相图中线的搜索将沿图中轴变量的每个方向进行。按这种方式，应保证找到所有可能相界线。当然，可用比使用最少数目的开始点略长的时间来执行，所以一条线可多次计算。但是，POLY 模块记住所有节点并当找到已知的节点时随后将停止沿一条线的计算。

也可能通过在 ADD 命令的方向之后悬挂“ > ”来从一个初始平衡中创建一系列开始点，例如：

Direction /default/: 2>

这将为每个系列相沿轴 2 的负方向的变化产生一个初始点，这将确保成功找到此方向上所有相边界线（不仅第一个）。

当存在无交叉的几条线的一个相图时这个命令特别有用。因此可计算具有更多有限成分范围的等值图。对计算 CDV 图液时有用的。

8.9.6 POST

描述：此命令切换到后处理器 POST 模块，其有自己的命令指令表（细节在第 9 部分）

提要：POST

注释：在 Thermo-Calc 和 DICTRA 中 STEP 或 MAP 之后，结果应在 POST 模块中处理，产生相图、性质图、扩散剖面和用户期望的很多其它类型图的各种图形表达。在 POST 模块内部，可选择任何态变量、任何导出变量或输入符号（函数或变量）作为 X/Y 轴。当已经绘制图时，定义高标准图的改变的外观参数可进一步指定，如曲线标签选项、连线状况、自动或手工标尺与缩放、相界和相区上半自动或手工加标签、图形格式、文本字体、颜色、屏面绘图等。计算的结果也可在 POST 模块中制表。用户可容易地将实验数据附加到绘制的图上。也能在文本文件中保存坐标，可编辑和用做实验数据文件合并到其它图上或用作 PARROT 模块估价的设置文件的一部分。在绘制的图中可悬挂或保存项。也可为结果图修改组分的参考态。

8.10 其它有帮助的命令

8.10.1 CHANGE_STATUS

描述：此命令可用于通过悬挂一些在其它处稳定的相来计算亚稳相图。

每个相、组分和物种都有一个状态。缺省的状态是 ENTERED（输入）。

对于组分和物种，状态可以下列之一：

- ENTERED　意思是组分或物种包含在计算中，若最小化总能则它们是稳定的。这是缺省状态。
- SUSPENDED 意思是计算中不考虑相。
- SPECIAL　　意思是指定的组分不包含在摩尔或质量分数求和之中。它仅对组分起作用。

注意，只有组分由状态 SPECIAL，预示着它们不包含在摩尔或质量分数求和之中。例如，对所谓的“ u ”分数或其它正规化的分数，当从求和中排除一个或更多组分时，必须指定哪个组分应从摩尔或质量分数的计算中排除。这样的组分必须有状态 SPECIAL，用 CHANGE_STATUS 命令来指派其状态。例如，要获得含碳系重金属的分数，可将碳的组分状态设定为 SPECIAL：

CHANGE_STATUS COMP C=special

还请注意，组分和物种的 SUSPENDED 状态将不总是起作用，因为程序中有缺陷。

对于相，可有下列四个状态之一：

- ENTERED　　意思是相包含在计算中，若最小化总能则它们是稳定的。这是缺省状态。
- SUSPENDED　意思是计算中不考虑相。
- DORMANT　　意思是计算中不考虑相但计算其析出驱动力。
- FIXED　　意思是相必须是稳定的作为一个条件，在指定的量处处于平衡。

提要 1：CHANGE_STATUS <keyword> <name(s)>=<status> <value, 可选的>

提要 1：CHANGE_STATUS

接着提示：For phases, species or components? /PHASES/: <keyword>

keyword=phase or species or components

Phase name(s): <name(s) of the phase(s)>

当“ phase ”作为 keyword 时，将有状态变化的相的名称必须给出（所有的在一行），必须用逗号或空格作为分界。若前面有等号“ = ”则指定于相的状态也可在同一行给出。注意可有星号“ * ”表示所有相。特定符号“ *S ”即一个*直接跟着 S，意味着所有悬挂（sispended）

相。同样的方式，“ *D ”意味着所有隐藏（dormant）相，“ *E ”意味着所有输入（entered）相。

Name(s): <name(s) of the species(s) or component(s)>

当“ species ”或“ component ”作为 keyword 时，将有状态变化的物种或组分的名称必须给出（所有的在一行），必须用逗号或空格作为分界。类似于“ phase ”作为 keyword，若前面有等号“ = ”则指定于物种或组分的状态也可在同一行给出。注意可有星号“ * ”表示所有物种或组分。特定符号“ *S ”即一个*直接跟着 S，意味着所有悬挂（sispended）物种或组分。同样的方式，“ *E ”意味着所有输入（entered）物种或组分。

Status /ENTERED/: <new status>

必须给出要指派的新的状态：

- 对于物种，可用值 ENTERED 或 SUSPENDED。
- 对于组分，可给出状态 ENTERED、SUSPENDED 或 SPECIAL。SPECIAL 意思是这个组分要从摩尔分数和质量分数求和中排除。
- 对于相，可给出状态 ENTERED、SUSPENDED、DORMANT 或 FIXED。DORMANT 意思与 SUSPENDED 相同但将计算驱动力。FIXED 意思是相稳定是一个条件。

例如，对所谓的“ u ”分数，当从求和中排除一个或多个组分时，必须指定哪个相应从摩尔分数计算中排除，这个组分必须有状态 SPECIAL。用 CHANGE_STATUS 命令指派这个状态：

CHANGE_STATUS comp C=special

Start value, number og moles /0/: <initial amount>

对 SUSPENDED 相，可给出相的初始量，通常，若相可能不稳定则给出 0，若相稳定则给出 1。

Number of moles /0/: <exact amount>

对 FIXED 相，必须给出相的准确量。若摩尔数为零，相处于稳定性极限。

8.10.2 LIST_STATUS

描述：组分、物种或相的状态可用此命令来列出。用户可选择所有的或其中一些。

提要 1：LIST_STATUS <keyword(s)>

提要 1：LIST_STATUS

接着提示：Option /CPS/: <keyword(s)>

keyword=C or P or S, or any combination

- Ø C 意思是列出组分状态
- Ø P 意思是列出相状态
- Ø S 意思是列出物种状态

缺省为 CPS。按<RETURN>，获得具有组分、相和物种状态的完全列表。仅给出 P，获得只有相状态的列表。

用 CHANGE_STATUS 命令（见上面）可改变组分、相和物种状态。

结果：依赖于 CHANGE_STATUS 选相中指定的关键词，显示具有当前组分、相和物种状态或其组合的表。

- 对于组分，列出其状态和参考态。
- 对于 ENTERED 和 FIXED 相，列出其状态、驱动力和平衡量（稳定的）。注意，以稳定性递减的顺序列出亚稳相。为避免过常输出，版本 N 以后仅逐行列出 10 个亚稳相（处于 ENTERED 状态），而其它稳定性更差的相并入一行。对于 DORMANT 相，列出其相名与驱动力。对 SUSPENDED 相仅在一行列出相名。
- 对于物种，仅列出状态。

例：

POLY_3l 1-ST

Option /CPS/:

```
***STATUS FOR ALL COMPONENTS
COMPONENT          STATUS      REF.STATE      T(K)          P(Pa)
VA                 ENTERED     SER
C                  ENTERED     GRAPHICAL      *             *
FE                 ENTERED     SER
NI                 ENTERED     SER
***STATUS FOR ALL PHASES
PHASE              STATUS      RDRIVING 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-01       0.00000000E+00
DIAMOND_A4         ENTERED     -1.73225646E-01       0.00000000E+00
ALNI_B2            ENTERED     -4.79816887E-01       0.00000000E+00
ENTERED PHASES WITH DRIVING FORCE LESS THAN     -4.80
AL3NI2 DAS
HCP_A3             DOEMANT     -2.69336869E-01
SUSPENDED PHASES:
V3C2 KSI_CARBIDE FECN_CHI FE4N_A13
***STATUS FOR ALL SPECIES
C     ENTERED    C2 ENTERED    C4 ENTERED    C6 ENTERED    FE ENTERED    VA ENTERED
C2    ENTERED    C3 ENTERED    C5 ENTERED    C7 ENTERED    NI ENTERED
```

8.10.3 COMPUTE_TRANSITION

描述：此命令是 CHANGE_STATUS 与 SET_CONDITION 命令的组合，因此当通过改变已经设定的条件来形成新相时，此命令允许直接计算。至少成功计算了一个平衡之后才能使用此命令，否则用户将被告知必须首先进行平衡计算来找出当前条件下稳定相。从 TCC 版本 N 起由此命令，并在 TCC 版本 P 中作了进一步改进

当使用此命令时，程序将访问 CHANGE_STATUS 命令来临时将用户指定的相状态改变为零量的 FIXED，同时临时释放存在的平衡条件之一（用户选定）。程序将计算新的平衡，其中特定相是稳定的，而体系中平衡量为零。接着释放的条件将用计算值来指派，以便确保计算的平衡。然后，创旭将自动将指定此特定相的状态变回 ENTERED，同时将临时释放的条件为重新设定条件之一并赋以计算值来确保此特定相零量的形成。

此命令对寻找熔化温度、沸点温度或溶解度极限特别方便，同时当用户要设定计算特定相稳定处的平衡的最优条件时通常有用。当用户要准确知道定义的条件到可保证其它条件相同的体系中特定相为零量的距离有多远时此命令也可使用此命令。

在 TCC 版本 P 中，当弹出“ Pfase to form: ”（而不是相名）时若使用关键词 ANY，在给定变化方向符号中和在释放的条件的估计变化处可能找出要形成的任何新相：负号意味着在释放的条件的较低值处新相被发现，正号意味着在释放的条件的较高值处新相被发现，施放的条件的估计

变化意味着期望新相在哪里（仅是个估计值，因此在合理尺度范围内的值应是足够的）。如希望的话，这样的计算可重复，因此这个新特征对寻找沿某些释放的条件产生的所有可能相变是很有用的。

提要：COMPUTE_TRANSITION

接着提示：Phase to form: <phase name>

这里必须指定新相名，如希望形成的 BCC。这将此新相的状态改变为 FIXED 作为 0 量，程序将显示如下信息：

You must remove one of the these condition

P=100000, T=800, N=1, X(FE)=.5　DEGREE OF FREEDOM 0

注意，从 TCC 版本 P 起，当弹出“ Phase to form: ”时若为 phase name 给定关键词 ANY，也可能找出在释放的条件的某一方向上形成的新相。在此情况下，屏幕上也将显示上述信息。

Give the state variable to be removed /T/: <one condition>

One condition 列在以上消息中必须移走，以便能够计算这个释放的变量计算值处形成指定（或任何）新相的转变平衡。

因此，如已键入如 X(Fe)则可出现（成功计算之后）如下消息：

To form BCC the condition is set to X(FE)=.48605791769

这个计算值接着将被指派为移走条件的参数，在这种情况下就是 X(FE)变量。所以若键入 LIST_CONDITION 命令，屏幕上将显示如下消息：

P=100000, T=800, N=1, X(FE)= 4.8605791769E-1

DEGREES OF FREEDOM 0

注意，在 TCC 版本 P 中，当弹出“ Phase to form: ”时若为 phase name 给定关键词 ANY，接着的一行将进一步为给定的变化方向符号和转变平衡计算之前释放的条件的估计变化给出提示：

Estimated change (with sign) /1/: <+/-#>

这里必须给出 X(FE)情况下的给定变化方向符号和释放的条件的估计变化：负号意味着在释放条件的较低值处找到了新相，正号意味着在释放条件的较高值处找到了新相；释放的条件的估计变化预示着任何新相期望的位置（今时估计值，所以在合理尺度内的任何值都将是足够的）。例如，若输入组合-.02，可出现一下消息（成功计算之后）：

To form BCC_A2#1 the condition is set to X(FE)=.493708756187

这个计算值接着将被指派为移走条件的参数，此情况下为 X(FE)变量。所以若键入 LIST_CONDITION 命令，屏幕上将显示如下消息：

P=100000, T=800, N=1, X(FE)= 4.8605791769E-1

DEGREES OF FREEDOM 0

8.10.4 SET_ALL_START_VALUES

描述：除非若计算失败或若有溶解度范围或有序而要施加开始值，否则此命令时不必要的。若温度和压力不是条件，将询问其值，接着对每个相提示是否稳定的和其条件。

提要：SET_ALL_START_VALUES

接着提示：T /XXXX/: <temperature in K>

若温度不是条件，用户必须猜测其初始值（以 K 为单位）。

P /100000/: ,pressure in pa>

若压力不是条件，用户必须猜测其初始值（以 pa 为单位）。

Automatic start values for phase constitutions? /N/: <Y, N or F>

用户可回答 N（不）、Y（是）或 F（对于 FORCE）。缺省为 N。

F 选项的理由是，在一些情况下，因为用户设定了不可能的条件如 W(C)=1.5[W(C)为质量分数，因此必须小于 1]，而计算失败。程序试图放入所有相中 C 的最大量来达到这个条件，

但无论如何是失败的。当用户发现了错误并将 W(C)设定为 0.015 时，因为从以前的值开始，计算还可能失败。为返回而“刷新”开始值，必须回答 F 来强加。

若用户回答 Y，命令将立即终止，程序将自动为所有可能的相中的相组成设定开始值。

Should <phase> be stable /N/: <Y/1 or N/2>

要求猜测这个相是否稳定。所有输入的相都将提示这个问题和下两个问题。注意，不能有比组分还多的稳定相，必须至少一个相（溶解了所有组分）设定为稳定的。为了相后兼容，只个问题必须回答 1（为是）或 0（为否）。

相名称可由一个井号“#”后跟一个数字，如 BCC_A2#2。对于具有溶解度范围的相，应是具有相同名称的两相但井号后有不同的数字。

Major constituent(s): <name of major constituent(s) in the phase>

应指定相中具有最大分数的组分。若有多于一个组分具有大的分数，在同一行给出所有的组分。若使用缺省的主要组分用一个星号“*”来回答。通过给出“$”来不改变组分。若没有主要组分则给出 NONE，若不适当地给出主要组分，将提问相的单独分属

Y(<phase>, <costituent>) /.XXXXXXXXXX/: <.YYYYY>

当前值（.XXXXXXXXXX）是缺省的。用户可按<RETURN>来接受缺省或给出一个新的值（.YYYYY）。

相名或组分名可有一个井号后跟一个数字，如 Y(BCC_A2#2,FE)、Y(BCC_2#2, #2)。对具有混溶裂隙的相，有应有相同名称但井号后有不同数字的两个相。对具有亚点阵的相，亚点阵 2 或更高阶亚点阵中的组分也将后缀以井号后跟一个数字。

8.10.5 SHOW_VALUE

描述：此命令用于在屏幕上显示任何状态变量、函数或变量的当前值。

提要 1：SHOW_VALUE <name(s) of state variable(s) or symbol(s)>

提要 1：SHOW_VALUE

接着提示：State variable or symbol: <name of variable(s) or symbol(s)>

可指定单个或几个状态变量或符号（输入的函数或变量）。注意，星号“*”可用于表示所有的相或所有的组分。也可使用每元符号“$”来表示所有的稳定相。因此命令 SHOW W(*.*)将列出所有相的质量分数，而 SHOW W($.*)将列出所有稳定相的质量分数。

注意，若 SHOW 函数，所有函数将使用状态变量的当前值来评价。而若要 SHOW 变量，则从被 ENTERED（输入）或最后 EVALUATIED（评价）时起保留其值。因此若希望从一个计算中将值保存到另一个计算仲，则可将其 ENTE（输入）到一个变量。在 PARROT 模块中频繁这样做来在平衡之间传递值。

8.10.6 SET_INPUT_AMOUNTS

描述：此命令可用于指定如何从混合的各种物质中建立一个体系。对使用物质数据库最有用。例如在 C-H-O-N 系可以给出

S-I-V N(H2)=10, N(H2O)=25, N(C1O2)=5, N(N2)=100

POLY 模块将此转换为当前系列组分的条件。在此情况下当元素为组分时上述命令等同于：

SET_CONDITION N(H)=70, N(O)=35, N(C)=5, N(N)=200

注意，也可在 SET-INPUT-AMOUNTS 命令中给出负值。

提要 1：SET_INPUT_AMOUNTS N(<species>) or B<(species>)>=<value>

提要 1：SET_INPUT_AMOUNTS

接着提示：Quanlity: N(<species>) or B<(species>)>

这里应给出 N(<species>)或 B<(species>)>。可给出量也可在量前加等号“=”[如 H(H2)=10 或 B(H2O)=1000]或者只按<RETURN>来回答对量提示。

Amount: <value of the quantity>

必须指定量的数值

8.10.7 SET_REFERENCE_STATE

描述：当计算活度、化学势和焓时组分的参考态很重要，见 3.2.13 节中的信息。数据库决定组分的参考态。对于每个组分，必须为选定相、温度和压力查阅数据数据，即“参考态”。溶解该组分的所有相的所有数据必须使用相同参考态。然而，不同数据库对相同元素可能使用不同参考态。因此当来自不同数据库混合数据时必须小心。

缺省时，相对数据库使用的参考态来计算活度与化学势等，因此差异依赖于数据库。用此命令，若数据库中的参考态不合适，用户自己可选择组分的参考态。

也可将组分的参考态设定为“SER”，即稳定元素参考（对合金中的主元素经常设定为缺省，其受成分所支配）。在此情况下，不需要参考态的温度和压力，也将不提示。

为了在用户指定的参考态中指定条件，可在状态变量上悬挂一个 R。因此 AC 是相对缺省参考态的活度，ACR 为相对选定参考态的活度。

提要 1：SET_REFERENCE_STATE <component> <phase> <temperature> <pressure>

提要 2：SET_REFERENCE_STATE

接着提示：Component: <name of the component>

必须给出的成分名称。

Reference phase: <anme of a phase sued as the new reference state>

这里必须给出一定处于 ENTERED 或 DORMANT 或 SUSPENDED 状态的相名称。当然，成分就是此相的组分。

敏感的问题是成分是否存在于相的几个物种中，如气体中 O、O2 和 O3 中的氧。通常，希望将最稳定的物种作为氧的参考态，即此时应为 O2。因此程序将计算当前温度下具有纯成分的相的所有可能状态的 Gibbs 能并选定最稳定的一个。

Temperature /*/: <temperature for the reference state>

可为参考态选择温度（K）。值*意思是计算使用当前温度。

Pressure /1E5/: <pressure for the reference state>

可为参考态选择压力（pa）。值*意思是计算使用当前温压力。

例：

S-R-S Fe SER

S-R-S Cr FCC * 10000

S-R-S H2O AQUEOUS * 10000

S-R-S ZE REF_ELECTRODE * 10000

8.10.8 ENTER_SYMBOL

描述：符号是 POLY 模块定义方便于用户的量的非常有用的，符号可以是常数、变量、函数或表。

提要 1：ENTER_SYMBOL <keyword> <name>=<value, expression or variables>

提要 1：ENTER_SYMBOL

接着提示：Constant, variable, function or table? /FUNCTION/: <keyword。

关键此可以是常数、变量、函数或表。

- 常数仅可输入一次并仅意味着使用数值的名。例如，以帕斯卡为单位的一个大气压的值在命令 ENTER CONSTANT P0=101325 之后可用 P0 表示。定义的常数可用作条件指定中的值，例如 SET-COND P=P0。
- 函数为状态变量或其它函数的表达式。这些表达式被保存，同时无论何时函数值要求要评价所有函数，其原因是它们彼此依赖。
- 变量类似于函数，因为它们也可以是状态变量的表达式。然而，与函数相反，只当输入时或若它们明确地以 EVALUATE 命令命名，才评价它们。任何时候都可能输入带有新的

表达式的变量，这个表达式将直接评价，其值存储为变量值。定义的变量可用作 SET-CONDITION 命令的值。

- Ø 表用于列出来自 STEP 或 MAP 命令的结果。一张表由一组任意数目的状态变量、函数或变量组成。定义的标也可用在后处理器 POST 中。

Name: <name of the symbol>

每个符号具有唯一的名称，必须以一个字母开头，同是最大由 8 个字符。合法的字符包括字母（或大写或小写）、数字和下划线“ _ ”。任何其它符号如扩号“ (”和“) ”、加号“ + ”、减号“ - ”，斜线“ / ”或“ \ ”，句点“ . ”对符号名是不合法的。

若希望在同一行上输入符号名和函数值，必须用等号“ = ”分开，如 TC-T-273.15。否则，将发继续回答下面问题，要注意到这里定义的不同类型的符号（常数、函数、变量或表）、问题将是不同的提示。

Function: <definition for a function or variable>

函数于变量是以状态变量表达式或其它函数、常数或变量来评价。表达式 FORTRAN 型的表达式并可使用算符+、-、*、=和**（**仅带整数值数）。也可使用一元函数象 LOG、LOG10、EXP、SIN、COS 和 ERF。表达式应使用分号“ ; ”或空行（通过在下一个提示处按<RETURN>）来终止。

函数例子：

GM(LIQUID)	每摩尔成分液相的 Gibbs 能
H.T/4.184	以卡为单位的体系热容
ACR(CR)/X(FCC, CR)	FCC 中 Cr 的活度系数
T-273.15	摄氏温度。

& <continuation of the definition for the symbol>

与符号“ & ”意思是若一行函数对不够，则在新的一行继续写函数。若已经完成函数，只再次按 RETURN 即可。

Value: <value for a constant>

常数只能一次指派一个数值。

Value or expression: <value of expression for a variable>

变量可指派一个数值或一个表达式。表达式将被立即评价和放弃。仅保持数值。这给出不同条件计算之间保存值的可能性，因为所有状态变量和函数将对新的条件来评价。

Variable(s): (variable(s) in a table>

表由一组状态变量或函数组成。从 STEP 命令获得的结果的方式认为是表。

例：

ENTER TABLE K=T, X(LIQ, C), X(LIQ,CR), ACR(C)

意思是称为 K 的表将包含四行，即温度、液相（LIQUID）中 C 和 CR 的摩尔分数和 C 的活度。

若希望表中有摄氏温度，必须首先给出命令 ENTER FUNCTION TC=T-273，接着使用表中符号 TC。

& <continuation of the dsfinition for the table>

与符号“ & ”意思是若一行对表是不够的，则在新的一行继续写表。若已经完成表，则再次按 RETURN 即可。

8.10.9 LIST_SYMBOLS

描述：对所有的常数、函数、变量和表，其定义可由此命令列出。定义的变量将与定义的函数一起列出，而变量名后跟百分号“ % ”。

为了找出函数或变量的值，使用 SHOW 或 EVALUATE 命令。用 TABULATE 来绘制表。

提要：LIST_SYMBOLS

8.10.10 EVALUATE_FUNCTIONS

描述：评价和列出一个或多个或所有输入的函数或变量的值，注意，只有变量被明确明明才能评价变量。

提要 1：EVALUATE_FUNCTIONS <name(s) of difined function(s)>

提要 1：EVALUATE_FUNCTIONS

接着提示：Name(s): <name(s) of difined function(s)>

必须指定一个或多个输入函数或变量名，通过键入一个*来评价所有的函数和变量。

8.10.11 TABULATE

描述：此命令将给出一张有来自用 STEP 命令计算的值的表。甚至可绘制在 STEP 计算之后输入的表。

提要 1：TABULATE <name of a difined table> <Return or a file name>

提要 2：TABULATE

接着提示：Name: <name of a difined table>

必须给出表名。表当然必须是 ENTERED。

Output to Screen or file /SCREEN/: <file name>

屏幕上一指定文件名的文件列出表。

8.11 高级命令

8.11.1 AMEND_STORED_EQUILIBRIA

描述：此命令给出关于 STEP 或 MAP 计算后的计算单元的信息，允许用户列出所有的或部分计算结果，悬挂多于的或亚稳平衡的所有或部分计算结果，存储所有或部分计算结果（若已用其它 AMEND_STORED_EQUILIBRIA 命令悬挂）。

在步进或绘图过程中存储平衡的工作区可溢出，接着作为单元写进文件。每个单元通常包含一个或多个平衡区范围。

可使用下列选项之一：

- L　列出计算的平衡（所有活指定单元）；
- S　悬挂所有单元和其区；
- Q　单独地悬挂每组平衡（指定单元和/或区）；
- R　存储所有单元和其区；

提要：AMEND_STORED_EQUILIBRIA

接着提示：Name: <name of a defined table>

Options: L(ist) S(uspend) Q(uery suspend) R(estore) /L/: <option>

可仅列出（L）计算的平衡、悬挂每个（S）或单独悬挂每组平衡（Q），或存储每件事物（R）。

Block /*/: <block number>

在选项 L、S、Q 或 R 中选取单元号，二者择一地，通过接受统配符“＊”（按<RERURN>）可包含修正选项中所有单元。

在选项 L 情况下，屏幕上将显示具有区和平衡细节的一个单元（若指定单元号）或所有单元（若接受或使用统配符“＊”）中每个测距仪，并且用户将被提问是否悬挂或保持它（见后面）：

在选项 Q 情况下，屏幕上将显示一个单元（若指定单元号）或所有单元（若接受或使用统配符“＊”）中每个测距仪并且用户将被提问是否悬挂或保持它（见后面）：

S(uspend) K(eep) /K/: <S or K>

在选项 S 或 R 情况下，若指定一个单元，将询问用户在单元中的哪个区悬挂或存储，若接受或使用统配符“＊”，将询问用户下列问题（需要回答 Y 或 N）：

Really suspend all /N/: <Y orN>

Really restore all /N/: <Y orN>

对以上问题若回答 N，程序随后问题稳在某些单元中哪些单元和哪个区执行 S 或 R 动作。

Really suspend all /N/: <Y orN>

确认选择：Y 悬挂所有的，或

N 不悬挂所有的。

Really restore all /N/: <Y orN>

确认选择：Y 存储所有的，或

N 不存储所有的。

Range: <range(s) of region>

用户可指定悬挂（S 选项）或存储（R 选项）的一个或更多行列。键入统配符“ * ”在特定区悬挂或存储所有行列。为了知道行列，必须先使用 LIST 选项。

S(uspend) K(eep) /K/: <S or K>

若要悬挂或保持，“ 询问悬挂 ”选项（Q）将寻找某些单元中每个区。悬挂区不包括在随后生成的图中。

Output file: /SCREEN/: <file name>

这个提示仅对列表（L 选项），命令之后即被终止。这里必须给出文件名，或按<RETURN>键接受缺省 SCREEN（终端）。存储在各单元的一组平衡（具有所有行列）将在屏幕上或文件列出。

8.11.2 CREATE_NEW_EQUILIBRIUM

描述：在 POLY 模块中，可用不同组的条件和相（正常具有同组成分）创建几个平衡。缺省时，有一个平衡。若用户希望保持此平衡的这组条件和相，可使用此命令创建其它条件和相，并使用平衡的其它组条件。两个平衡可用于容易计算量个状态之间的焓差。在 PARROT 模块中，将试验信息存储为平衡序列。

提要：CREATE_NEW_EQUILIBRIUM

接着提示：Equilibrium number /2/: <a new equilibrium number>

POLY3 工作区中的每个平衡由唯一的整数来区分。这样的平衡数由 SELECT-EQUILIBRIUM 命令来访问。

Initiation code /2/:

8.11.3 DELETE_INITIAL_EQUILIBRIUM

描述：此命令删除一个或所有初始平衡。初始平衡用作 MAP 或 STEP 命令的起始点，也可参见 ADD-INITIAL-EQUILBRIUM 命令

提要 1：DELETE_INITIAL_EQUILIBRIUM <number of an initial equilibrium>

提要 2：DELETE_INITIAL_EQUILIBRIUM

接着提示：Number /ALL/: < number of an initial equilibrium >

指定从 POLY3 工作区删除 number of an initial equilibrium。使用命令 LIST-INITIAL-EQUILIBRIUM 来找出所有初始平衡数。缺省时为全选。

8.11.4 LIST_INITIAL_EQUILIBRIA

描述：此命令列出添加 ADD-INITIAL-EQUILIBRIUM 命令的所有平衡。所有初始平衡为 STEP 和 MAP 命令所使用。

提要：LIST_INITIAL_EQUILIBRIA

8.11.5 LOAD_INITIAL_EQUILIBRIUM

描述：此命令从特定添加的初始平衡中将所有条件和计算结果复制到当前平衡中。失去当前条件与结果。

提要 1：LOAD_INITIAL_EQUILIBRIUM <number of an initial equilibrium>

提要 1：LOAD_INITIAL_EQUILIBRIUM

接着提示：Number: <number of an initial equilibrium>

指定被加载的 number of an initial equilibrium 为当前状态。该数可用 LIST-INITIAL-EQUILIBRIUM 命令找到。

8.11.6 DELETE_SYMBOL

描述：用此命令删除符号（即用命令 ENTER-SYMBOL 输入的常数、变量、函数或表）。

提要 1：DELETE_SYMBOL <name of a symbol>

提要 1：DELETE_SYMBOL

接着提示：Name: <name of a symbol>

指定要删除的符号名。一次只删除一个符号。

8.11.7 DEFINE_COMPONENTS

描述：用此命令可改变一组组元。缺省时，元素用作组元。使用组元仅可设定一些条件如量、活度或化学势，所以这组组员可以是重要的。

注意：此命令预示着 REINITIATE 命令，因此应作为 POLY 模块中的第一个命令来给处。

提要 1：DEFINE_COMPONENTS <all new components>

提要 2：DEFINE_COMPONENTS

接着提示：Give all new components /existimg components/: <new components>

必须给处（所有的要在一行）新的组元来替代已有的组元定义，组元数不能变。若希望改变组元数和是的命令是 CHANGE-STATUS。

若要保持一些已有的组元定义，推荐在一行中再次键入其，否则，程序拒绝定义新组元，特别当一些组元是由几个元素构成的。

新的组元必须作为物种已经介绍。例如，在体系 Fe-Si-O 中希望定义组元 FEO、FE2O3 和 SIO2 而不是 FE、SI 和 O。

8.11.8 MACRO_FILE_OPEN

描述：MACRO 是文件上预定义命令序列的方便方法，用此命令可实行命令序列。当只有一些小的变化（体系、条件和绘图设置等中的）来经常进行计算此方法是绝对有用的。一种好的应用例子是从评价中计算相图的时候。使用宏文件（通常带有扩展名“ TCM ”），各种合法的 Thermo-Calc 命令可存储在文件中，只键入接续文件名宏命令。

宏文件可包含任何合法的 Thermo-Calc 命令。宏必须用命令 EXIT 命令来终止，或者在 SYS、GES、POLY、PARROT 或 POST 模块使用命令 SET-INTERACTIVE 来终止。

宏的令人感兴趣的便利是允许与用户交互，因此可用如下输入：

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

宏将停止在“ @? ”，在屏幕上的“ ? ”后面写文本，等待用户输入。将使用用户输入作为 Thermo-Calc 输入，在此情况下值低于或高于轴限。

可有宏变量，记为#1、#2 等，最多由 9 个变量。可用如下方法赋值：

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

在对用户提示并等待输入是在“ @#3 ”之后写文本。输入指派为宏变量 3。接着可使用宏的不同部分中的变量，例如

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

宏变量 3 的内容的文本复制将插入“ ##3 ”的位置。更复杂命令中也可使用它。

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

将设定黄变量 3 的摩尔分数为轴 1。

再次注意，当处于 POLY、POST、SYS、GES 或 PARROT 模块中时必须使用命令 SET-INTERACTIVE 来终止宏命令

宏文件在“ @& ”处有一个暂停，而通过在宏文件名后键入任何字符（除了 Y 以外）来防止暂停处终止。

宏文件也可由仅可能多的以“ @@ ”符号开头的注释行。这样的行在容易评述宏文件中将提供极大帮助，但不考虑为命令行，因此当 TCC 访问该文件时不影响所有正常 Thermo-Calc 命令的进行。

若在 SYS 模块中使用 SET-LOG-FILE 命令 Thermo-Calc 软件自动可生成宏文件，在其它 SYS/TDB/TAB/GES/POLY/POST/PARROT/ED-EXP 命令或特殊模块命令之前给出*.LOG 文件名。这样的*.LOG 文件名是一个简单的文本文件，使用简单的文本编辑（如记事本，写字板、Emacs、PFE 等）可进一步编辑，如取走不必要的命令行、修改一些命令、设定和定义、添加一些暂停点、添加一些有用的以“ @@ ”符号开头的注释行。用标准扩展名“ TCM ”保存为宏文件。

从 TCC 版本 N 起，宏文件可套入 5 级，即一个宏文件可访问其它宏文件，若宏由 SET-INTERACTIVE 命令终止，将在以前宏中下一个命令处重新开始。若由 end-of-line（行尾）来终止，程序将异常中断。

提要 1：MACRO_FILE_OPEN <name of a Macro file>

提要 1：MACRO_FILE_OPEN

接着提示：Macro filename: <name of a Macro file>

用宏命令指定文件名。缺省扩展名“ TCM ”。

注意：在 Windows NT/200/95/98/ME 环境下，若在命令之后没有一个适当宏文件，将在屏幕上弹出 Open file 窗口，所以可是当指定路径（在 **Look in** 框）和文件名（在 **File name** 框），如图 14.2 所示。

可改变文件类型（如 **File of type** 框中的 TCM）。按 **Open** 钮，程序继续执行各种 Thermo-Calc 命令。用户也可取消这样的 **Open file** 窗口对话，因此将不打开当前宏文件。

若宏文件包含一些 SYS/TDB/TAB/GES/POLY/POST/PARROT/EX-EXP 模块命令来设定*.LOG 文件、保存/读取 GES5/POLY3/PARROT 工作区、切换 USER 数据库、编译实验（从已有的*.POP 文件）、创建新的*.PAR 文件、悬挂实验数据文件、绘制/卸载图等，屏幕上将弹出相应窗口（如 **Save As**、**Open file**、**Print** 等）。详细情况见相应命令。

8.11.9 REINITIATE_MODULE

描述：模块被重新初始化为第一次输入的状态。去除了所有重新设定的条件、改变的状态、输入的符号。保存文件名存储为缺省。

提要：REINITIATE_MODULE

8.11.10 SELECT_EQUILIBRIUM

描述：若用户已经创建了多于一个初始平衡，可使用此命令在这些平衡之间实现切换。

提要 1：SELECT_EQUILIBRIUM <choice on equilibrium>

提要 1：SELECT_EQUILIBRIUM

接着提示：Number /NEXT/: <choice on equilibrium>

可回答 FIRST、LAST、NEXT、PREVIOUS 或 PRESENT。

大多数命令仅对 PRESENT 平衡有影响，然而，REINITIATE 和 DEFINE-COMPONENT 命令将去除所有平衡。

8.11.11 SET_NUMERICAL_LIMITS

描述：此命令使改变收敛判据成为可能，这对加速复杂体系计算时有帮助的。

此命令将首先在屏幕上列出体系定义的各种极限，如下：

```
LIMITATIONS of the present version of Thermo-Calc
Max number of element                    :   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

请注意，非理想溶体相中的组元最大数，如使用 SIT、HKF 或 PITZ 模型的 AQUEOUS 溶体，已经从 80 增加到 TCC 版本 P 的 200 个。

提要：SET_NUMERICAL_LIMITS

接着提示：Maximum number of iterations /200/: <xxx>

缺省时，程序将在放弃之前尝试 500 次迭代（以前的版本为 200 次）。就象一些模型将给出多于 1CPU 秒/迭代的计算时间一样，此数也用于检查 CPU 时间，若已经使用 500CPU 秒/迭代，计算终止。

Required accuracy /1E-30: <zzz>

这是相对精度，程序要求收敛之前每个变量的相对误差必须小于这个值。较大值通常意味着更少的迭代和更低精度的解。该值至少应比机械精度达一个数量级。

Smallest fraction /1E-30/: <zzz>

这是指派给非常不稳定组元的值。通常只有在气相中可发现这样的值。

Approximate driving force calculation for metastable phases /Y/: <Y or N>

通常 POLY 模块只要求一组处于平衡的稳定相，以便终止迭代。亚稳相包含在所有的迭代中，而这些亚稳相可不达到其最有力的成分，因此其驱动力仅是近似。若正确的驱动力是非常的重要的，用户可对这个问题回答 NO，促使亚稳相计算终止。这个可要求更多此迭代，STEP 和 MAP 命令也可由于亚稳相收敛不良而终止。

注意：在 TCC 版本 P 中，若由 COMPUTE-EQUILIBRIUM 或 STEP_WITH_OPTION 或 MAP 或 SPECIAL_OPTION 命令（除了特殊选项 NEVER_ADJUST_MINMUM_Y 已被切换之外）施加的程序计算过程的任何阶段寻找稳定相时，若有任何收敛问题，屏幕上将出现下列消息：

Convergence problem, increasing smallest site-fraction from 1.00E-30 to hardware precision 2.00E-14.
You can restore using SET-NUMERICAL-LIMITS.

预示着当前 POLY3 工作区中最小的位置分数已经自动从 1.00E-30 提高到依赖硬盘的精度（在 PC Linux 下为 2.00E-14）。对于当前 TC 运行中其它后续 POLY3 计算，可使用这个 SET-NUMERICAL-LIMITS 命令来存储或重新设置最小位置分数为以前的或其它优先值，以及重新设置其同数值极限。

8.11.12 SET_START_CONSTITUTION

描述：此命令类似于 SET-ALL-STATE-VALUES 命令，但是用于可能有不正确组成的单个相。

提要：SET_START_CONSTITUTION

接着提示：Phase name: <name of a phase, and possible major constituent(s)>

为要设定组成的相指定名称。

若有相的主要组元，必须与相名称在同一行指定它。给出一个“＊”，用户选择缺省主要组元。一个“$”意味着保持同样的组成，而 NONE 意味着给出单独位置分数。

Y(<phase>#<composition_set>,<constituent>#<sublattice>) /xxx/: <SF>

将给出组元的位置分数（SF）。缺省值<xxx>是最后计算的一个。

8.11.13 SET_START_VALUE

描述：单个变量的开始值可用此命令设定。当对大多数问题很少使用多于可处理自动开始值。

提要：SET_START_VALUE

接着提示：Start variable: <name of a start variable>

必须给初开始变量。

Value:

作为开始值指派给开始变量的值。

8.11.14 PATCH

描述：此命令仅为那些知道在做什么的人们。从 TCC 版本 N 起已经删除了它。

提要：PATCH

8.11.15 RECOVER_START_VALUE

描述：此命令可恢复平衡计算中的开始值。但还不能实现。

提要：RECOVER_START_VALUE

8.11.16 SPECIAL_OPTIONS

描述：从 TCC 版本 N 起，这个命令代替了一些以前版本的 SET_MISCIBILITY_GAP 命令，在 TCC 版本 N 中增加 7 条的选项，TCC 版本 P 中进一步增加了 4 条。

目前，可设定如下选项：

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
NONE

提要：SPECIAL_OPTION

接着提示：Which option? /SET_MISCIBILITY_GAP/: <Option>

选项：选择一下 12 个选项之一或 NONE（无选项）。对一些选项，将提问一些进一步问题。

Ø SET_MISCIBILITY_GAP

同时可存在两种不同成分的相必须有两个或更多成分组。以前在 Gibbs 能体系必须完成这个选项，而在版本 J 中 POLY 模块引进了 SET_MISCIBILITY_GAP 命令。现在已有 SPECIAL_OPTION 命令的子命令。通常数据库创建了必要的多各成分组，而用户可使用此命令添加或删除更多组。

通常具有有序/无序转变的相有必要有两个或更多成分组，而用户经常忘记为有序和无序相创建成分组，这导致程序系统性事故。这个特定的选项当对无序相执行时也可为无序相自动创建成分组。

Phase with miscibility gap: <name of a phase>

指定具有溶解度范围的相的名称。

New highest composition set number /2/: <#>

缺省值通常将是比当前值高的值。每相最初有一个成分组。若给出较低的值，成分组将被删除。不能取走第一个成分组。

出现以下消息来显示要求用户为成分组#（2，3，…）指定成分：

Give for composition set #

Major constituent(s) for sublattice 1: /XX/: <YY>

给出每个亚点阵中主组元（YY）。因为具有溶解度范围的相对每个成分组有不同主组元，当计算平衡时，这可能简化给出开始值。

若主组元没有指定主组元，相中每个亚点阵，有时甚至是第一成分组的所有亚点阵将重复这个问题。

Ø SET_MAJOR_CONSTITUENT

这个给出一个选项来设定溶解度范围中成分组的主组元。当用 SET_MISCIBILITY_GAP 选项创建一个新成分组时，通常指定主组元，而对第一个成分组，使用 SET_MISCIBILITY_GAP 选项之前可能需要此选项。

Phase name: <name of a phase>

当创建它们时，成分组数（#）缺省值通常为/1/，其它成分将给出主组元。每相最初有一个成分组。

Major constituent(s) for sublattice 1: /XX/: <YY>

给出每个亚点阵中主组元（YY）。因为具有溶解度范围的相对每个成分组有不同主组元，当计算平衡时，这可能简化给出开始值。

相中每个亚点阵将重复这个问题。

Ø MISC_GAP_TEST_INTERVAL

混溶裂隙测试已经添加到所有计算中。这在征程计算平衡以及 STEP 和 MAP 中都起作用。通常数据库将为一相中可能的混溶裂隙创建所有必要的成分组，而用户也可输入这些，间其它的 SPECIAL_OPTION 选项。测试将尝试所有成分组的却省成分，若此成分组可能存在稳定或亚稳定具有来自该相其它成分组的不同成分则计算之。若成功意味着那一个位于稳定或亚稳定混溶裂隙范围内。若所有成分组有不同的成分，测试将跳过，否则，测试的每相有以条消息。在一些后来的版本中此消息将可能抑制。

Miscibility gap test freqeuncy /5/: <#>

这个非常难使用的命令对控制 STEP 和 MAP 过程中混溶裂隙测试是有用的。缺省时每个第 5 个计算要进行一次测试，若而 MAP 或 STEP 有问题时，用户可用此选项将其改变位其它数值号#。

Ø SET_PHASE_ADDITION

一些情况下对在 Gibbs 能中添加常数贡献感兴趣。这当然总是在 Gibbs 能模块中完成，如果添加相对于平衡的常数如应变能或曲面界面，可以更方便地使这个量与平衡有关而与热力学数据无关。在 SPECIAL_OPTIONS 命令中已经添加了量各选项，即 SET_PHASE_ADDITION 和 LIST_PHASE_ADDITION。

用户可以给出一个添加到相的 Gibbs 能的值，该值为 J/mol 相的化学式单位

Phase name: <name of a phase>

指定具有添加的相的名称。

Addition to G per mol formula unit: <xxxxx>

给出的值<xxxxx>将添加到相的 Gibbs 能中，表示晶核形成势垒、表面张力、弹性能或无论什么。注意，与成分、温度或压力无关。

Ø LIST_PHASE_ADDITION

设定为对所有相 Gibbs 能 G_m(J/mol 化学式单位)的附加贡献的值在当前计算的平衡处列出。

Ø SET_BREAK_CONDITION

可设定终止 STEP 命令的条件。

Break Condition: <a break condition>

用户可指定达到轴的末端之前造成 STEP 计算终止的中断条件。中断条件看起来象 NP(LIQ)! 0.001 or W(FCC，CR)? .13 or REST=1，其中 REST 为用户定义的函数或变量。

Ø SET_PRESENT_PHASE

用此选项指定的相在执行 MAP 命令过程中计算的所有平衡处必须是稳定的。将三元系中单变

量线限制于液相面上是一种方便的方法。通常中央的计算将有量各成分轴和一个温度轴，同时绘出所有单变量线以及三个固相之间的线。若目前只设定了液相则绘制具有液相的单变量线。

Phase name: <name of phase>

指定所有计算的平衡处应出现的相的名称。

Ø OUTPUT_AT_MAP_AND_STEP

正常地，在 MAP 或 STEP 计算过程中屏幕给出的信息是被压缩的，只显示绘图或步进计算的每个相集合的最初少数值。然而，若希望在一个长列表中看 MAP 或 STEP 计算的细节，可设定这个特定选项。

On? /Y/: <Y or N>

用户可回答 Y（是）或 N（不）。缺省为 Y 切换到所有后续 MAP 或 STEP 计算过程中大范围的列表。回答 N，列表设回正常。

Ø T-ZERO TEMPERATURE

此特定选项计算两个特定项有相同 Gibbs 能的温度，即所谓的 T_0 温度。在进行这个特定选项计算之前必须计算评价温度处的平衡，然而，没有必要获得一个或两个目标相都稳定的平衡。

Name of first phase: <phase A>

Name of second phase: <phase B>

在这两个提示处，必须给出计算 T_0 温度（Gibbs 能相等处）的相 A 和 B 的名称。

若已经成功计算了两个特定相之间的 T_0 温度，屏幕上将出现下面两条消息，如

The T0 temperature is 840.82 K

Note: LIST-EQUILIBRIUM is not relevant

第一条消息显示计算的两个特定相之间的 T_0 温度。第二条消息显示在这个特定选项计算之后 LIST-EQUILIBRIUM 命令是不相关的，不列出 T_0 温度处体系的平衡。

Ø PARAEQUILIBRIUM

这个特定选项计算具有一个间隙组元的体系重量个特定相之间的仲平衡。注意，目前只有 C 被考虑为间隙组元，在 TCC 版本 P 中已被缺省设定。在进行这个选项计算之前，必须计算全部成分的平衡，然而，没有必要获得一个或两个目标相都稳定的平衡。

Name of first phase: <phase A>

Name of second phase: <phase B>

在这两个提示处，必须给出计算仲平衡的相 A 和 B 的名称。

若已经成功计算了两个特定相之间的仲平衡，屏幕上将出现下面消息，如

Interstitional component assumed to be C with U(C)=5.0251256E-03

NP(BCC)= 0.2528 with U(BCC, C)= 2.4330364E-05

NP(FCC)= 0.7472 with U(FCC, C)= 6.7173306E-03

Note: LIST-TEMPERAURE is not relevant

第一行显示体系中间隙组元 C 的全部 u-分数。第二行和第三行分别列出了相 A（此时为 BCC）和相 B（为 FCC）的以摩尔百分数[NP(phase)]表使的相的量和以 u-分数表示的特定相中间隙组元 C 的的含量。最后一行表示这个特定选相计算之后 LIST-EQUILIBRIUM 命令是不相关的，不列出当前条件体系的仲平衡态。

Ø STABILITY_CHECK

在多元系一些成分范围内，经常发生不稳定相区位于混溶裂隙内。稳定性极限[所谓的 **spinodal curve** 或简称 **spinodal**（旋节线）]可能不容易找到。在旋节线成分内的体系相对成分波动是热力学不稳定的，体系可经理所谓的旋节分解（**spinodal decomposition**）（即分解为具有量

个稳定成分的混合区，各在混溶裂隙的一侧）。

从 TCC 版本 P 起，这个特定选项使自动检查所有后续单点平衡和 MAP/STEP 计算中稳定项与不稳定相的内在稳定性成为可能。因此可找出在后续计算中相是否有旋节分解。若在计算中有位于混溶裂隙内的不稳定项，则给出警告，所以用户将悬挂不稳定相，或使用 FORCED 自动相组成开始值（即 SET_ALL_START_VALUE FORCE 命令序列），或创建其它成分组；若知道在当前计算中无论如何将不形成不稳定项，则用户也可简单地忽略警告消息。

Stability check on? /Y/: <Y or N>

用户可回答 Y（是）或 N（不）。缺省 Y 切换到单点平衡和 MAP/STEP 计算过程中自动稳定性检查。回答 N，在各种计算中将不检查稳定性。

Check also for unstable phases? /Y/: <Y or N)

若已经切换到自动稳定性检查选相（在最后提示中），用户可选择是否希望也检查不稳定相的稳定性。缺省为 Y，结果，若发现单点平衡和 MAP/STEP 计算过程中稳定相位于混溶裂隙内，警告消息将通知用户在计算设置中由选择地进行一些必要的调整（如悬挂不稳定项，或用 S_A_S_V F 命令序列使用 FORCED 自动相组元开始值，或创建其它成分组等）。回答 N，稳定相检查仅施加到体系的稳定相上。

Ø NEVER_ADJUST_MINIMUM_Y

实用此特定选项，后续单点平衡和 MAP/STEP 计算中物种的最小分数将永久设定为可能的最低值（如 PC linux 上 1.00E-31）。即使有收敛问题，此特定选项将不允许自动调整数值极限，除非后来使用了 SET_NUMERICAL_LIMITS 命令。

Ø NONE

这意味着在后续单点平衡和 MAP/STEP 计算中取走以前设定的任何特定选相。

注意：在 TCC 版本 P 中，若在由 SPECIAL_OPTION 命令序列指导特定选项计算的任何阶段（除了已经切换到特定选项 NEVER_ADJUST_MINIMUM_Y 之外），寻找稳定溶体过程中有收敛问题，屏幕上将出现以下消息：

Convergence problem, increasing smallest site-fraction from 1.00E-30 to hardware precision 2.00E-14.
You can restore using SET-NUMERICAL-LIMITS.

预示着当前 POLY3 工作区中最小的位置分数已经自动从 1.00E-30 提高到依赖硬盘的精度（在 PC Linux 下为 2.00E-14）。对于当前 TC 运行中其它后续 POLY3 计算，可使用这个 SET-NUMERICAL-LIMITS 命令来存储或重新设置最小位置分数为以前的或其它优先值，以及重新设置其同数值极限。（见 8.11.11 节上 SET_NUMERICAL_LIMITS 命令

8.12 水溶液

p242-p247(p225-230)

8.13 排除故障

8.13.1 第一步

当计算收敛失败时，首先条件设定是否合理。这可不是微不足道的，推荐下列检查。

8.13.1.1 检查条件

第一次计算进使用的温度、压力和全部量或成分分数上的条件。若使用活度或部分 Gibbs 能上的条件，则确保其值是合理的（检查参考态！）。注意 W 和 X 是值量（重量）分数和摩尔分数，不是百分数！分数的总和不能超过 1，程序不检查此项，只是收敛失败！

注意，若在组分分数的总量上有条件，应当用条件 N=1 明确给出组分分数的量（即体系接受于 1 摩尔组分）。注意，如只有“质量平衡”条件，意味着体系是封闭的。

8.13.1.2 简化体系

如使用一相中一个组分的分数条件，在第一次计算中尝试用总成分的条件来替代（若具有分数的相不稳定，则这个条件给出奇怪的结果）。当已经收敛同时相的确稳定时，可变回相分数条件。

8.13.1.3 相

一些条件是同样的，尽管看起来似乎不是如此。当然将 C 的活度设定为 1 和 C 的偏 Gibbs 能设第为 0 是同一回事，但不明显是，将石墨的状态改变固定也是相同的事情。(所有这些条件要求 C 将当前温度下的石墨作为参考态)。注意，在 SGTE 溶体和物质数据库中缺省的参考态是 298K 和 1bar 下的稳定态。即使与石墨平衡，使用这个参考态的 C 高温下其活度将总是低于 1。但是，不必要每个组分都有条件。C 的量和活度都有条件是完全合法的。

8.13.1.4 零分数

通常不使用组分的分数为零的条件。元素不作为组分的少数情况才其作用。应使用命令 CHANGE_STATUS COMP 以便悬挂组分来替代。然而除元素之外 CHANGE_STATUS 对组分不总是起适当的作用。

8.13.2 第二步

若一检查并重复检查了条件，可尝试 SET_ALL_START_VALUE F 命令。选项 F 代表力，通过此命令即使一些相时稳定的，程序将设定自动开始值。给出其它 C_S 命令。

若这样不成功，则在给出新的 C_S 命令之前必须明确提供手工开始值。若对自动开始值的提问回答 N，此命令将首先提问 T 和 P 的开始值，除非它们已被设定为条件。其次，若相是稳定的，将对所有输入相提问。

初始系列稳定相的选择对收敛通常是最重要的，特别是当一些相不容解所有组元的时候。计算总是失败除非初始系列稳定相可跨越成分空间。通常这不是大问题，因为气相或液相通常存在于整个成分空间，假定只有气相或只有液相，将总是能够开始迭代循环。

命令也将询问可变成分的相的主组元（constituent）。对这个问题有几种回答（当气温这个问题时通过一个?来显示）。给出*将设定缺省的主组元（通常是良好选择）。

给出$，改变当前组成（constitution），而给出 NONE，程序将询问每个组元（constituent）的位置分数。相组成（constitution）通常没有稳定相初始系列重要，除非有混溶裂隙。若有混溶裂隙，则必须输入成分组为稳定的，给出混溶裂隙两侧的初始成分。

8.13.3 第三步

如其它的都失败，必须悬挂除了一相以外的所有相。这应是认为占优势的一个，但也有例外。若计算低温下具有化学计量比相的平衡，程序可能难于找到稳定相组。即使在最终平衡处气相不时稳定的，此时悬挂所有的相而仅有输入的气相可能是有利的（假定气相溶解所有组分）。若其能溶解所有组分同时条件合理，仅有气相的计算必须收敛。当计算收敛时，可用下面的命令将各相设定回潜在的：

```
C-S P *S=D
C-E
L-ST P
```

*S 意思是所有相，=D 意思是它们被设定为潜在的。之后一线的 C-E 给出 L-ST P 命令，这将按减小驱动力的顺序显示相。要成为稳定的相有正的驱动力。尝试将具有最高正值的相设定回到以一摩尔量的输入。

```
C-S P <phase>=E 1
C-E
L-ST P
```

这也将收敛。若不收敛，<phase>的数据中可能有错误。新的 L-ST P 命令将显示现在哪个相有最高驱动力。将这个改变为输入并连续这样做直到所有潜在相有负的驱动力。每次成功计算之后保存结果。注意，当添加新相时已经设定输入的一些相可变成不稳定的。接着将所有潜在相社回以零量输入并已经计算第一次平衡。**不要忘记在文件上保存这个！**

更易出故障的的情况是，用 SLAG 数据库的计算。在此数据库中，气相仅溶解 O_2，SLAG 相仅存在于高氧含量中，FE_LIQUID 相仅存在于低氧含量中。因此，SLAG 和 FE_LIQUID 相在初始平衡处必须稳定，FE_LIQUID 相在 Fe 中一定高。在此情况下，推荐使用 SLAG 数据库实例中显示的特殊策略（即

Thermo-Calc Examples Book 中的例 10）

8.14 频繁提问的问题

8.14.1 程序中为什么只得到半行？

回答：当应使用 SET_DIAGRAM_AXIS X MOLE_FRACTION <element>时，使用了命令 SET_ DIAGRAM_ AXIS X X<element>！

解释：注意 MOLE-FRACTION、MOLE-PERCENT、WEIGHT-FRACTION 或 WEIGHT-PERCENT 都具有同样的表现行为。原则上，解释非常简单。当有“平面内的结线”时，在后处理其中必须使用 MOLE-FRACTION 作为轴变量，以便得到绘制的每个结线的成分。绘图变量 MOLE-FRACTION 意味着得到以绘图的所有稳定相的成分。若使用 X(element)或 W(element)，因为 X(element)的含义，将只能绘制<element>的总成分。

若已经计算了等值图，无论使用什么作为轴变量，程序必须计算所有的线。只有平面内有结线时（在二元或三元系），才有关系。

使用这个可做很多事情。原则上在 MAP 命令之后应使用 MOLE-FRACTION 而在 STEP 命令之后应使用 X(element)。但是有时也可对 STEP 使用 MOLE-FRACTION，即使总称分为常数！有时在 MAP 命令之后应使用 X(element)或 X(phase, element)，后者是沿单变量线得到液相成分！因此在后处理器中使用什么轴应不是硬性的，而应尝试各种选项。只要记住因为*意味着所有相都时稳定的，MOLE-FRACTION 与 X(*, element)相同，而与 X(element)不同。

8.14.2 在已经保存之后为什么不能绘图？

回答：在 MAP 或 STEP 之后应决不使用 SAVE 命令，因为实际上破坏了这些命令的结果。应在 STEP 或 MAP 之前使用 SAVE！

从版本 J 起，有更好的消息来解释在包含来自 MAP 或 STEP 的结果的文件上给出 SAVE 命令时发生什么。在 MAP 和 STEP 过程中器结果自动保存在文件上。若随后给出 SAVE 命令，将保存当前工作区但是破坏以前的结果。

8.14.3 为什么 G.T 不总是与-S 相同？

回答：熵 S 总是在恒压与固定成分下计算，而 G.T 是在当前条件下计算。

POLY 认可大量的状态变量如 G、H、S、T、N、MU、AC 等，可使用这些状态变量作为条件或用命令如

SHOW S

来获得这些变量的值。

这个命令对恒压和等成分出 Gibbs 能对温度计算偏导的整个体系给出熵。也可使用标准后缀如表示“每摩尔”的 M、“每克”的 W。

而 POLY 也提供生成这些状态变量的函数的可能性，特别是使用取由点“.”表示的偏微分的工具。因此可用命令

SHOW G.T

获得熵（的负数）。

可仅有一个点“.”。因此 G.T.T 是不合法的，但是可用-S.T 来代替。

但是若 G.T 不同于-S 时不要惊讶，因为这个导数是针对当前条件计算的。如有活度或固定的相等条件，则意味着没有固定的成分。

8.14.4 如何获得组元偏焓

回答：必须输入就相这里描述那样的状态变量表达式。

应知道组元的偏 Gibbs 能，如对于 Fe 可有以下命令获得

SHOW MUR(FE)

也应知道偏熵为偏 Gibbs 能相对温度的求导的负值，即“S(FE)”=-MUR(FE).T。然而，不能使用命令 SHOW S(FE)，因为中态变量仅可取相名作为讨论点。因此 S(LIQUID)是合法的，而 S(FE)

是不合法的。获得偏熵（的负值）的唯一方式是使用命令：

ENTER VARIABLE HFE = MUR(FE)-t*MUR(FE).T;

SHOW HFE

注意，在 SHOW 之后不能给出一个表达式，必须是单个变量或符号。应输入 HFF 为 VARIABLE 而不是 FUNCTION 的理由是导数 MUR.T 的计算可能有不相要的次要的影响。

8.14.5 为什么 H(LIQUID) 是零而 HM(LIQUID)不是零

回答：H 依赖于量，HM 规范化为 1 摩尔。

H 的值依赖于体系的大小或相的量。若在计算中已设定 N=1 并获得 H 值，则改变 N=2 并计算的值将加倍。当要特定相的焓而不是体系的焓时同样如此。H(LIQUID)为液相当前量的焓。若没有当前液相，或其量为零，则 H(LIQUID)也为为零。若询问规范化的量，如 HM，则这个值独立于当前量，因为其值是一摩尔组元的值。

8.14.6 即使石墨是稳定的为什么碳活度小于 1？

回答：考虑一下参考态。

组元的化学势和活度必须总有一个参考态。在 LIST_EQUILIBRIUM 命令中这个状态称作“缺省”，因为不同数据库中参考态不同。

在 KP 和 TCFE 数据库中，每个元素以选定相为参考态，该相由零个热力学性质。对于碳，参考相为石墨，而石墨的活度在所有温度下将为 1。

在 SGTE 数据库和大多数其它数据库中，参考态为 298.15K 和 1bar 下的选定相。这意味着只有在 298.15K 和 1bar 下活度为 1，除非用命令 SET_REFERENCE_STATE 重新定义参考态。此命令取四个讨论点，即组元、相、温度和压力。可能给出*作为对温度问题的回答，这显示了无论哪一种参考态均为当前温度。例如：

SET REFERENCE STATE C GRAPHITE * 1E5

SHOW ACR(C)

注意，为了获得相对于定义参考态的活度，必须给状态变量 AC 添加后缀 R。命令 SHOW ACR©将不受参考态的改变而变化，不改变 LIST_EQUILIBRIUM 的值。以后版本将改变。

8.14.7 如何获得过剩 Gibbs 能？

回答：没有办法从 POLY 中获得过剩 Gibbs 能，因为这是与模型有关的量。

可获得混合 Gibbs 能，对置换规则溶体模型是相同的。为了得到三元系 A-B-C 中液相混合焓给出以下命令：

SET_REFERENCE_STATE A LIQUID * 1E5

SET_REFERENCE_STATE B LIQUID * 1E5

SET_REFERENCE_STATE C LIQUID * 1E5

SHOW HMR(LIQUID)

后缀 R 要求用户定义应使用哪个参考态。但是若有在两个或多个亚点阵上混合的亚点阵，混合 Gibbs 能不同于过剩 Gibbs 能。

8.14.8 当得到交叉结线而不是混溶裂隙时什么是错的？

回答：相图上交叉结线是混溶裂隙的表征。然而，必须事先告知 Thermo-Calc 你知道或猜测特定相中存在混溶裂隙。用 POLY 命令 SPECIAL_OPTION（带有 SET_MISCIBILITY_GAP 选项）或 GES 命令 AMEND_PHASE_DESCRIPTION（带有 COMPOSITION_SET 选项）来完成（这个告知工作），其中对一相给处量个或更多成分组。接着开始计算混溶裂隙稳定的位置和使用命令 SET_ALL_START_VALUABLES 命令来使成分组都稳定，但具有不同的初始成分。

8.14.9 怎么能直接计算最大混溶裂隙？

回答：不用 Thermo-Calc

只能计算任意封闭。这不同于通过设定两相成分相等可直接计算的适合的转变。
注意：这个 FAQ（频繁提问的问题）列表将不定期更新。请尽快访问 TCSAB 网页（www.thermocal.com）来获得修订版。

第 9 部分 后处理模块（POST）

9.1 引言

在 Thermo-Calc 计算或 DICTRA 模拟之后，在后处理器即 POST 模块⇔中处理其结果。已经开发了相图、性质图、扩散外形以及多种类型的用户希望从 Thermo-Calc 计算或 DICTRA 模拟中得到的图形的各种表示方法。POST 模块通常用特定的 POLY 或 DICTRA 命令来监控，而不是登录模块（即 GOTO <module name>）的正常方法来监控，但是有时自动对接，如使用 TAB 模块中的 TABULATE_REACTION 或 TABULATE_SUBSTANCE 命令，或使用 POLY 模块中的 DEFINE_DIAGRAM 命令，或通过一些高级模块（若 BIN、TERN、POT、SCHEIL 和 POURBAIX）。

有了这个独特的模块，用户可很容易定义各种图，包括各种图的类型、轴变量、轴文本等。正常地，从一个 Thermo-Calc 计算或 DICTRA 模拟，可产生多个图来表示计算体系中各种量之间的内在关系。一些特定 POLY 或 DICTRA 命令（如 DEFINE_DIAGRAM）以及一些高级的易于使用的模块（如 BIN、TERN、POT、SCHEIL 和 POURBAIX），在 MAP 或 STEP 计算之后将自动定义第一个图。可选择任意状态变量或任何输入符号（函数或变量）作为 X/Y 轴。在 POST 模块中，也可定义希望的变，将基于 POLY3 或 DICTRA 工作区的已有计算结果来评价，并将其选定为 X/Y 轴。从 TCC 版本 P 起，就有可能创建 vrml（虚拟现实造型语言）图形文件以变获得文件以便产生 3D 图。

当已绘制图时，可进一步指定定义高标准图的各种出现的参数如曲线标注选项、图题和次标题、图尺寸、轴长、轴类型、轴 tic 类型、结线状态、自动或手工标尺和缩放、在相界和相区半自动或手工标注、图形格式、文本字体、颜色、光栅绘图等。计算结果也可在 POST 模块终止表，而不必要进入 TAB 模块。

用户可容易地在绘制的图上添加实验数据。也可将条件保存为文本文件，该文件可编辑和用作试验文件来和并导其它图上或作为 PARROT 模块估价的设置文件的一部分。相可悬挂或存储在绘制的图中。组元的参考态也可为结果图来修正。

POST 模块中有如下命令：

```
POST:?
ADD_LABLE_TEXT                PRINT_DIAGRA                SET_LABLE_CURVE_OPTION
APPEND_EXPERIMENTAL_DATA      QUICK_EXPERIMENTAL_PLOT     SET_PLOT_FORMAT
BACK                          REINITIATE_PLOT_SETTINGS    SET_PLOT_OPTION
CREATE_3D_PLOTFILE            RESTORE_PHASE_IN_PLOT       SET_PLOT_SIZE
DUMP-DIAGRAM                  SET_AXIS_LENGTH             SET_PREFIX_SCALING
ENTER_SYMBOL                  SET_AXIS_PLOT_STATUS        SET_PASTER_STATUS
EXIT                          SET_AXIS_TEXT_STATUS        SET_REFERENCE_STATE
HELP                          SET_AXIS_TYPE               SET_SCALING_STATUS
LIST_PLOT_SETTINGS            SET_COLOR                   SET_TIC_TYPE
LIST_SYMBOLS                  SET-CORNER_TEXT             SET_TIELING_STATUS
MAKE_EXPERIMENTAL_DATAFI      SET_DIAGRAM_AXIS            SET_TITLE
MODIFY_LABEL_TEXT             SET_DIAGRAM_TYPE            SET_TRUE_MANUAL_SCALING
PATCH_WORKSPACE               SET_FONT                    SUSPEND_PHASE_IN_PLOT
PLOT_DIAGRAM                  SET_INTERACTIVE_MODE        TABULATE
POST:
```

注意，DUMP_DIAGRAM 和 PRINT_DIAGRAM 命令值在 Windows 环境下有效。

9.2 一般命令

9.2.1 HELP

描述：此命令列出可以使用的命令或给出特定命令的解释。

提要 1：HELP <command name>

提要 2：HELP

接着提示：COMMAND: <command name>

选项：command name – 要获得帮助的命令名称（POST 命令之一）。

注意：没有键入命令名而按<RETURN>将列出所有 POST 命令。

指定唯一的命令将在屏幕上打印出该命令的解释（通常是与用户指导书上相同的文本）。

键入不是唯一的命令缩写将列出所有匹配的命令。通过键入唯一的缩写或完全命令名可获得希望的命令的信息。

9.2.2 BACK

描述：此命令给出回到最近模块的控制。从 POST 模块，BACK 总是回到 POLY 模块。然而，若 POST 模块已被 TAB 模块访问，当回到 TAB 模块。

提要：BACK

9.2.3 EXIT

描述：此命令中值程序并回到操作系统。除非执行了 SAVE 命令（在 GES、POLY3 或 PARROT 模块），否则所有数据和结果将丢失。

提要：EXIT

9.3 重要命令

9.3.1 SET_DIAGRAM_AXIS

描述：用户可指定绘图或列表的轴变量。为了能够绘出图必须指定至少一个轴变量（X 和 Y）。在 Thermo-Calc 中对于图可指定三个轴变量（X、Y 和 Z）。

注意，绘图中的轴变两颗不同于 mapping 中的轴数。

也请注意一个难题，既是对经常用户也可能误解。若要用平面内结线绘制相图，则成分轴必须是“摩尔分数”、“重量分数”或两者的组合。即使是计算相图是要使用的，也决不能使用稳定变量“x(c)”，因为那样将给出两相区的一侧。原因复杂难以解释。足以显示“摩尔分数”与稳定变量“x(*, c)”相同。和

当要绘制 STEP 计算结果图并以成分作轴变量时，正常应使用“x(c)”而不是“摩尔分数”。

还有，当绘制结线不在平面内的相图时，“摩尔分数”和“x(c)”是等同的。

提要 1：SET_DIAGRAM_AXIS <axis name> <variable name & specification>

提要 2：SET_DIAGRAM_AXIS

接着提示：Axis: (X, Y or Z): <axis name>

用户必须指定用变量设定哪个轴（X 或 Y 或 Z）。

Variable type: <variable name>

这里指定选定轴的变量。

有效变量列出如下：

- 基本状态变量

TEMPERATURE-KELVIN	温度（°C）
TEMPERATURE-CELSIUS	温度（K）
PRESSURE	压力（pa）
ACTIVITY	组分的活度
MOLE-FRACTION	组分的
MOLE-PERCENT	组分的

WEIGHT-FRACTION　　组分的
WEIGHT-PERCENT　　组分的

- Ø 包括具有统配符的任何有效的状态变量，如 x(*, component)。
- Ø 任何输入的函数
- Ø 任何输入的表。在此情况下也询问列或列范围

For component: <component name>

要绘制组分的活度、摩尔或重量分数或百分数的图，必须使用组分名。

Column number: <column number(s)>

指定要绘制到以前指定轴上的选定表的 column number(s)。

例：

1	第一列
2，3	2 和 3 列
2，3 >5	2、3 列和 5 列以上的各列
*	所有列

注意：轴必须准确具有同样列数，或者一个轴必须只有一列。在第一种情况下，绘图的列将逐一批配，后一种情况，一个轴上的所有列将相对于单列绘图。例如，可使一轴为温度，每相的量为另一轴。每相的量是以摩尔分数表示的状态变量 NP(*)，或以相质量分数表示的 BPW(*)。

特别注意：Automatic diagram axis:

POST 模块可设定与 MAP 命令中使用的相同的“ automatic diagram axis ”，预示着 Thermo-Calc 和 DICTRA 的使用，但此选项在 Thermo-Calc 中视觉上已经不能得到了，因为用户可以相信除了计算时使用的之外不能设定其它轴。计算后方便地将任何变量设定为图轴是 Thermo-Calc 的最有力特性之一。

然而，从版本 M 起，在 Thermo-Calc 中已经实现了这个选项，而在 MAP 计算之后用户不需要指定这个选项。按这种方式，Thermo-Calc 初学者也可避免棘手问题来理解 x(z)、x(*, z)和“ z 的摩尔分数 ”之间的差异。

若状态变量 x(z)已经用于 MAP，接着 z 组分的摩尔分数将用于图轴；若势或一些状态已经用作图轴。

注意，在 STEP 计算之后，自动图轴将不设定，因为计算中使用的仅是一个轴。

9.3.2 SET_DIAGRAM_TYPE

描述：用此命令，用户可选择图的类型为正交绘图或三角绘图（Gibbs 三角，特别是三元系）。缺省图轴是正交轴。

对三元或赝三元系相图，通常需要绘制等温断面为三角图。若希望这样做，将移走受 X-和 Y-轴的端点连线限制的位于区外所有线。

注意，为了给四面体图创建 3D 图文件（以 VRML 格式，*.WRL），应以序列 SET_DIAGRAM_TYPE N Y 方式首先使用此命令，见 9.7 节。

提要：SET_DIAGRAM_TYPE

接着提示：TRIANGULAR DIAGRAM (Y or N) /N/:　(Y or N)

用户可用回答 Y（是）来指定三角形图。否则（按<RERURN>来接受 N），将设定正交轴，此命令被终止。缺省状态这样的正交图上两个轴有（几乎）相同尺度。

CREATE TETRAHEDRON WRML FILE (Y or N) /N/:　(Y or N)

若（在上面提示下）不选三角形图，用户应回答 Y 以防随后使用 CREATE_3D_PLOTFILE 命令时使用四面体图来产生 VRML(*.WRL)文件。

PLOT 3:RD AXIS (Y or N) /N/: (Y or N)

若已选三角形图，用户可指定是否有绘制连接 X 和 Y 轴终点的第三个轴（这里回答 Y）。

CLIP ALONG 3:RD AXIS (Y or N) /N/: (Y or N)

若已选三角形图，通过在此提示下回答 Y 来移走连接 X 和 Y 轴终点的线所线值的区以外的所有线。

9.3.3 SET_LABEL_CORVE_OPTION

描述：此命令可能通过使每条曲线带有的数字来识别后处理器中所绘的曲线，然后在图旁列出这些数字的含义。注意，在一些情况下可能有大量的数字，如果如此，使用 SET_FONT 命令并减少字体尺寸，通常 0.2 就足够了。从 TCC 版本 P 起已经增加了两个选项（有颜色的标注）E 和 F。

提要 1：SET_LABEL_CURVE_OPTION <curve option>

提要 2：SET_LABEL_CURVE_OPTION

接着提示：CURVE_LABEL_OPTION （A, B, C, D, E, F OR N）/N/: <option>

THE OPTION MEANS

A LIST STABLE PHASES ALONG LINE

B AS A BUT CURVE WITH SAME FIX PHASE HAVE SAME NUMBER

C LIST AXIS QUANLITIES

D AS C BUT CURVE WITH SAME QUANLITIES HAVE SAME NUMBER

E AS B WITH CHANGING COLORS

F AS D WITH CHANGING COLORS

N NO LABELS

此问题含义有点模糊，而对相图（在 MAP 命令之后）最好用选项 B 或 E，对性质图（STEP 命令之后）最好用选项 D 或 F。感兴趣的人可尝试选项 A 或 B。注意，选项 B 或 E 列出沿每条曲线的固定的相，而选项 D 或 F 给出沿每条曲线使用的轴变量。E 和 F 都为不同曲线提供各式各样的颜色。选项 N（无）不标注和列出所有曲线。

例如，若已经使用 T 作为 STEP 命令中的轴变量。然后在 Y 轴上绘出相的量（用命令 SET_DIAGRAM_AXIS Y NP(*)），X 轴上为 T-C，接着列表中可有如下的线：

1: T-273.15, NP(LIQUID)

2: T-273.15, NP(FCC_AL)

这意味着对于曲线 1，X 轴是 T-273.15（所有的曲线相同）而 NP(LIQUID)在 Y 轴上。曲线 2 有同样的 X 轴，但 NP(FCC_AL)在 Y 轴上。

9.3.4 ADD_LABEL_TEXT

描述：使用此命令，用户可在项图或性质图中的一个区域中添加文本。从特定坐标开始写标注。随意地，也可以让程序先计算特定坐标处的平衡然后标注出稳定相名来自动添加文本。请注意，这种可选的计算在一些情况下可能失败。对某些轴如熵、焓、pH、Eh 等可能不会自动添加标注。

提要：ADD_LABEL-TEXT

接着提示：Give X coordinate in axis units: <value of the X coordinate>

指定开始标注的 X 坐标的值。

Give Y coordinate in axis units: <value of the X coondinate>

指定开始标注的 Y 坐标的值。

Automatic phase labels? /Y/: <Y or N>

若对这个问题回答 Y，程序将在给定坐标除计算平衡并产生具有稳定相名的标注。然而，自动计算程序只对 POLY 模块中以两个轴绘制的相图起作用，有时可能失败，特别对复杂不均匀交互作用体系，在此情况下，屏幕上将出现警告消息：

Text: <text for the label>

若对这个问题回答 N，用户可自己指定文本。

Text size: /.44/: <size for the label>

文本的最小尺寸对标注文本适合相图是必要的。若第一次访问此命令，使用添加文本过程中最近的尺寸或 0.44 给出缺省尺寸。

9.3.5 MODIFY_LABEL_TEXT

描述：此命令可以移动用 ADD_LABEL_TEXT 命令创建的标注到其它位置，或用其它文本来代替。

提要：MODIFY_LABEL_TEXT

接着提示：Which label to modify? /#/: <number of the label>

此提示之前，用 ADD_LABEL_TEXT 命令创建的所有标注将用可辨别的数列出。请标注要修改的标注数。缺省（#）为最后添加的标注。

New X coordinate: /xxx/: <new X position>

指定新的 X 位置。显示以前的 X 坐标，按 RETURN 则接受以前的 X 坐标。

New Y coordinate: /yyy/: <new Y position>

指定新的 Y 位置。显示以前的 Y 坐标，按 RETURN 则接受以前的 Y 坐标。

New text: /ABCDEFGH…/: <new labeling text>

指定新的标注文本。显示以前的标注文本，按 RETURN 则接受以前的标注文本。注意，新标注的文本不能比以前标注的文本长。

9.3.6 SET_PLOT_FORMAT

描述：使用此命令，用户可设定的图形输出格式到不同图形设备，缺省设备通常为屏幕输出（remembered with reverence!），如 X-Windows 号为 9（UNIX 或 PC Linux），MS-Windows 号为 1（PC Windows）。缺省设备值可用系统监视器中 SET_PLOT_ENVIRONMENT 命令或 TC.INI 文件来改变

提要：SET_PLOT_FORMAT

接着提示：GRAPHIC DEVICE NUMBER /#/: <number of the device>

指定图形设备号。依赖于硬盘，有不同的绘图格式（图形设备）。有一个问号“ ？ ”在线列出，如下所示。

对 UNIX 和 Linux（注意，不显示最后一列，这里给出的仅为用户作参考，当用 POLT_DIAGRAM 命令以后保存图行文当时显示缺省的扩展名）：

```
GRAPHIC DEVICE NUMBER /9/: ?
AVAILABLE GRAPHIC DEVICES:
DEVICE    1 IS Tektromix 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                p5s
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 potrait mode           p16
DEVICE   17 IS Color Postscript landscape mode         p17
```

DEVICE 11 IS HP-LaserJet II / HP-DeskJet (1Mb) large p11

对 PC Windows NY/2000?XP 和 Windows 95/98/ME（注意，不显示最后一列，这里给出的仅为用户作参考，当用 POLT_DIAGRAM 命令以后保存图行文当时显示缺省的扩展名）：

GRAPHIC DEVICE NUMBER /9/: ?

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 ps

DEVICE 5 IS Postscript portrait mode ps

DEVICE 6 IS Postscript landscape mode p6

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 potrait mode p16

DEVICE 17 IS Color Postscript landscape mode p17

DEVICE 11 IS HP-LaserJet II / HP-DeskJet (1Mb) large p11

对一些格式（如 PostScript、HP-LaserJet），可有附加的子提示询问对所选格式是（YES）否(NO)使用可用的字体，若为是（YES）则进一步指定字体类型和大小。

USE HARD COPY FONTS /YES/: <Y or N>

在 Windows NY/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 下，若已经设定了非屏幕格式（如以前图形的硬拷贝的 PostScript 字体）与 MS-Windows 格式（缺省设备 1），将提示决定是否使用各种文本的硬拷贝字体在屏幕上绘图。请注意，一些硬拷贝字体对在屏幕上随后绘制的图形可能看起来是陌生的。

USE POSTSCRIPT FONTS /YES/: <Y or N>

若设定非屏幕格式，将提示决定在应拷贝中绘图是否使用 PostScript 字体，进一步提示选择字体号和字体大小。

SELECT FONTNUMBER /9/: <font number>

指定有效的字体号，或给出问号“？”在屏幕上列出对特定驱动器来说所有的字体。

注意，各种各是的字体通常是不同的，作为局里，下面列出了对 PostScript 格式有效的字体（设备 5 和 6）：

USE POSTSCRIPT FONTS /YES/: y

SELECT FONTNUMBER /9/: ?

AVAILABLE FONTS:

FONT 1 IS AvanGarde-Book

FONT 2 IS AvanGarde-BookOblique

……

FONT 43 IS ZapfDingbats

FONT SIZE /.35833/: <font size>

指定特定字体的相对大小。

举例： **SET_PLOT_FORMAT**

CURRENT DEVICE: X-windows

GRAPHIC DEVICE NUMBER /9/: **5**

NEW DEVICE: Postscript portrait mode

USE POSTSCRIPT FONT /YES/: **y**

SELECT FONTNUMBER /9/: **27**

NEW FONT: Times-Bold

FONT SIZE /.35833/: **0.32**

9.3.7 PLOT_DIAGRAM

描述：使用由 SET_PLOT_FORMAT 命令设定的绘图格式在特定图形设备上绘制出图形信息。注意，必须事先设定图轴。

从版本 N 起，此命令的功能已被分裂成两个

- 一个为正常屏幕显示和文件保存保留在 PLOT_DIAGRAM 中；
- 另一个为直接硬拷贝打印在 PRINT_DIAGRAM 命令（在 PC Windows 环境）中执行。

因此，由此命令，可在屏幕上绘图（若使用缺省的图形设备），或在希望的文件中保存图。然而，当在 Windows NY/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 下在屏幕上绘图时，也可直接将图打印到联接的打印机上或将图保存为 EMF 文件，然后可直接插入到温当中（见下面）。

提要 1：PLOT_DIAGRAM <name of a file or RETURN for SCREEN>

提要 1：PLOT_DIAGRAM

接着提示：OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/: <name of a file or RETURN>

指定所希望的文件名（注意，在 Linux/UNIX 下提示为“ PLOTFILE /SCREEN/: ”）。从而，具有所选图形格式适当的扩展名的文件（以前用 SET_PLOT_FORMAT 命令设定）将保存在当前工作目录下。若没有给出文件的扩展名，将给文件名以缺省的扩展名（如 9.3.5 借给出的列表所示，例如，Postscript portrait/landscape 模式的“ ps ”、HPGL landscape 模式的“ P7 ”或“ p7 ”、HPGL portrait 模式的“ P8 ”或“ p8 ”等）。

若一设定了缺省设备（有命令 SET_PLOT_FORMAT），可通过按<RETURN>接受/SCREEN/来在屏幕上绘图，或通过给出一个文件名将其保存在文件上。若在文件名中没有给出扩展名，将自动给出缺省扩展名（如 Windows 上 MS-Windows 的“ P1 ”，或 UNIX/Linux 上 X-Windows 的“ p9 ”）。

重要注释：对 Thermo-Calc 的 PC Windows NY/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 版本，有一个附加的并非常有帮助的特性来帮助用户将计算的 Thermo-Calc 图输出到硬拷贝打印机或到文档。若一使用缺省的图形格式来选择所绘图型（若 SET_PLOT_FORMAT 命令中按<RETURN>为 IBM-vda 设定为 1，或根本没有访问 SET_PLOT_FORMAT 命令），屏幕上弹出 ***Thermo-Calc graph*** 窗口。点击此窗口的左上角，激活交互 *Menu*。（如图 9.1 所示）

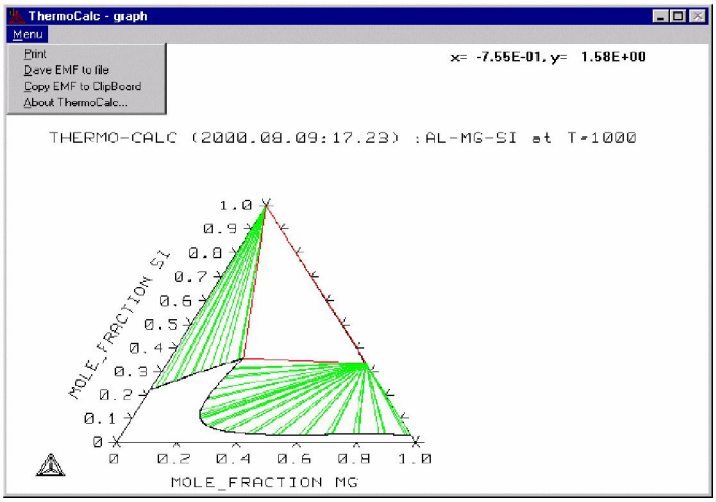


图 9.1 “ ***Thermo-Calc graph*** ”窗口：图形输出选项

从此菜单中可选择下列四个选项之一：

Ø Print　　直接在联接的打印机上打印

Ø 保存 EMF 到文件　　将 EMF（增强 Windows 元文件）图形代码保存到所期望的文件中，以后作为图片文件插入到可使用一些编辑应用软件（如 Microsoft Word、Powerpoint、Excel、CoreDraw、Adobe Illustrator 等）编辑的任何文档中

Ø Copy EMF to Clipboard　　将 EMF 图形代码拷贝到 Windows 剪贴板中，可直接粘贴到使用一些编辑应用软件编辑的任何文档中。

Ø About ThermoCalc-graph　　查看关于“ ThermoCalc-graph ”窗口的描述

9.3.8 PRINT_DIAGRAM

描述：这是立即高质量打印的非常有用的命令，只有 Windows NY/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下的 TCC 才有。在创建 ThermoCalc-graph（并主要用命令 PLOT_DIAGRAM 命令在屏幕上显示）之后，可直接使用这个新的可执行命令将图在联接的打印机上打印。

提要：PRINT_DIAGRAM

接着窗口：此命令之后弹出 ***Print***（打印）窗口（如图 9.2 所示），在其中用户可选择其优先联接的打印机，若是所期望的，则可改变打印过程的性质。

点击 ***Print*** 窗口上的 OK 钮确认选择的打印机与性质，将弹出一段时间的 ***Ghostscript*** 窗口（如图 9.3 所示），显示出力打印的百分率。在此小窗口中，可取消打印，否则，打印解释后窗口将立即消失。

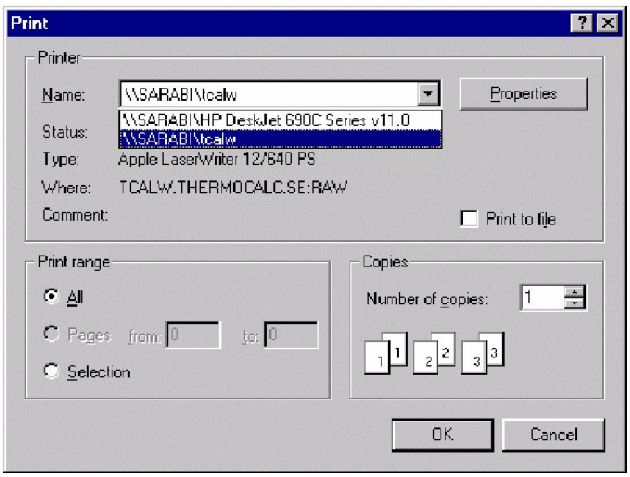


图 9.2 “ Print ”窗口：连接打印机或性质的选择

重要注释：为曲线图设定什么图形设备无关紧要，此命令将总是能够将其转换为与 Ghostscript 兼容的图形各是（如 Postscript postrait mode 或 Color Postscript postrait mode）和预选与 Postscript 相关字体（如 Helvetica 或 Times-Bold），通过它将图在联接的打印机上打印。

打印过程完成后，为转换临时设定图形设变和打印将转换回到用以前命令 SET_PLOT_FORMAT 设定以前的设备，因此用户可使用 PLOT_DIAGRAM 命令在期望的文件上保存图形。

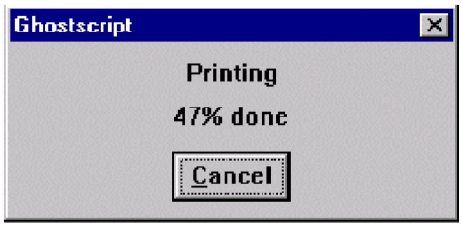


图 9.3 “ Ghostscript ”窗口：进行打印

9.3.9 DUMP_DIAGRAM

描述：这也是非常有用的命令，仅适于以平均质量的快速打印。类似于 PRINT_DIAGRAM 命令，在创建了 Thermo-Calc graph（和用 PLOT_DIAGRAM 命令在屏幕上已基本上显示）之后，可使用这个新执行的命令来保存（倾倒）图到表 9.1 列出的图性格式的文件中。

表 9.1 用于倾卸 Thermo-Calc 曲线图的主要图形格式列表

图形格式	缺省文件扩展名	适合的编辑器
PNG（轻便网络图）	.PNG	MS 照片编辑器
BMP（Windows 位图）	.BMP	MS 照片编辑器
PDF（Adobe 轻便文档文件）	.PDF	Acrobat 阅读器、CorelDraw
JPEG（文件交换格式）	.JPG	MS 照片编辑器
TIFF（标记图象文件格式）	.TIF	MS 照片编辑器

正如表中所示，保存的文件（如.PNG 格式）可用 MS 照片编辑器、Acrobat 阅读器或 CorelDraw 打开和编辑，可在联接的打印机上直接打印图。有这样的图形编辑器，Thermo-Calc 图可剪切或粘贴到其它文字/图形处理稳当中（如 Microsoft Word 或 PowerPoint 文件）。

注意，只有 Windows NY/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境下的 TCC 才有此命令，而从 PC Linux 和 UNIX 工作站的 TCC 版本 N 起，不起作用。

提要：DUMP_DIAGRAM

接着提示：OUTPUT FORMAT /PNG16/: <graphic format or RETURN>

指定要倾卸图的适当图形格式或按<RETURN>接受缺省格式（PNG16）。

RESOLUTION (LOW, MEDIUM, HIGH) /MEDIUM/: <resolution choice>

指定一种分辨率等级。缺省为中等等级。

FILE NAME: <name of a graphic file>

将弹出图 9.4 所示的 ***Save As*** 窗口。用户将在 **File name** 框中给出名称，用户可进一步指定要在 **Save in** 框保存文件时的工作目录。通常在 **Save as type** 框中的缺省文件类型是在以前提示下选定的适当图形格式之一。

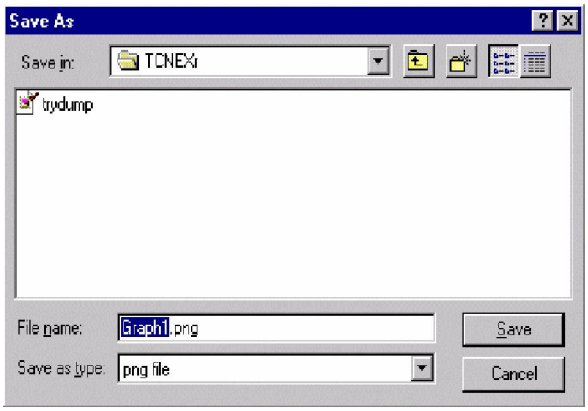


图 9.4 “ Save As ”窗口：保存倾卸的图形文件

重要注释：类似于 PRINT_DIAGRAM 命令，不论为曲线图设定什么图形设备，此命令总能将屏幕显示的图转换为选定的图形格式。

完成打印过程之后，为转换和打印临时设定的图形设备用命令 SET_PLOT_FORMAT 切换回到以前的设定，因此用户可使用 PLOT_DIAGRAM 命令在所期望的文件上保存图形。

9.3.10 SET_SCALING_STATUS

描述：当用 SET_DIAGRAM-AXIS 选定轴变量时，轴的缩放比例状态总是设定为自动缩放比例。用此命令，用户可对特定轴选择手工或自动缩放比例。若选择手工设定缩放比例，用户必须指定最大与最小值。手工缩放比例也可用于放大图中感兴趣的部分。

提要 1：SET_SCALING_STATUS <name of an axis> <Y or N> <min> <max>

提要 1：SET_SCALING_STATUS

接着提示：Axis (X, Y or Z) /N/: <Y or N>

指定要在哪个轴上设定缩放比例状态。

AUTOMATIC SCALING (Y or N) /N/: <Y or N>

可在自动（Y）和手工缩放比例（N）之间选择。如选择手工缩放比例，必须进一步指定下列参数：

MIN VALUE: <minimum value>

指定轴开始点的最小值。

MAX VALUE: <maximum value>

指定轴开始点的最大值。

9.3.11 SET_TITLE

描述：用户可指定在同一个 Thermo-Calc 运行中来自 POST 模块的所有的列表和绘图的标题。

提要 1：SET_TITLE <title>

提要 1：SET_TITLE

接着提示：TITLE: <title>

输入要出现在所有表或图输出的标题。注意，标题最长有 60 个字符。

9.3.12 LIST_PLOT_SETTINGS

描述：将在终端列出为绘图类型指定的多数参数的当前值。

提要：LIST_PLOT_SETTINGS

9.4 实验数据文件绘图命令

9.4.1 APPEND_EXPERIMENTAL_DATA

描述：此命令典型地用于将实验数据和文本添加到计算的图上。在 Thermo-Calc 程序以外依据图形语言 DATAPLOT 的语法准备的文件上放置实验数据和文本来达到这一点。

由数据产生的图片添加到来自后处理器的普通图形输出上。这样的实验数据文件可由一般文本编辑来创建。

此命令的另一个应用是，添加来自几个独立计算的图。为力这个目的，存在命令 MAKE_EXPERIMENTAL_DATAFILE（见下面），将倾卸计算的图到依照 DATAFILE 语法的文件上。借助于正常文本编辑，可一起合并多个这样的文件。记住，**在每个这样的文件中只能有一个序言段**。

提要：APPEND_EXPERIMENTAL_DATA

接着提示：USE EXPERIMENTAL DATA (Y or N) /N/: (Y or N)

指定来自实验数据文件的数据是否包含在下一次绘图中。若回答 N，将不绘制实验数据。

EXPERIMENTAL DATAFILE: <name of an experimental datafile>

指定实验数据文件名，此提示只在 Linux 和 UNIX 平台下有效。缺省的文件扩展名为“exp”。

在 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 下，屏幕上将弹出 ***Open file*** 窗口，因此可适当指定路径（在 **Look in** 框）和文件名（在 **File name** 框），如图 9.5 所示。

可改变文件类型（如 File of type 框中的 EXP）。按 **Open** 钮，程序将实验数据文件读到 PARROT 工作区。用户也可取消这个 **Open file** 窗口对话，因此不打开当前实验数据文件。

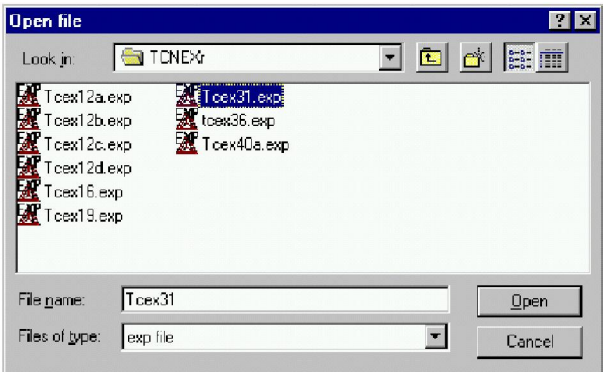


图 9.5 “Open file”窗口：打开存在的*.EXP 文件

PROLOGUE NUMBER: /0/ <prologue number>

选择要使用哪一个序言。在一个序言中，可以给出轴的缩放比例、轴文本等。注意，回答-1，给出文件上所有序言的列表；回答 0，将不附加实验数据。

DATASET NUMBER(S) /-1/: <dataset number(s)>

选定应从哪个数据序列读取数据。用豆号或空格来分开给出几个数据序列。注意，回答-1，给出文件上所有数据序列的列表；回答 0，将不附加实验数据。

9.4.2 MAKE_EXPERIMENTAL_DATAFILE

描述：此命令使用 DATAPLOT 格式在屏幕上或文件中写图形信息成为可能（见第 15 部分，DATAPLOT 图形语言）。为了合并分开的计算的两个或更多图，可用此命令在文件上写它们，并将其一起用正常文本编辑来添加它们。

提要 1：MAKE_EXPERIMENTAL_DATAFILE <name of a file or RETURN>

提要 1：MAKE_EXPERIMENTAL_DATAFILE

接着提示：OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/: <name of file or RETURN>

指定希望的文件名。列表接受/SCREEN/（按<RETURN>）。否则，这里必须给出要写图形信息的文件名。缺省的文件扩展名为“EXP”（在 PC Windows）或“exp”（在 UNIX 和 Linux）。

9.4.3 QUICK_EXPERIMENTAL_PLOT

描述：此命令类似于 APPEND_EXPERIMENTAL_DATA 命令，但当没有在 POLY3 工作区绘图信息是可使用此命令。它定义一对\设定“ X ”和“ Y ”轴标注以及给出 X 与 Y 轴的在 0.0 与 1.0 之间刻度，除非从 DATAPLOT(EXP)数据文件中读取序言。

参见 DATAPLOT 图形语言（第 15 部分）获得关于实验数据文件格式的更多信息。

提要 1：QUICK_EXPERIMENTAL_PLOT <name of an experimental data file>

提要 2：QUICK_EXPERIMENTAL_PLOT

接着提示：EXPERIMENTAL DATAFILE: <name of an experimental data file>

指定实验数据文件名，此提示仅在 Linux 和 UNIX 平台下有效。缺省文件扩展名为“ exp ”。

在 Windows NT/2000/XR 和 Windows 95/98/ME 下，屏幕上将弹出 Open file 窗口（与 APPEND_EXPERIMATAL_DATA 命令相同），因此可适当指定路径（在 **Look in** 框）和文件名（在 **File name** 框），如图 9.5 所示。

PROLOGUE NUMBER: /0/: <prologue number>

选择使用哪个序言。序言中，可给出轴的尺度、轴文本等。注意，回答-1，给出文件上所有数据序言的列表；回答 0，将不附加实验数据。

DATASET NUMBER(s) /-1/: <dataset number(s)>

选择从哪个数据序列读取数据。用豆号或空格来分开给出几个数据序列。注意，回答-1，给出文件上所有数据序列的列表；回答 0，将不附加实验数据。

9.5 其它命令

9.5.1 ENTER_SYMBOL

描述：符号是 POLY 和 POST 定义方便于用户的量很有用的。符号可以是常量、变量、焓数或表。

提要：ENTER_SYMBOL

接着提示：Constant, variable, function or table? /FUNCTION/: <keyword>

关键词可指定为常量（CONSTANT）、变量（VARIABLE）、焓数（FUNCTION）或表（TABLE）。

- CONSTANT 可只输入一次并是使用数字值的一种手段。例如，以帕斯卡为单位的 1 个大气压在命令 ENTER CONSTANT P0=101325 之后记作 P0。定义的常数可用作条件分派的值，例如，SET-COND P=P0。
- FUNCTONS 为状态变量或其它焓数的表达式。保存这些表达式，无论何时要求函数值所有函数都要求值，其原因是它们之间彼此依赖。
- VARIABLES 类似于函数，因为它们也可以是状态变量的表达式。然而，与函数相反，只当输入时或者若以 EVALUATE 命令明确命名时才求值。任何时候都可以用新的表达式输入变量，此表达式将直接求值，其值存储为变量值。定义的变量可用作 SET-CONDITION 命令的值。
- TABLES 用作列出来自 STEP 或 MAP 命令的结果。表由任意数量的状态变量、函数或变量组成。定义的表也可用在后处理器 POST 中。

注意：表与变量之间有特殊的连接。如变量用在表中，在 TABULATE 命令中或用作绘图时将对表的每行求值。

Name: <anme of the symbol>

每个符号具有以字母开始的唯一名称，并且最长由 8 个自负。若希望在一行上输入符号名和值或函数，它们必须用等号“ = ”分开，如 TC=T-273.15。否则，将出现下面的提问；注意，对这里定义的不同类型的负号（常数、函数、变量或表）将提示不同问题：

Function: <definition for a function or variable>

从状态变量表达式或其它的函数、常数或变量来求函数或变量的值。表达式为 FORTRAN 型表达式并使用+、-、*、=和**操作符（**仅为整数指数）。也使用一元函数象 LOG、LOG10、EXP、SIN、COS 和 ERF。一个表达式可在多于一行上连续写。表达式用分号“ ;” 或在下一个提示处

按<RETURN>空行而终止。

函数举例：

GM(LIQUID)	每摩尔组分液相 Gibbs 能
H.T/4.184	以卡单位的体系热容。
ACR(CR)/X(FCC, CR)	FCC 中 CR 的活度系数
T-273.15	摄氏温标温度

& <continuation of the definition for the symbol>

与符号“ & ”意味着若函数在一行写不下可以在新的一行继续写。若写完函数仅需再一次按<REUTRN>即可。

Value: <value for a constant>

常量仅需一次赋予一个数字值即可

Value or expression: <value of espression for a variable>

变量可赋予一个数字值或一个表达式。表达式应立即求值和放弃，仅保持一个数字值。这给出保存不同条件计算之间的一个值的可能性，因为对新的条件要求所有的状态变量和函数的值。

Variable(s): <variable(s) in a table>

表由一列状态变量或函数组成。从 STEP 命令中获得结果的一种方法就是通过表。

例：ENTER TABLE K=T, X(LIQ, C), X(LIQ, CR), ACR(C)

意味着称作 K 的表包含四列，即温度、液相中 C 和 CR 的摩尔分数以及 C 的活度。

若表中的温度以摄氏温标为单位，必须先给出命令 ENTER FUNCTION TC=T-273.15，然后使用标中的 TC。

& <continuation of the definition for the table>

与符号“ & ”意味着一行写不下一张表，则在新的一行继续写。若已写完表仅需再一次按<REUTRN>即可。

9.5.2 LIST_SYMBOLS

描述：对所有的常量、函数、变量与表，用此命令均可列出其定义。定义的变量将于定义的函数一起列出，而变量名将后跟一个百分号“ % ”。

提要：LIST_SYMBOLS

9.5.3 SET_AXIS_LENGTH

描述：此命令可用于改变以英寸为单位的轴的真实长度。当相对长度为 1 时轴上 tic-mark 缺省数为 10。添加此命令归因于 POST 使用的图形软件包的一些个性。每个 tic-mark 的数值与单位必须是 1、2 或 5 的倍数来获得轴的合理尺度。

提要：SET_AXIS_LENGTH

接着提示：AXIS (X, Y, or Z): <name of an axis>

用户指定哪个轴要指定长度。

AXIS LENGTH /11.5/: <new relative axis length>

用户可指定以英寸为单位的新的真实轴长。相对长度 1 对应轴上 10 个 tic-mark。

9.5.4 SET_AXIS_TEXT_STATUS

描述：此命令可用于将轴规格所给出的自动文本改变为用户给出的轴文本。

提要：SET_AXIS_TEXT_STATUS

接着提示：AXIS (X, Y or Z): <name of an axis>

用户必须指定哪个轴的状态要改变。

AUTOMATIC AXIS TEXT (Y or N) /N/: <Y or N>

用户必须指定是（Y）否（N）使用自动轴文本。若没有选择自动轴文本，将进一步提示用户输入自己的轴文本：

AXISTEXT: <desired axis text>

用户将输入自己希望的轴文本。

9.5.5 SET_AXIS_TYPE

描述：此命令是要在线性、对数和到数轴之间来改变轴类型。

提要：SET_AXIS_TYPE

接着提示：AXIS (X, Y or Z): <name of an axis>

用户必须指定哪个重要改变轴类型。

AXIS TYPE /LINEAR/: <new axis type>

指定要设定那一个新轴类型。选择 LINear(缺生)、LOGarthmic 或 INVerse。只与前三个字符有关。

9.5.6 SET_COLOR

描述：支持颜色（如 MS-Windows）或线粗细（如 X-Windows 和 HP-LaserJet）的一些设备。由此命令，可选择图上一些类型信息上不同颜色和线型。注意若选择的设备不支持颜色或线粗细时此命令失败。

此命令将产生四个后续提示（即 Text and axis、Invariant equilibria、Tie-line 和 All other lines），使用关键词和缺省选项（都在下面列出）。取决于切换的图形设备（用 SET_PLOT_FORMAT 命令）是否支持颜色或线型，POST 将自动切换适当的关键词。

提要：SET_COLOR

接着提示：Text and Axis Keyword /defaut option/: <RETURN or new option>

Invariant equilibria Keyword /defaut option/: <RETURN or new option>

Tie-line Color Keyword /defaut option/: <RETURN or new option>

Keyword of all other lines /defaut option/: <RETURN or new option>

这通常是固溶度线。

注意：关键词或者是颜色（Color）或者是线型（TypeLine），取决于由切换的图形设备（用命令 SET_PLOT_FORMAT）是否支持颜色或线型，POST 将自动切换适当的关键词。

22 个合法的颜色选项为：

BACKGROUND	FOREGROUND	RED	GREEN
BLUE	YELLOW	MAGENTA	CYAN
PURPLE	GOLD4	TURQUOISE4	PINK
GRAY	ORANGERED3	MAROON	PLUM
SEAGREEN	OLIVEDRAB	SIENNA	ORANGE1
CORAL1	UAERDDEF		

8 个合法的线型选项为：

INVISIBLE	NORMAL	VERY_THICK	THIN
THICK	VERY_THIN	DASHED	DOTTED

下面列出颜色或线型的缺省选项：

文本/线	颜色	线型
Text and axis	FOREGROUND	NORMAL
Invariant equilibria	RED	VERY_THICK
Tie-line	GREEN	THIN
All other lines	FOREGROUND	NORMAL

9.5.7 SET_CORNER_TEXT

描述：此命令是在所绘图的角上写文本。通常，作为子标题来写这种文本。

提要：SET_CORNER_TEXT

接着提示：CORNER /LOWER_LEFT/: <RETURN or new option>

使用下面无个选项之一：

LOWER_LEFT　UPPER_LEFT　UPPER_RIGHT　LOWER_RIGHT　TOP_OF_TRIANGLE

Text: <text as a subtitle or note>

写出要写在制定图角上的文本。

注意：作为 TCC 版本 P 的新特性，计算中使用的主要数据库（不是附加的）和计算条件作为所有绘图的标题的一部分自动绘制在左上角。除非用命令 SET_PLOT_OPTION 切换掉绘图选项 WRITE_CONDITION，否则计算条件总是写在所绘制的图上；只有当用命令 SET_PLOT_OPTION 切换掉绘图选项 PLOT HEADER 时，所使用的数据库也总是出现。在这样的环境下，将避免在左上角写文本。

9.5.8 SET_FONT

描述：当在当前选定的图形设备（用 SET_PLOT_FORMAT 命令）下绘图时，用户可选择标注和计数使用的字体。对一些设备（如 PostScript），可能有其它字体并可用 SET_PLOT_FORMAT 命令来选择。

提要：SET_FONT

接着提示：SELECT FONTNUMBER /1/: <#>

指定字体号#作为当前图形设备的缺省字体，或按<RETURN>接受字体号 1。在这里见如问号“？”，程序将列出当前所选定绘图设备型的可以使用的字体。

在 Linux/UNIX 平台，有下列 10 种字体可以使用：

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

在 Windows NT/2000/XP 和 95/98/ME 环境下，有下列 43 种字体可以使用：

Font	1 IS AvantGarde-Book	Font	2 IS AvantGarde-BookOblique
Font	3 IS AvantGarde-Demi	Font	4 IS AvantGarde-DemiOblique
……			
Font	41 IS Paratino-BoldItalic	Font	42 IS ZapfChancery-MediumItalic
Font	43 IS ZapfDingbats		

FONT SIZE /.34/: <##>

指定所选字体的大小。推荐在 0.34 附近的值。

9.5.9 SET_INTERACTIVE_MODE

描述：此命令将输入与输出单位重新设定其初始值，即键盘与屏幕。记住要将此命令作为最后以条命令添加到宏文件中，以便停止执行 POST 模块中的命令文件。交互模式中它没有意义。

提要：SET_INTERACTIVE_MODE

9.5.10 SET_PLOT_OPTION

描述：利用此命令将提示并套牢打开（Y）或关闭（N）所有后续产生的图上一些选项的绘制。

提要：SET_PLOT_OPTION

接着提示：PLOT HEADER /Y/: <Y or N>

套牢图上部 Thermo-Calc 标题文本的绘制。

PLOT LOGO /Y/: <Y or N>

套牢图坐下角处 Thermo-Calc 标识的绘制。

PLOT FOOTER /Y/: <Y or N>

套牢图右页边的空白处页脚标识符文本的绘制。

WHITE-CONTOURED-PS-CHARS /Y/: <Y or N>

以白色轮廓状态写附言（PostScript）字符成为可能。

PLOT REMOTE EXPONENT(S) /Y/: <Y or N>

设定（Y）或移走（N）轴上远处指数的绘制。

PLOT SYMBOLS AT NODE POINTS /0/: <#>

在图中所绘制的线上节点处绘制符号成为可能。

SYMBOL SIZE /.1/: <.#>

设定节点处绘制符号的大小。

WRITE CONDITION /Y/: <Y or N>

作为 TCC 版本 P 的新特性，计算中使用的主要数据库（不是附加的）和计算条件作为所有绘图的标题的一部分自动绘制在左上角。使用这个选项切换掉（回答 N），可能不在图上写计算条件。

9.5.11 SET_PREFIX_SCALING

描述：此命令以某些幂（缺省为 3）设定远程指数的前置尺度，通过取作对轴名和 YES 或 NO 或整数#（作为远处指数的幂）的讨论：

- Ø “ NO ” 切断其动作。
- Ø “ YES ” 安排前置尺度以便用幂 3 作为远程指数来完成轴尺度，即

  …， 6，-3，0，3，6，…
- Ø “ # ” 将远程指数

提要：SET_PREFIX_SCALING

接着提示：AXIS (X, Y or Z): <name of an axis>

用户必须指定那]个轴要有前置尺度

USE PREFIX SCALING /Y/: (Y or N or #)

用户必须回答 Y 或 N 或上面描述的整数。

9.5.12 SET_REFERENCE_STATE

描述：当计算活度、化学势和焓时组分的参考态是很重要的，参见 8.10.7 和 3.2.13 节中详细信息。

在 STEP 活 MAP 命令之后，使用此命令可改变组分的参考态来绘制整个体系或特定相中的组分各种性质图。之后，用户可将图轴设定为代后缀的化学势或活度量，即 MUR(comp)、MUR(comp, ph)、ACR(comp)、ACR(comp, ph)或其一般对数[如 LNACR(comp, ph)]。

提要：SET_REFERENCE_STATE

接着提示：Component: <name of the component>

必须给出组分的名称。

Reference state: <name of a phase used as the new reference state>

必须给出是 RETERED 或 DORMANT 或 SUSPENDED 的相的名称，组分是这个相的组元。

敏感的问题是组分是否存在于相中几个物种中，例如 O、O2 和 O3 气体中的氧。通常，要使最稳定的物种作为氧的参考态，即此时的 O2。因此程序将计算当前温度下具有纯组分的相的所有可能状态的 Gibbs 能，并选择最稳定的相。

Temperature /*/: <reference temperature>

可选择温度（K）为参考态，值*意味着计算使用当前温度。

Pressure /*/: <reference pressure>

可选择压力（pa）为参考态，值*意味着计算使用当前压力。

9.5.13 SET_TIELINE_STATE

描述：若结线位于计算的平面内，用此命令可选择在两相区绘制结线。

提要：SET_TIELINE_STATE

接着提示：PLOTTING EVERY TIE-LINE NO /0/: <number of tie-line>

绘制的结线的间距不是相等的，图形软件划分其间隔。相反，用户可选择绘制计算结线的子集，

即每个第一个（1）、每个第二个（2）、每个第三个等。接受缺省值 0，就是不绘制结线。

9.5.14 SET_TRUE_MANUAL_SCALING

描述：轴上的 tic-mars 通常放在整个轴长的偶数间隔上。调整标尺的给定最大与最小值以达到这一点。若不要这种自动条件行为，可使用这个命令来避免（接着的此显示特定轴的 TRUE MANUAL SCALING 序列。

此命令的功能象套牢一样。重新设定自动标尺行为，仅重复特定相要重复两次。（后根指定相特定轴 SEMI_MANUAL SCALING 序列）

提要：SET_TRUE_MANUAL_SCALING

接着提示：AXIS (X, Y or Z): <name of an axis>

在自动调整与避免调整给定最大和最小轴之间指定要套牢的哪个轴（X 或 Y 或 Z）。

9.5.15 TABULATE

描述：对任何输入的表，此命令将从 STEP 或 MAP 命令计算的平衡中给出的值的表。仅对 POLY 或 POST 模块输入的表其作用。

注意，象 TAB 模块中的 TABULATE 命令一样，不可能从制表中绘制列。对这样的绘图，可使用正常的 POST 命令。

提要：TABULATE

接着提示：Name: <nameof a table entered in either POLY or POST>

指定在 POLY 或 POST 中输入的表名。

OUTPUT ON SCREEN OR FILE /SCRENN/: <file name or RETURN>

若要在沿定义的 STEP 或 MAP 计算的表值，指定文件名，若要在屏幕上查看表值按<RETURN。

9.6 奇特的命令

9.6.1 PATCH_WORKSPACE

描述：此命令仅是为了项知道要做什么的人。

提要：PATCH_WORKSPACE

9.6.2 RESTORE_PHASE_IN_PLOT

描述：此命令存储来自以 SUSPEND_PHASE_IN_PLOT 命令的绘制的图中以前悬挂的相。通常，至少有一相使用了 SUSPEND_PHASE_IN_PLOT 命令来悬挂之后此命令才其作用。

提要 1：RESTORE_PHASE_IN_PLOT <name of a phase>

提要 1：RESTORE_PHASE_IN_PLOT

接着提示：PHASE NAME <name of a phase>

给处在图上要存储的相的名称。

9.6.3 REINIATE_PLOT_SETTINGS

描述：应此命令所有描述图的参数将给定为缺省值。因此，在 POST 模块做出的所有绘图设定将失去，当登录 POST 模块时所有的都要返回到其初始设定

提要：REINIATE_PLOT_SETTINGS

9.6.4 SET_AXIS_PLOT_STATUS

描述：用此命令用户可指定在图上是否绘制轴标题文本和轴标注文本。对轴线和 tic-mark 不起作用。若希望绘制无 tic-mark 的图。则 SET_TIC_TYPE 命令应先使用。

这个命令可用于合并笔绘的不同图或更快获得图。缺省状态是绘制所有设定的轴。

提要 1：SET_AXIS_PLOT_STATUS <Y or N>

提要 1：SET_AXIS_PLOT_STATUS

接着提示：Axis plot (Y or N) /Y/: <Y or N>

用户可指定是（Y）否（N）绘制轴文本。

9.6.5 SET_PLOT_SIZE

描述：用此命令，用户通过指定整体图大小（作为相对比例系数）来改变图的尺寸。缺省的相对比例系数值为 1，而所绘制的图的真实尺寸依赖于用户用 SET_PLOT_FORMAT 命令选择的输出设备。缺省的绘图尺寸（对应于缺省整体绘图尺寸 1）调整到所选设备。

提要 1：SET_PLOT_SIZE <relative scaling factor>

提要 1：SET_PLOT_SIZE

接着提示：GLOBAL PLOT SIZE /1/: <relative scaling factor>

将相对比例因数输入为数值数（如 0.5，0.8，1.0，1.5 等）。

按<RETURN>接受缺省的相对比例因数。

9.6.6 SET_RASTER_STATUS

描述：用此命令，可能有光栅（即两轴方向上有网格线）绘制在图上。缺省状态不绘制光栅。

提示 1：SET_RASTER_STATUS <Y or N>

提示 1：SET_RASTER_STATUS

接着提示：RAETER PLOT (Y or N) /N/: <Y or N>

能（Y）或不能（N）光栅绘图

9.6.7 SET_TIC_TYPE

描述：此命令可以改变轴记号的绘制。可改变 tic mark 的位置，如在里面或外面或无 tic mark。此命令可不改变 tic mark 的大小，但可基于选定的图形设备和定义的相对比例因数（整个绘图尺寸）来调整。

提要 1：SET_TIC_TYPE <1 or –1 or 0>

提要 2：SET_TIC_TYPE

接着提示：TIC TYPE /1/: <1 or –1 or 0>

tic 类型 1 缺省值，即 tic 画在图外。-1 意味着 tic 在图内而 0 为无 tic。

9.6.8 SUSPEND_PHASE_IN_PLOT

描述：此命令允许指定起始于某一相的线不绘制在图上。若要将悬挂相带回到图上，仅使用 RESTORE_PHASE_IN_PLOT 命令即可。

提要 1：SUSPEND_PHASE_IN_PLOT <name of a phase>

提要 1：SUSPEND_PHASE_IN_PLOT

接着提示：PHASE NAME: <name of a phase>

指定从图中悬挂的相名。

9.7 3D 图标是：命令与演示

从 TCC 版本 P 起，通过 VRML（虚拟现实造型语言）阅读器如网络浏览器的插件程序或孤立程序，可能高质量地三维查看 Thermo-Calc 图。这样的阅读器包括 Windows NT/2000/XP 或 Windows 95/98/ME 环境的 ***Cortona VRML Client***（由 PalallelGraphics 开发的，可从 www.palalelgraphics.com 上下载）、Linux 和各种 UNIX 平台的 ***VRMLview***（由 SIM-运动中的系统开发的，可从 www.sim.no 下载）和 www.web3d.org 上 VRML 知识库列出的其它阅读器。在一些浏览器中，需要设定正确背景颜色或转到所谓前灯来更好查看。前灯总是直接照在 3D 图上。

这个新特征适于表示用两个成分轴和第三个 Z 轴为温度表示三元相图的，在此情况下，图绘制成三角形图或方（四面体）图。

也可用于表示四元相图四元相图，其中温度和压力固定并绘制成分空间的线。在此情况下，图应绘成四面体图，其中三个轴为成分变量。

为了这个特殊用途，添加了新的 POST 命令（CREATE_3D_PLOTFILE），可自动将所有的缺省/预定义图形定义信息和选择的数据点（表示和存储在特定表或*.TAB 文件中，取自当前的和/或以前的 MAP/STEP 计算）转换为合适的格式，并创建*,WRL（虚拟现实造型语言）文件以便用适当的 VRML 阅读器查看 3D 图。

此命令通过其它 POST 处理器命令来取图形定义信息，如

SET_DIAGRAM_AXIS　　设定 3D 图的轴变量。

SET_TITLE　　设定 3D 图标题。

SET_DIAGRAM_TYPE　　设定要绘制的 3D 图的类型。执行的选项是针对具有正方或三角形基底或针对四面体图。对线不作剪辑。注意，对四面体图，用户必须使用命令序列 SET_DIAGRAM_ TYPE N Y（见 9.3.2 节中的细节）

SET_RASTER_STATUS　　指定在正方形或三角形 3D 图的底部和背侧面中要绘制短 tic-mark 或者是全光栅线

SET_AXIS_TEXT_STATUS　　设定绘制 3D 图中使用的 X、Y 和 Z 轴文本标注。

SET_SCALING_STATUS　　设定 3D 轴手工或自动加尺度和手工加尺度是最小和最大值提示。

3D 图中对加尺度可能性的一些限制：

- 正方形图形：X 和 Y 轴的最小值必须是 0.0。
- 三角形图：X 和 Y 轴的最小值必须是 0.0；X 和 Y 轴的最大值必须相同。
- 四面体图：X、Y 和 Z 轴最小值必须是 0.0；X 和 Y 轴最大值必须相同；Z 轴最大值可自由选择。例如，若对 Fe-Cr-Ni-C 系的富 Fe 较感兴趣，轴变量（注意不允许是温度！）应选择为

  X=Cr 含量

  Y=Ni 含量

  Z=C 含量，C 含量可能比 Cr 和 Ni 含量低很多并使用 Z 轴上的这个变量可选择更合适的比例。
- 对绘制的线不做剪辑。

CREATE_3D_PLOTFILE 命令可用以下三种不同模式使用指定的数据（在图形定义信息旁边）：

- WS　　读取由 POLY 命令 MAP 或 STEP 计算的或从以存在的*.POLY3 文件中加载的以前计算结果的存在于当前工作区以表的形式存储的数据；
- TAB　　读取来自一个或多个*.TAB 文件中的（所有文件必须在当前目录下）的存储为标的数据，其中相关亚体系其它以前计算的表数据已经用 TABULATE 命令保存；
- BOTH　　读取来自当前工作区和保存在*.TAB 文件中的存储为表的数据，预示着来自当前工作区输入数据的表数据可与其它以前 MAP/STEP 计算结果合并，如适当的表已经使用 TAB 命令写在*.TAB 文件中（所有这样的文件必须在当前工作目录下）

在所有这样模式中，必须已经定义了一些表（在 PLOY 或 POST 模块中用 ENTERED_SYMBOL 命令录入），可进一步用在 TABULATE 命令中来产生*.TAB 文件。为简化这项任务，在 POST 模块中已经定义了两个附加帮助符号，一旦使用命令 CREATE_3D_PLOTFILE 则将其自动显示：

- TEMP_C=T-273.15　　温度（°C）（作为变量）
- ZERO=0　　值 0.0　　（作为变量）

当定义表时可直接访问这两个符号，见下例：

```
ENTER-SYMBOL demotb1=x(fcc, ni), x(fcc, cr), TEMP_C;
ENTER-SYMBOL demotb2=x(fcc, ni), ZERO, TEMP_C;
ENTER-SYMBOL demotb3= ZERO, x(fcc, cr), TEMP_C;
ENTER-SYMBOL demotb4=x(fcc, ni), x(fcc, cr), ZERO;
ENTER-SYMBOL demotbA=x(fcc, ni), x(fcc, cr), x(fcc, c);
ENTER-SYMBOL demotbB=x(fcc, ni), x(fcc, fe), x(fcc, c);
ENTER-SYMBOL demotbC=x(fcc, ni), x(fcc, cr), TEMP_C, x(fcc, c);
ENTER-SYMBOL demotbD=x(fcc, ni), ZERO, x(fcc, c), TEMP_C;
```

对于 WS 或 BOTH 模式，CREATE_3D_PLOTFILE 命令可将这样定义的表取为输入的数据。

这样定义的表也可能已经用于使用 POST 或 POLY 模块中 TABULATE 命令创建各种*.TAB 文件中，

例如

TABULATE demotb1 crni.TAB

在 TAB 或 BOTH 模式下，CREATE_3D_PLOTFILE 命令可将一个或多个这样以前创建的*.TAB 文件取作输入数据，然而所有这样的*.TAB 文件必须在当前工作目录下。

注意，要进一步简化*.TAB 文件的使用，可要用下面的 DOS 命令来合并 Windows DOS 对话中几个这样的*.TAB 文件：

Copy Ter.tab+Bin1.tab+Bin2.tab+Bin3.tab Tmp.tab

（或再其它系统中的类似命令），或使用使用文本编辑器来将独立的文件合并成一个单个文件。接着，可将 Tmp.tab 文件作为单个 RAB 输入文件用于 CREATE_3D_PLOTFILE 命令中。

在下面的对话中，将描述 CREATE_3D_PLOTFILE 命令，然后将解释如何查看 3D 图的演示。此外 ***Thermo-Calc Examples Book*** 中例 45、46 和 47 分别给出了 TCC 版本 P 中如何生成*.WRC 文件的标准例子。

9.7.1 CREATE_3D_PLOTFILE

描述：这个 POST 命令可自动将所有缺省/预定义图形信息和选定数据点（表达并存储在特定表中或*.TAB 文件，取自当前和/或以前的 MAP/STEP 计算）转换为适当的格式并创建*.WRL 文件以便用 VRML 阅读器如网络浏览器插件或孤立程序来查看。

提要：CREATE_3D_PLOTFILE

接着提示：Use current WORKSPACE (WS), TAB file or BOTH: <##>

选择三个模式之一：WS 是在当前工作区表数据，TAB 是从存在的*.TAB 文件阅读中读取表数据或 BOTH 是从当前工作区和存在的*.TAB 文件读区合并的表数据。注意，对 BOTH 模式，必须见如全部词作为“ BOTH ”和“ both ”；否则命令只取 TAB 模式。

在 WS 和 BOTH 模式下，当前工作取中以前定义的表在屏幕上列出，为了将希望的表选进输出*.WRL 文件

Table Name: <table name>

在 WS 和 BOTH 模式下，给出表的名称，该表以前已经用 TABULATE 命令并以至少 3 个变量定义，3 个变量将用作 3D 图的数据点。第一行总是 X 轴的值，第二行为 Y 轴的值，第三行为轴的 Z 值。也可输入（登录）多于 3 行的表，超过三行的行将转换为输出的*.WRL 文件，而在以 VRML 阅读器中查看 3D 图时不使用它们。

Give TAB filename: /Cancel_to_finish/: <file name(s)>

在 WS 和 BOTH 模式下，指定为查看 3D 图已经准备包括单个输出*.WRL 文件的*.TAB 文件的名称。在同一行或后续行指定一个或多个*.TAB 文件，而所有这样的文件必须在当前工作目录下。这对再三元相图中添加二元侧面特别有用。

在 TAB 模式中，若在第一次出现这个提示是没有指定*.TAB 文件名。命令将终止。

此提示将为附加的*.TAB 文件而重复，知道没有文件名可给出（即仅按<RETURN>）。

Output file: /3Dplot/: <file name>

指定*WRL 文件的输出文件名（用扩展名.WRL，如 FeCrNiC-a.WRL）或按<RETURN>接受缺省文件名 3Dplot，其中要写所有图形定义信息和选择性地指定的表数据以便在 3D 图这查看。所有数据将自动转换为 VRML 阅读其的适当格式。**注意**，若再指定文件名是漏掉了扩展名.WRL，输出文件仅是简单的文本文件。

X-AXIS SCALING FROM 0.0 TO XMAX: <##>

给出 X 轴的最大值。注意，对 X 轴和 Y 轴，X 和 Y 最大值必须相同。

Y-AXIS SCALING FROM 0.0 TO YMAX: <##>

给出 Y 轴的最大值。注意，对 X 轴和 Y 轴，X 和 Y 最大值必须相同。

Z-AXIS SCALING, GIVEN ZMIN: <##>

给出 3D 图的 Z 轴的最小值。对四面体图，可自由选择 Z 最大值。

注意：在所有模式下，在当前工作区定义的或在*.TAB 文件中保存的选定为输入数据表必须有 3 行：第一行总是 X 轴的值，第二行为 Y 轴的值，第三行为轴的 Z 值。表中超过三行的所有可能额外行也将转换为输出*.WRL 文件，而在以 VRML 阅读器中查看 3D 图时不使用它们。

在 TAB 或 BOTH 模式下，指定的*.WRL 文件中和在从当前工作区中选定的表中所有（第一个）三行必须已经类似指定，以便对特定体系适当查看 3D 图。通过“同样地定义”，意味着若来自以前计算某一行没有数据，应输入为 ZERO 常数，其它行应总是有相同变量（或零）。若表中所有（第一个）三行的定义不相似的，输出*.WRL 文件将有不同部分具有结构的数据单元，尽管数据点的转换可在此命令中完成数据点转换。因此，可有下列四个表（保存为*.TAB 或工作区定义的）来将数据转换为相同*.WRL 文件：

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 demotb1=ZERO, x(fcc, cr), TEMP_C;
ENTER-SYMBOL TABLE demotb1=x(fcc, ni), x(fcc, cr), ZERO;

不应与其它表混合的定义如下：

ENTER-SYMBOL TABLE demotbA=x(fcc, ni), x(fcc, cr), x(fcc, c);
ENTER-SYMBOL TABLE demotbA=x(fcc, ni), x(fcc, fe), x(fcc, c);

此外，若已经见如当前工作目录下不存在的名称，命令将还可能处理，而新的空文件（带有其名）将在此目录下创建。因此，当指定*.TAB 文件名时应特别小心。

在 TAB 或 BOTH 模式下，在指定此命令的所有细节后可给出一些情报的消息，如：

```
It is possible to combine files by:
Copy Ter.tab+Bin1.tab+Bin2.tab+Bin3.tab Tmp.tab

Processing crinic.TAB
2.64306994E-08<X<    0.491403997
0.0539233014<Y<    0.231238996
6.70927989E-07<Z<    0.000157856004
```

9.7.2 在 Cortona VRML Client 阅读器中查看 3D 图

可通过 VRML 阅览器如网络浏览器的插件程序或独立程序，以三维形式查看由 CREATE_3D_PLOTFILE 命令创建的*.WRL 文件。用户可从 www.web3d.org（Wed3D 协会）的 VRML 知识库下载喜欢的一种。

对 Linux 和各种和各种 UNIX 平台，推荐 VRMLview（由 SIM-运动中的系统开发的，可从 www.sin.no 上下载）。请试图自己研究。

对 Windows NT/2000/XP 和 Windows 95/98/ME 环境，推荐 Cortona VRML Client（ParallelGraphics 开发的，可从 www.parallelgraphics.com 上下载），这里显示。

因特网管理器和 Netscape Navigator 的 MS 插件应用程序，能够写在浏览 VRML 中虚拟世界中。Cortona 提供领航范例（navigation paradigms）（如走步或飞翔），能使用户通过虚拟世界移动阅读器。此外，提供了允许用户与虚拟世界交互的机制。Cortona 是基于通用组分技术设计的，该技术提供了创建大凡为 3D 应用程序的机会：从图形处理器到复杂的多用户因特网服务器。Cortona VRML 客户支持：OpenGL、Direct3D、Java language、Splines 和 NURBS、External Authoring Interface（EAI）。客户也有自己内建 VRML Automation Interface（Automation Interface for managing VRML scenes），基于 ActiveX Automation 技术。其硬件和系统要求如下：

- 操作系统：Microsoft Windows NT/2000/XP 或 Windows 95/98/ME；
- 因特网服务器 4.0 或以后版本，或 Netscape Navigator 4.0 或以后版本；

- 计算机：Pentium90MHz 或更快的处理器；
- Random Access Memory (RAM): 最小 16MB；
- 自由磁盘空间：程序文件的 6MB 硬盘空间；
- 显示：SVGA/256 彩色。推荐 800×600 高色彩模式。
- 输入设备：鼠标与键盘、操纵杆（自选）。
- 声卡：自选。

请先从 www.parallelgraphics.com 中自己下载，并安装到 Windows 计算机或服务器。通过运行安装程序（或点击 Windows 上安装图标）将在此目录下安装自动程序，如

C:\Program Files\Common Files\ParallelGraphics\Cortona\

在计算机或服务器上成功安装之后，可简单地点击已经生成的*.WRL 文件，或从 Cortona 窗口打开此文件，然后接着是查看、打印或输出 3D 中的 Thermo-Calc 图的说明。Cortona 用户指导中提供了详细说明。

图 9-6 和 9-7 说明了用 Cortona VRML Client 查看 3D 的 Thermo-Calc 图的两个例子（一是三角形图，另一个是四面体图）。

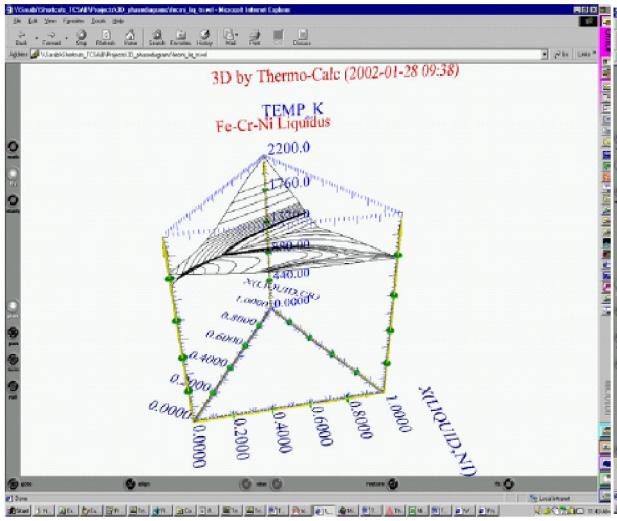


图 9-6 用 Cortona VRML Client 查看三角形 TC 图

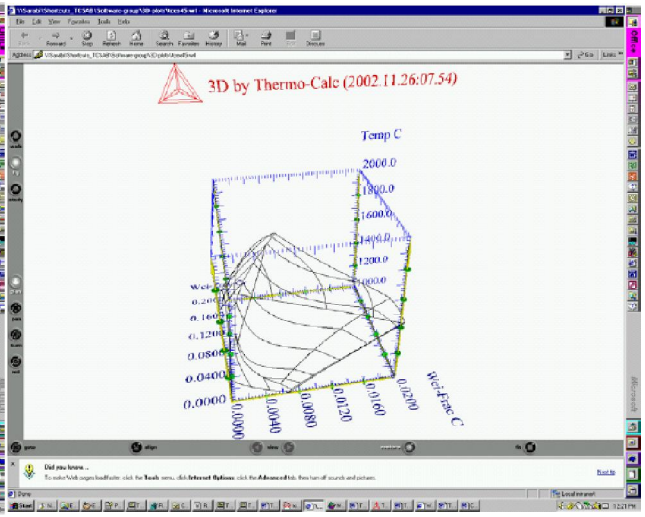


图 9-7 用 Cortona VRML Client 查看四面体 TC 图

第 10 部分 一些特殊模块

10.1 引言

正如第 3 部分（Thermo-Calc Software System）中描述的那样，对用户友好特性的不断改进已成为 Thermo-Calc 软件/数据库/界面软件包的一部分。良好的用户界面一定给用户带来载提高各种应用程序中使用软件/数据库/界面方面的效率益处。

传统的 Thermo-Calc 是交互系统，用户通过从菜单中给出命令来控制。以作了大量连续不断的工作使系统命令菜单用户界面越来越对用户友好。Thermo-Calc 用户界面的改进以经济终于四个等级上，总结于表 3-4。

等级之一是一些简化模块的开发，允许用户进行普通类型的相或性质图（如二元、三元、势、Pourbaix 等）的计算和绘图或材料加工过程的模拟（如凝固、多阶段稳态反应等）。在 Thermo-Calc 传统软件包中目前有以下特定模块：

1）BIN - 二元相图计算模块
2）TERN - 三元相图计算模块
3）POT - 势性质图计算模块

4）POURBAIX　- Pourbaix图和性质图计算模块
5）SCHEIL　- Scheil-Gulliver 凝固模拟模块
6）REACTOR　- 多阶段稳态反应模拟模块

在所有这些模块中，除了 REACTOR 模块之外，仅需要回答一些简单的问题，程序自动处理计算与后处理中所有必要的步骤，这是为什么它们被称为易于使用（ease-to-use）的模块的原因。REACTOR 模块由一个命令菜单用户界面，类似于所有基本模块（如 SYS、TDB、GES、TAB、POLY、POST、PARROT 和 ED-E

XP）。然而，要用于计算与模拟的软件/界面系统不能以与书籍目录的恢复系统相同的方式来构造，因此用户必须知道如何在软件/界面系统框架内定义起问题。

在将来的发行中将构件更多这样的易于使用的模块，所以可以用标准的方式处理一些广泛应用的普遍的问题或一些困难的情况，即指定计算/模拟条件与 stepping/mapping 变量要求更复杂的技术。例如，可开发 PREDOM 模块可开发来计算和绘制所谓的优势图，可实现 HTCORR 模块来模拟高温材料腐蚀过程。

在一些已有的模块（如 POUIBAIX 和 SCHEIL）中将最终添加更多选项，一些选项将进一步提高和扩展，所以模块可处理更复杂的反应系和提供更复杂的结果和表达。

这个特定模块指南⇔将给出当前具有的特定模块与其应用的一些项系描述。

10.2 特殊模块生成或使用的文件

10.2.1 POLY3 文件

通过执行特定与易于使用模块（即 BIN、TERN、POT、POUIBAIX 或 SCHEIL 模块），Thermo-Calc 程序将自动在当前工作目录中的文件上保存关于以下定义与设定的所有信息：

- 系统定义；
- 热力学数据；
- 组分定义；
- 参考态设置；
- 相、成分与物种的状态设置
- 平衡条件规范；
- stepping/mapping 变量设置；
- 初始平衡点；
- 第一个图的轴变量/文本设置；
- 各种符号定义（常量、变量、函数和标）。

可以用 POLY3 工作区结构生成并保存这样的文件，因此总是与具有文件扩展名“ *.POLY3 ”（在 PC Windows NT/2000/XP 或 Windows 95/98/ME 环境下）和“ *.poly3 ”（在 PC Linux 和各种 UNIX 平台）的文件相联系。

在自动程序中，特定文件名总是以缺省的文件名出现，如 BINARY/GCURVE/PFCURVE.POLY3(BIN 模块)、ISOTERN/MONOVAR.PFCURVE.POLY3（TERN 模块）、POT.POLY3（POT 模块）、POURBAIX. POLY3（POURBAIX 模块）和 SCHEIL.POLY3（SCHEIL 模块）。用户可希望模块计算完成后拷贝这样的在其它名下的这样*.POLY3 文件。，或者若加载其它工作取或程序退出，重新命名这个文件。

所有的这样*.POLY3 文件可用正常的 POLY 模块读取，用于多个其它计算（在 POLY 模块）、图形处理（在 POST 模块），或数据处理（在 GES 模块）的目的。也有在 PPORBAIX 和 SCHEIL 模块中打开以前保存为*.POLY3 文件选项，以便对相同化学系但不同温度-（压力）-成分条件进行其它的 POURBAIX 或 SCHEIL 模块计算，或从相同计算体系和条件绘制其它性质图。

10.2.2 RCT 文件

通过执行特定 REACTOR 模块，Thermo-Calc 程序将自动将与反应、分布系数、除了 POLY3 工作区以外的（见 10.2.1 节）定义相关的所有信息保存在当前工作目录中的文件上。将以 REACTOR 工作区结

构产生并保存这样的文件，因此总是与文件扩展名“ *.RCT ”相联合。

10.2.3 GES5 文件

执行特定模块后，可进入 GES 模块处理各种书局与描述、将所有关于体系定义、热力学数据和各种符号（常量、变量、函数和标）保存在当前工作目录中的*.GES5 文件上。特定模块名出现为缺省名[如 BINARY.GES5、TERNARY.GES5、POT.GES5、POURBAIX.GES5、SCHEIL.GES5 和 REACTOR.GES5]、或者程序可询问用户指定文件名。用户希望在其它名下进行这样的 GES5 文件拷贝，或者若加载其它工作区（PLOY3、GES5 或 PAR）或退出程序则重命名。所有这样*.GES5 文件可用正常 GES 模块读取，并用作其它目的。

10.2.4 宏文件

用 SYS 模块或使用文本编辑器写各命令行或回答行，可创建特殊模块的宏文件。

应记住，在为特殊模块（即 BIN、TERN、POT、POUIBAIX 或 SCHEIL 模块）创建的宏文件中，输入模块命令（如 go BIN、go TERN、go POT、go POUR 或 go SCH）和 SET-INTERACTIVE 命令（对 POUIBAIX 模块的宏文件）或普通 POST 命令之间每行是一个与问题相对应的回答。因此，空行总是对模块计算或图形处理中相应问题的缺省回答。所以，在这样的回答行之间不能插入评注行（符号@@之后）和宏文件级别控制评注[MACRO-FILE-OPEN <another file name>]。暂停控制符号[@&]或半交互式输入控制符[@?]也不娘插入。否则，模块将不能适当地连续执行宏命令。

然而，REACTOR 模块的宏文件不具有这样的行为，所以可写所有各种和法评注行或字符于任何选项，就象通过各种基本模块的计算和后处理的正常宏文件一样。

10.3 与特殊模块的交互

从 SYS 模块或从有 GOTO_MODULE 命令的所有模块（如 TDB、GES、TAB、POLY 或 PARROT 模块），可直接登录这种特殊模块。例如，命令 GO BIN 将切换到二元系中计算相图和 Gibbs 能曲线的 BIN 模块。

正如以上提到的，在这五种特定的易于使用的模块（BIN、TERN、POT、POUIBAIX 或 SCHEIL 模块）中不能利用命令行结构，相反，用户仅需要回答一些简单问题来进行自动计算和图形生成。

若从 SYS 模块登录，这五种特定模块这的四种（BIN、TERN、POT 和 SCHEIL）通常结束于 POST 能量，因此用户可进一步对绘制的图的外貌进行调整和修正（如设定曲线标注选项、添加文本、改变轴类型或图类型、改变轴尺度来缩放特殊区域、悬挂不感兴趣的相、施加实验数据点、制作实验数据文件、产生硬拷贝等）。然而，BIN、POT 和 SCHEIL 模块也可结束在访问这样特定的易于使用模块的以前模块处，。在此情况下，若当前工作取没有改变，总能进入 POST 模块（通过 POLY 模块）来立即对绘制的图的外貌进行必要的调整和修正。

POURBAIX 模块总是结束在 SYS 模块。不管在那里访问。作为模块的唯一特性，可直接而容易地对对绘制的 Pourbaix 图或模块内其它类型图的外貌进行必要的调整和修正。用一个选项，可甚至与 POST 模块联系（通讯），在没有中断 POURBAIX 模块时进一步图形细化，因此可立即改变图。

当以基本模块相同风格建立 REACTOR 模块时，将需要通过各种命令逐步与程序交互作用，类似于所有基本模块（SYS、TDB、GES、POLY、POST、PARROT 和 ED-EXP 模块）。

在接下来的一节，每个这些特定模块与用户之间的交互作用将广泛地演示。也可参考与\TCEX\区和 Thermo-Calc Example Book 中这些模块有关的宏（*.TCM）文件。

10.4 BIN 模块

10.4.1 BIN 模块的描述

二元相图广泛用于各种材料设计与工程、材料化学、化学、地球化学、环境化学等。上个世纪已经进行了二元合金系的大量实验研究，这样的二元相图对开发合金特别有用。ASM International 在实验数据和一些拓扑方法的基础上出版的“ ASM Binary Alloy Diagrams ”系列版本已经被材料研究与开发界广泛使用。

然而 Thermo-Calc 软件/数据库/界面软件保重使用的高级计算热力学方法提供了更复杂的方法来进行

研究相图和很多其它钢与合金热力学性质，以及大量工业与自然材料（陶瓷、无机材料、有机物质、聚合物、矿物、核材料等），使用一些已经建立的热力学模型和数据库、强大的计算和模拟工具和易于使用的模块可精确计算和绘制所有类型相图和性质图，正如本用户指南的第 3 部分和很多最近出版物中所描述的那样。

在 TCC 传统程序中可容易计算和绘制二元系各种类型相图和性质图，通过命令行结构模块来完成氧上工作，即定义二元系并在 TDB 模块中获得热力学数据、在 GES 模块中操作（如有必要）相描述和参数、在 POLY 模块中设定计算条件和 mapping 变量以及在 POST 模块中指定图形形貌。按此方法，也可计算和绘制伪二元系的相图（或称准二元系，其中三元系的一个组元有固定的活度或化学势，如常数 O_2 活度的 $CaO-SiO_2$、当液态氧化物 FeO 与液态铁 Fe 处于平衡的 Ca-Fe-O 系以及具有固定碳活度的 Fe-Cr-C）。当然，宏文件在二元相图或性质图计算与图形处理（如\TCEX\区和 Thermo-Calc Example Book 中 TCEX4.TEM、TCEX16.TEM、TCEX17.TEM 的例子）的使用将可进行这样的命令行计算和如此简单而有效地图形处理

为式用户界面更容易和更直接，从 TCC 版本 L 起已经有特殊而易于使用的模块，也就是 BIN 模块。它被构造成简单的基于问题行结构，用户仅需要提供一些适当的回答。此模块可直接并自动计算与绘制各种二元合金系相图（成分对温度）或 Gibbs 能曲线（各相 Gibbs 能对温度）或相分数图（各稳定相分数对温度）。此外，利用 BUN 模块计算结果，在 POST 模块可产生很多其它类型相图和性质图。

BUN 模块程序很简单，用很少几步完成二元系的相图、Gibbs 能曲线或相分数图的计算与图形处理，描述如下：

步骤 1：选择合适的溶体数据库

模块寻找将返回热力学数据的合适溶体数据库。基本上，数据库中必须有端元性质、二元相互作用参数和所有的估计体系信息（至少是要计算与绘图的二元系）。这样的溶体数据库是基于普通的溶体数据库（预示着也必须有三元和高阶相互作用数据），而且正常地是为 BIN 模块特别设计的（见 10.4.2 节这更多细节）。用户也可切换自己的溶体数据库来满足进行 BIN 模块计算的基本需要。

步骤 2：指定两种元素

必须给出当前溶体数据库中的第一和第二个元素名（在一行中两者之间一个空格或两个分开行）。

步骤 3：选定主要选项

程序询问（作为三个主要选项）是否计算和绘制相图（P，缺省）或 Gibbs 能曲线（G）或相分数图（F）。

对主要选项 G，程序进一步提问计算二元的整个成分范围所有可能相 Gibbs 能[用 GMR(*)表示]曲线的特定温度。

对于主选项 F，必须指定以摩尔分数表示二元合金中第二元素的成分，因此可计算一定温度范围内体系中此成分下稳定相分数（缺省为质量分数）。

步骤 4：自动计算与绘制期望的图

此模块自动执行以下任务：

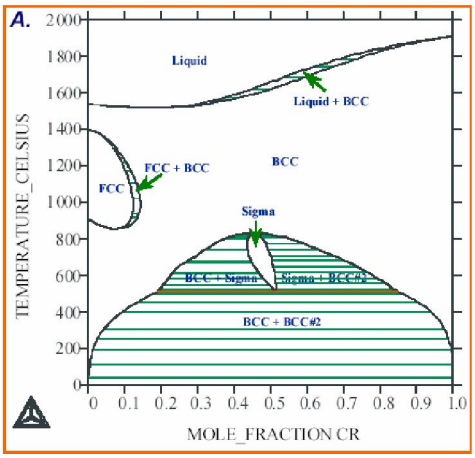
- Ø 从选定的数据库返回所有热力学描述与信息；
- Ø 为期望的计算定义初始平衡条件；
- Ø 设定 mapping 或 stepping 变量[对主选项 P，总是作为第一个 mapping 变量范围从 0.0 到 1.0 的第二元素的摩尔分数，温度条件（K）作为合理的低-高范围变化的第二个 mapping 变量；对主选项 G，总是作为第一个 stepping 变量范围从 0.0 到 1.0 的第二元素的摩尔分数；对主选项 F，总是温度条件（K）作为 stepping 变量，变化为合理的低-高范围]；
- Ø 计算开始点；
- Ø 进行 mapping 或 stepping 计算；
- Ø 在屏幕上绘制第一个期望的图。这是选择的主选项（P 或 G 或 F）德缺省输出，轴变量总是设置如下：

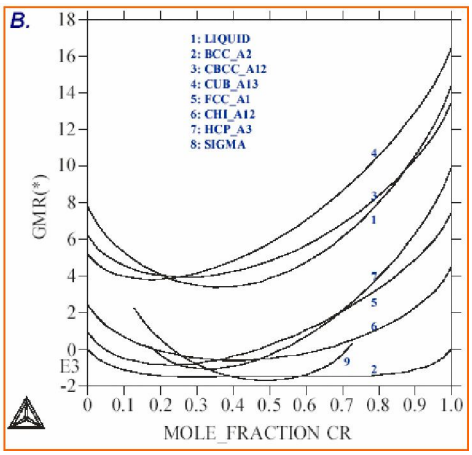
- 对主选项 P：X=X(2^{nd}E1)　接合点中第二元素的磨二分数
  Y=T-C　温度（°C）
- 对主选项 G：X=X(2^{nd}E1)　接合点中第二元素的磨二分数
  Y=GMR(*)　所有可能相的 Gibbs 能（J/mol）
- 对主选项 F：X= T-C　温度（°C）
  Y=BPW(*)　体系中稳定相质量分数

在轴类型、轴文本、轴比例系数、曲线标注选项（主选项 P 为 B 或 N，主选项 G 和 F 为 D）也为缺省设置、色彩和宽度（文本与轴、不变平衡点、结线与如溶解度线等其它线）、字体与大小（标注与号码）、图题（由切换的数据库名和二元接合点元素名组成）等。

图 10-1 说明了三个 BIN 模块生成的 Fe-C 二元系图的例子，每个图分别对应于三个主选项 P（相图）、G（Gibbs 能曲线）和 F（相分数图）。注意，通过下一步（见步骤 5）这些图已经略微细化。

同时，*.POLY3 文件将自动保存在当前目录下，对主选项 P 用缺省名 ISOTERM.POLY3，对主选项 G 用缺省名 GCURVE.POLY3，对主选项 F 用缺省名 PFCURVE.POLY3。这些*.POLY3 文件可重新在正常 POLY 模块重新打开，以便在 POST 模块进一步管理其它项图或性质图的图形处理，或在 POLY 模块直接进行其它类型 mapping 或 stepping 计算。注意，这样的文件必须拷贝（若特定 POLY3 工作区还在处理中）或重命名（若 POLY3 工作区已经退出）到用相同主选项进行的其它 BIN 模块计算之前的其它文件。





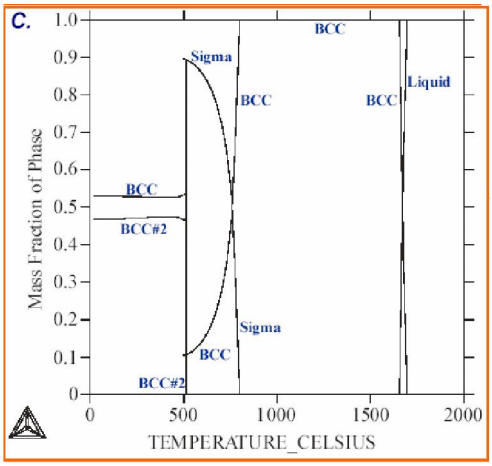


图 10.1 Fe-C 二元系相图、Gibbs 能曲线和相分数图，用 BIN 模块自动计算（输出分别对应于三个主选项 P、G 和 F）。

A 表示 Fe-C 相图[Cr 的摩尔分数对温度（°C）]；

B 绘制 600°C 处整个 Fe-Cr 二元接合点中所有可能相的 Gibbs 能曲线[即 GMR(*)（J/mol）]；

C 绘制当二元接合点中 Cr 的摩尔分数为 0.55 时沿温度（°C）的温度相质量分数[即 BPW(*)]。

步骤 5：进一步精化所产生的相图或 Gibbs 能曲线或相分数图

最后，模块总是结束于正常的 POST 模块来进一步图形加工和处理自动产生的（第一个）图，如所

期望的一样。图 10-1 种表示的图在此步中精化。

用户现在可将所有种类 POST 模块命令用于精化图，通过修正和/或添加轴类型、轴文本、轴比例系数和方式、轴记号状态、结线状态、曲线标注选项、相区或性质标注文本、颜色与厚度、图题与子标题、轴长度、图尺寸等设置。

这样进一步图形加工之后，用户可选择将产生的图打印到连接的打印机上、将图保存为图形文件（使用优选的字体和大小）、将图倾卸到图形设备（也保存为图形文件）、或将产生和修正的突的曲线、线和点以及一些图线设置的完全 X-/Y-坐标输出到*.EXP 文件上。各种 POST 命令的细节见第 9 部分。

步骤 6：进一步绘制多个其它类型相图和性质图

若用户需要，使用相同的计算结果（保存在当前运行或重新打开的 BINARY.POLY3、DCURVE.POLY3、PFCURVE.POLY3 文件中，或缺复制的 BIN 模块*.POLY3 文件中），可在 POST 模块监视器中产生很多其它类型相图或性质图。用户可为新图定义适当的轴变量，并可将所有类型 POST 命令用于正确地重新定义和精化图，如步骤 6 所描述的那样。

可通过选定合适的平衡量设定轴变量，该平衡量或者是状态变量（在内部变量、能量变量、成分和组成变量之间）或作为到处变量。也可以输入一些可作为新的轴变量或用作值表的附加符号（函数或变量或表）。

通常，以 mapping 变量（若是用主选项 P 进行的计算）或 stepping 变量（若是用主选项 G 或 F 进行的计算）之一相对应的变量必须选作独立变量（与主选项 P 相对应图的 X-或 Y-轴和与主选项 G 或 F 相对应图的 X-轴）。若成分变量已经用作 mapping 变量，在二元 joint 中两个元素（组元）之一的成分或活度（以摩尔分数、摩尔百分数、重量百分数或活度表示）可设定为独立的轴变量；若温度已经用作 stepping 变量，T(K)或 T-C(°C)可设定为独立的轴变量。

对弈定义的第二个轴变量（Y 轴，或者使用主选项 P 计算中 mapping 变量之一将 Y 轴设定为独立轴变量时的 X 轴），可选择任何其它合适的平衡量。若要在 POST 模块中绘制三角形图或者若使用合适的图形软件产生三维图，甚至可以用定义第二个轴变量同样的方式来定义第三个轴变量（Z 轴）。

这些可总结如下：

- 对主选项 P：X/Y=C/A(E1)　joint 中一个元素的成分/活度。
  或=T/T-C　温度（K 或°C）
  X/Y/Z=　体系或组元或相的平衡量，相应地沿相边界（和结线与不变点）变化。
- 对主选项 G：X =C/A(E1)　joint 中一个元素的成分/活度。
  Y/Z=　体系、组元或相的任何平衡量。
- 对主选项 F：X=　T/T-C　温度（K 或°C）
  Y/Z=　体系、组元或相的任何平衡量。

更详细的内容，请参考第 9 部分（后处理模块 POST）.

图 10-2 说明了 Fe-Cr 二元系通过 BIN 模块保存为*.POLY3 文件的图形加工而绘制的这种非缺省图，分别是通过三个选项产生的，即 P（相图）、G（Ginns 能区线）和 F（相分数图）

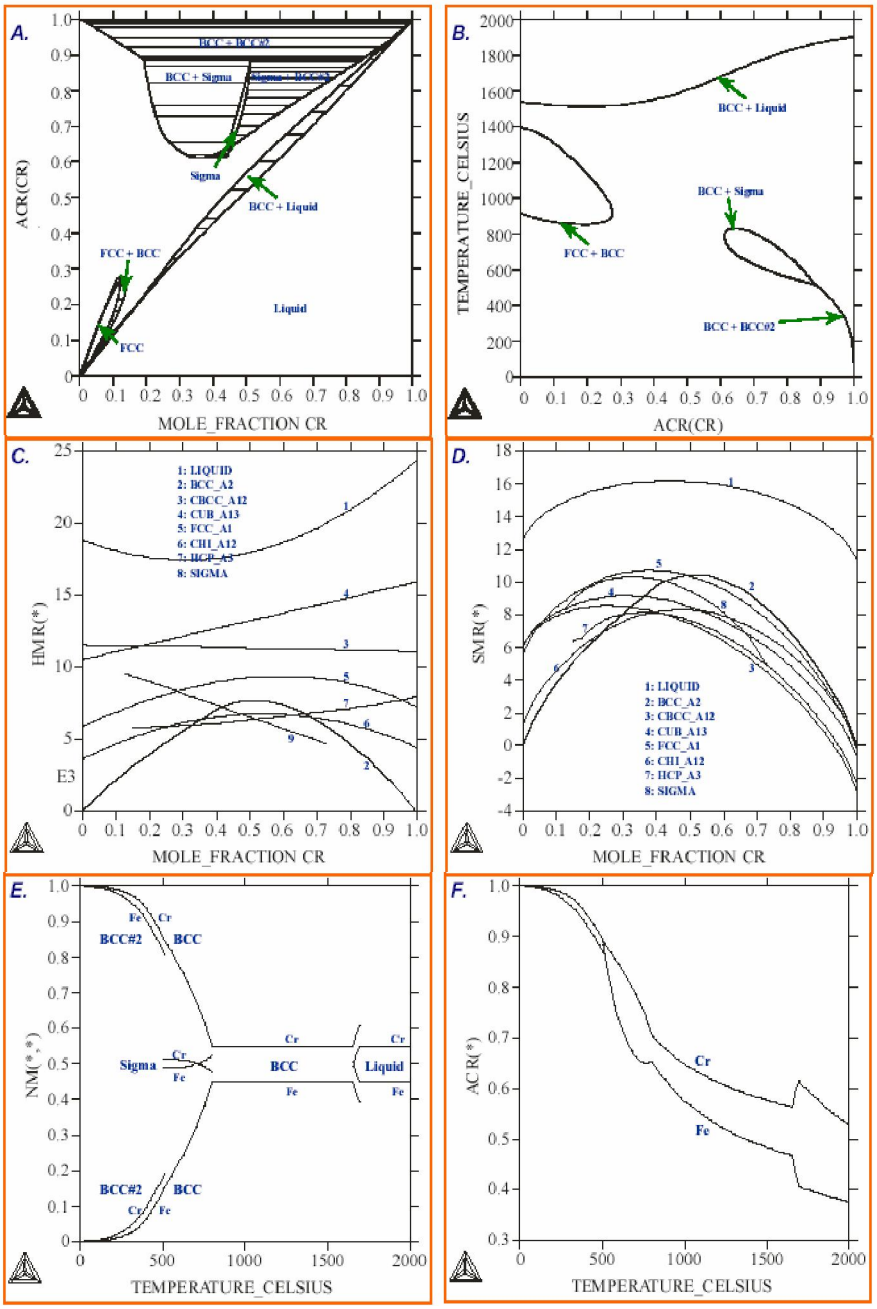


图 10-2 由 POST 模块产生的基于主选项（P、G 和 F）计算结果的 Fe-Cr 二元系的其它类型项图与性质图。A 和 B 表示 Cr 组元的活度[ACR(Cr)]随体系成分[Cr 的摩尔分数]或温度[°C]沿相边界的变化。；C 和 D 画出了 600°C 整个 Fe-Cr 二元组件（joint）所有可能相的焓[HMR(*), J/mol]与熵[SMR(*), J/mol/K]；E 和 F 绘制了当在组件中 Cr 的摩尔分数为 0.55 时沿温度（°C）轴变化的稳定相中 Cr 与 Fe 的摩尔分数[NR(*)]和组元 Cr 与 Fe 的活度[ACR(*)]。

要注意，由于以两个独立的 mapping 轴（二元组合的温度和成分）进行主选项 P 的计算（保存为缺省的 BINARY.POLY3 文件），可通常一个中相图或性质图提出计算结果。可绘制二元系的相图，用一个轴变量为温度（K 或°C）和另一个为体系成分（一种元素如组元的摩尔分数 M-F、摩尔百分数 M-P、重量分数 W-F 或重量百分数 W-P）或与成分相关的状态变量（如一个组元的活度，AC 或 ACR）。若中央的变量之一设定位一个轴，而体系或组元的其它特定平衡性质设定为另一个轴，则绘制性质图。在这样的性质图中，曲线/直线/点将仅表示特定性质沿项边界（和结线与不变点）的变化。

此外，可对已经定义（标准状态或表中）的一些热力学性质和平衡量沿着 mapping 变量（主选项 P）或 stepping 变量（主选项 G 或 F）制表和绘图。

10.4.2 特定 BIN 模块数据库的结构

正如以上所述，BIN 模块自动从切换的适当数据库返回所有热力学数据，其中除了各种相的标准热力学性质外必须有各种二元交互作用参数和所有的估计的体系信息（至少是要计算和绘图的二元系）。通常，这样的溶体数据库特别为 BIN 模块而设计，但其也可能是具有附加 ASSESSED_SYSTEM 信息但元的一般溶体数据库（预示着也可能有三元和高阶交互作用数据）。用户也能够切换到自己的溶体数据库来满足进行 BIN 模块计算的基本要求。

目前时刻，有两个特定涉及的二元合金溶体数据库可直接在 BIN 模块中使用，祥述如下：

Ø **PBIN** TC Public Binary Alloy Solution Database (以前称 BIN97)

- 免费与 TCC 和 TCW 以及与 TCC_Demo/TC4A 和 TCW-Demo/TC4U 一起发布；
- 覆盖 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 个二元系（液相和固溶体以及多个化学计量比相）

  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

Ø **BIN** SGTE Binary Alloy Solution Database

- 仅与以前许可的 SSOL 数据库一起发布；
- 覆盖 83 种元素（与 SGTE Binary Alloy Solution Database 版本 3 相同）；
- 包含以下 106 种二元系（液相和固溶体以及多个化学计量比相）

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				

严格象正常溶体数据库，特别设计的 BIN 模块溶体数据库必须包含关于元素、物种和相的所有类型的信息、相描述、常数、元素的热力学函数与参数、端元（化学计量比相）与溶体相二元相互作用部分、类型定义、缺省定义、参考等。

因为没有从定义的二元系拒绝或存储相的选项，一些不必要的相可能需要从数据库中拒绝（使用溶体数据库的 STEUP 文件中的关键词序列 DEFAULT_COMMAND REJECT_PHASE）或简单删除。

最重要的是，在 BIN 模块可直接使用的溶体数据库必须包含一些关于数据库整个化学系中所有二元系的描述信息，和关于如何为每个二元系计算二元相图的方法的信息。这样的信息必须用合法的 TDB 关键词 ASSESSED_SYSTEMS 来编码，在数据库启动文件的末端给出。还有，BIN 只能计算包括在 ASSESSED_SYSTEMS 描述信息单元的二元组合（joint）的各种类型相图（和热力学函数曲线与相分数图）。

关键词 ASSESSED_SYSTEMS 和对后续描述信息单元编码的方式在本指南的 6.3.18 节中进行了详细描述。

给出 Fe-Cr-Ni-C 系估价了的二元系信息的例子如下

ASSESSED SYSTEMS

C-CR(;P3 *)　C-FE(;P3 *)　C-NI(;P3 *)

CR-FE(TDB –HCP ;G5 C_S:BCC/CR:VA ;P3 STG:.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，BIN 模块中可使用任何包含适当 ASSESSED_SYSTEMS 描述信息单元的溶体数据库。因此，在一般的溶体数据库扎或在用户指定的溶体数据库中能够总是对 ASSESSED_SYSTEMS 描述信息单元编码，并将其用于不同目的的 BIN 模块。

这种溶体数据库，与 BIN 模块一起，对已经严格评价的二元系的各种相图（和 Gibbs 能曲线与相分数图）的系统研究特别有趣。

10.4.3 特定 BIN 计算的演示实例

在\TCEX\区（TCEX1.TCM 和 TCEX13.TCM）和在 Thermo-CalcExamples Book 中有两个例子，说明了如何进行各种 BIN 模块计算和图形加工：

例 1：TCEX1.TCM　BIN 模块主选项 P（相图）计算的演示，以及各种二元相图和性质图的进一步正常 TCC 命令行计算与图形加工，通过各种在线帮助特性。

例 13：TCEX13.TCM　二元系主选项 P（相图）和 G（Gibbs 能曲线）计算和图形加工的演示。

10.5 TERN 模块

10.5.1 TERN 模块的描述

象二元相图一样，三元相图广泛用于各种材料设计与工程、材料化学、化学、地球化学、环境化学等。对三元合金系的大量实验研究已经进行了整个上个世纪，因此这样的三元相图对合金开发特别有用。ASM International 在实验数据和一些拓扑方法的基础上出版的“ ASM Binary Alloy Diagrams ”系列版本已经被材料研究与开发界广泛使用。Thermo-Calc 软件/数据库/界面软件保重使用的高级计算热力学方法提供了更复杂的方法来进行研究相图和很多其它钢与合金热力学性质，以及大量工业与自然材料（陶瓷、无机材料、有机物质、聚合物、矿物、核材料等）。使用一些已经建立的热力学模型和数据库、强大的计算和模拟工具和易于使用的模块可精确计算和绘制所有类型相图和性质图，正如本用户指南的第 3 部分和很多最近出版物中所描述的那样。

使用 TCC 中传统的命令行程序，可容易计算和绘制各种类型相图（等温断面、单变线或三元系（A-B-C）中液相面等温投影、等值面、垂直断面等），总结于 8.5.2 节中表 8-1。这个可通过命令行模型来完成，即 TDB 模块中定义三元系并获得热力学数据（对所有端元和二元与三元相互作用）、处理（如有必要）GES 模块中相描述与参数、设定 POLY 模块中计算条件和 mapping 变量以及指定 POST 模块中相图表示。以此方法，也可计算和绘制伪三元系（或称准三元系，如 $CaO-MgO-SiO_2$）的相图。当然，三元相图或性质图的计算与图形加工中宏文件的使用将使这样的命令行计算与图形加工更简单和更有效，例如\TCEX\区中的 TCEX3.TEM、TCEX14.TEM、TCEX17.TEM 和 TCEX37.TEM 和 Thermo-Calc Example Book 中的例子

为了使用户界面更容易和更直接，从 TCC 版本 M 起有特定而已与使用的模块即 TERN 模块，其被构造为简单的基于问题行的结构，用户仅需要提供一些适当的回答。对应与其量各主选项，此模块可直接而自动计算和绘指定义的三元合金系的两种特定类型相图：

- Ø 等温断面：　使用体系中两个组元成分作为 X/Y 轴，在特定温度（°C）处整个三元系（A-B-C）；
- Ø 单变量线：　使用液相中两个组元成分作为 X/Y 轴并使用液相温度（°C）作为 Z 轴，关于整个三元系液相的。

此外，利用 TERN 模块计算结果，在接下来的 POST 模块中的图形加工过程中（或者立即在完成 TERN 模块计算和缺省绘图之后，或者直接通过 TERN 模块*.POLY3 文件），可产生很多各种类型相图和性质图。还有，利用保存的或重新打开的 TERN 模块 POLY3 工作区（ISOTERN.POLY3、MONOVAR.POLY3 或其它复制的*.POLY3 文件）可指导三元系各种性质图的其它 POLY 计算或与 POST 相联系的图形加工。

要注意，对三元系等值面、垂直断面、液相面等温投影，TERN 模块不能计算，相反，应使用正常命令行结构模块（参考 8.5.2 节）。

TERN 模块的程序很简单，具有少数几个步骤来完成三元系等温断面或单变线（关于液相）的计算和图形加工，描述如下：

步骤 1：选择合适的溶题数据库

此模块请求将返回所有热力学数据库合适的溶题数据库。基本上，数据库中要有端元性质、二元与三元相互作用参数和所有评价的体系信息（至少是要计算和绘图的三元系）。这样的溶体数据库可基于普通溶图数据库（预示着有二元、三元和高阶相互作用数据），而通常是为 TERN 模块而特别设计的（见下一节 10.5.2 种更多细节）。用户液可切换到自己的溶题数据库来满足 TERN 模块计算的基本要求。

步骤 2：指定三元系

必须给出当前切换的溶题数据库中有的三个元素的名称（在一行中，两者之间有一空格，或在三行）。

步骤 3：指定主选项

程序询问（当两个主选项时）是计算并绘制相图（P，缺省）或者是单变线（M）。

对主选项 P，程序请求特定温度，在此温度下计算三元系的等温断面。

步骤 4：自动计算并绘制希望的图

模块自动执行如下任务：

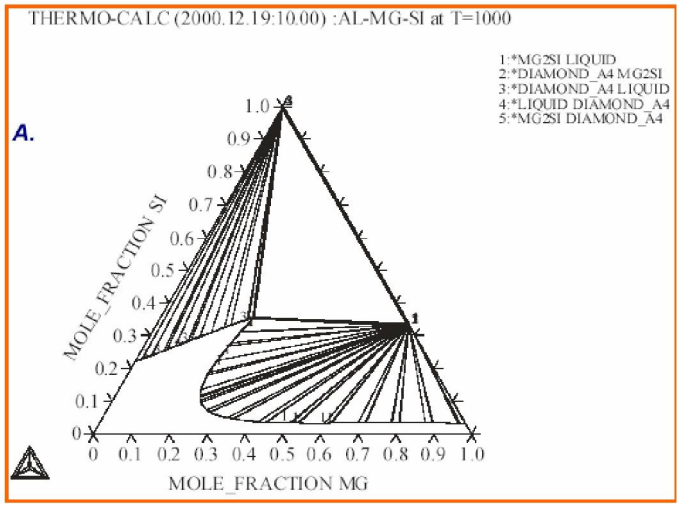
- Ø 从选定的数据库中返回所有热力学描述和信息；
- Ø 对希望的计算定义初始平衡条件[注意，对主选项 P 计算，指定温度值总是设定为一个条件，任何相都不设定为具有固定的相状态；而对主选项 M 计算，总是将缺省的液相的相状态设定为固定在 1 摩尔，并让温度沿单变量线变化]；
- Ø 设定 mapping 变量[对主选项 P 和 M，总是将第二和第三元素的摩二分数分别作为第一和第二 mapping 变量，并且变化范围都从 0.0 到 1.0]；
- Ø 计算开始点；
- Ø 进行 mapping 计算；
- Ø 在屏幕上绘制第一个期望的三角形图。这是所选主选项 P 或 M 的缺省输出，其轴变量的设置总是如下：
  - l 对主选项 P：X=X(2^{nd}E1)　第二元素的摩尔分数
    Y= X(2^{rd}E1)　第三元素的摩尔分数
  - l 对主选项 M：X=X(2^{nd}E1)　第二元素的摩尔分数
    Y= X(2^{rd}E1)　第三元素的摩尔分数
    Z=T-C　温度（°C），表示为 tic-mark 比例 Z 轴值与整个三元成分空间投影液相温度之间相互关系，如 Z-axis=436.4+50.71*Z

在轴类型、轴文本、轴尺度因数（对三个轴总是从 0.0 到 1.0）、曲线标注选项（主选项 P 为 B 或 N，主选项 M 为 D）、颜色与厚度（文本与轴、不变平衡点、结线和固溶读等其它线）、字体与尺寸（标注与号码）、图题与子标题、tic-mark（主选项 M 中有的）等进行缺省设置。

主选项 P 计算的缺省图题由三元体系名和计算温度值所组成，如“ A-B-C at T=t ”，其中 A、B 和 C 为按字母顺序排列的元素名，t 为温度（K）。主选项 M 计算的缺省图题总是为‘ Monovariant lines in A-B-C ”，其中 A、B 和 C 为按字母顺序排列的元素名。

图 10-3 说明了分别对应于主选项 P（等温断面相图）和 M（单变量线曲线）的 Al-MgSi 三元系的两个 TERN 模块产生的图的例子

同时，*.POLY3 文件将自动保存在当前目录下，主选项 P 用缺省名 ISOTERN.POLY3，主选项 M 为 MONOVAR.POLY3。这些*.POLY3 文件可在 POLY 模块中重新打开，以便指导 POST 模块中其它相图和性质图的进一步图形加工，或直接在 POLY 模块中进行其它类型 mapping 或 stepping 计算。注意，在用同样的主选项进行 TERN 模块计算之前，这样的文件必须复制（若特定 POLY3 还在处理中）或重命名（若已经退出 POLY3 工作区）到其它文件中。



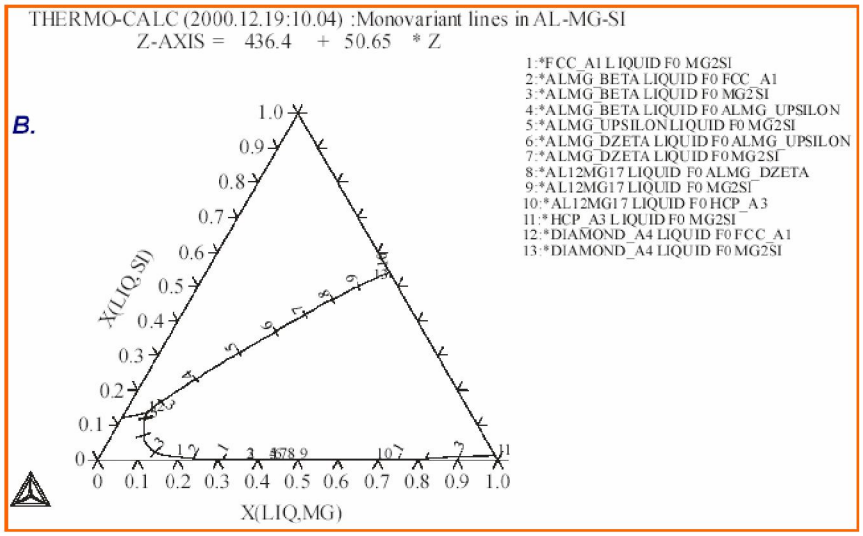


图 10-3 Al-MgSi 三元系等温断面（1000K）和液相面的投影单变量线，用 TERN 模块自动计算的（输出分别对应于两个主选项 P 和 M）

步骤 5：进一步细化产生的相图或 Gibbs 能曲线或相分数图。

最后，模块总是结束在正常的 POST 模块中，以便按其所望进一步加工和处理自动产生（第一次）的图。

用户现在可利用所有类型 POST 模块命令来细化图，通过改变图类型（三角形或正交），修正和/或添加轴类型、轴文本、轴尺度因数与方式、轴记号状态、结线状态、曲线标注选项、相区或性质标注文本、颜色与厚度、图题与子标题、轴长度、图尺寸等的设置。

也可重新设定组元的参考态，悬挂和/或存储来自或处在绘制的图上的相，施加实验数据到计算的图上，改变绘图选项以及指定适当绘图格式。

在这样进一步加工之后，用可选择在连接的打印机上打印产生的图，将图保存为图形文件（利用优选字体与颜色）、将图倾卸到图形设备上（也保存为图形文件）或将导出产生和修正的图的曲线、值线和点以及一些图形设置的完整 X/Y 坐标导出到 EXP 文件上。见第 9 部分的各种 POST 命令的细节。

步骤 6：进一步绘制其它类型相图或性质图

若用户希望，使用相同计算结果（当前运行中或重新打开的 ISOTERN.POLY3、MONOVAR.POLY3

或其它复制的 TERN 模块*.POLY 文件中保存的）可在 POST 模块监视器中产生很多其它类型相图或性质图。用户将为新图定义适当的轴变量，可马上利用所有类型 POST 模块命令来重新定义和严格细化图，正如上一步描述的那样。

可通过选择作为状态变量（内部变量、能量变量、成分与构成变量之中）或导出变量的合适平衡量。也可输入一些附加符号（函数或变量或标），可用作新的轴变量或用作制表。

通常，体系成分变量（如摩尔 N、质量 B、摩尔分数 X、重量分数 W）或稳到相中三个元素（组元）中任何一个的活度（AC 或 ACR）（对主选项 M，即仅对液相）也可用于独立轴变量。然而，若主选项 M 以前已用于计算中，温度条件 T（K）或 T-C（°C）也可设定为独立轴变量。

对于定义第二轴变量，可选择任何合适的平衡量。若在 POST 模块绘制用 Z 轴投影的三角图，或者若使用适当图形软件产生三维图，甚至可以用与定义第二个轴定义同样的方法第三轴变量（Z 轴）。

这些可总结如下：

- 对于主选项 P：X/Y=C/A(E1)　体系中一个元素的成分/活度
  或 C(E1,ph)　稳定相中一个组元的成分
  或 AC(ph,E1)　稳定相中一个组元的活度
  X/Y/Z=　体系量或组元或相中任何平衡，相应沿相边界（和结线、单变量线与不变点的变化
- 对于主选项 M：X/Y=C/A(E1)　体系中一个元素的成分/活度
  或 C(E1,ph)　稳定相中一个组元的成分
  或 AC(ph,E1)　稳定相中一个组元的活度
  或 T/T-C　温度（K 或°C）
  X/Y/Z=　体系量或组元或相中任何平衡，相应沿相边界（和结线、单变量线与不变点）的变化

图 10-4 说明了分别通过两个主选项 P（相图）和 M（单变量线）产生的 Al-Mg-Si 三元系由 TERN 模块保存的*.POLY 文件的图形加工绘制的非缺省图的一些例子。

注意，由于用两个独立变量（三元系中两个组元的摩尔分数）都进行的主选项 P 计算（保存在缺省的 ISOTERN.POLY3 文件中）和主选项 M 计算保存在缺省的 MONOVAR.POLY3 文件中），可以通常用各种类型相图提交计算结果，用 X/Y 轴表示体系成分（两个元素即组元的摩尔分数 M-F、摩尔百分数 M-P、重量分数 W-F、重量百分数 W-P）或依赖成分的状态变量（如两个组元的活度 AC 或 ACR），对主选项 P 在定义温度处沿相界（和结线、单变量线与不变点），或对主选项 M 在可变温度下沿液相与两个固溶体相一同稳定的液相单变量线，可绘制三元系相图的等温三角形或正交断面。

若这些变量中只有一个设定为一个轴，而的为体系或组元中其它特定平衡量设定为其与的轴，可绘制性质图。在这样的性质图中，曲线/线/点将仅表示主选项 P 时定义温度下沿相界（和结线、单变量线与不变点）或主选项 M 在可变温度下沿液相与两个固溶体相一同稳定的液相单变量线的特定平衡性质的变化。

此外，可对已经定义的一些热力学性质和平衡量进行沿一个 mapping 变量（主选项 P 或 M）制表和绘图。

10.5.2 特殊 TERN 模块数据库的结构

如上所述，TERN 模块自动从切换的合适溶体数据库中返回所有热力学数据，其中出了各相的标准热力学性质外必须有各种二元与三元交互左右参数和所有评价体系的信息（至少是对要计算与绘图的三元系）。通常，这样的溶体数据库特定为 TERN 模块而设计，但也可以是具有附加 ASSESSED_SYSTEM 信息单元的一般溶体数据库（预示着存在二元、三元和高阶相互作用数据）。用户液可切换到自己的溶体数据库来满足进行 TERN 模块计算的基本要求。

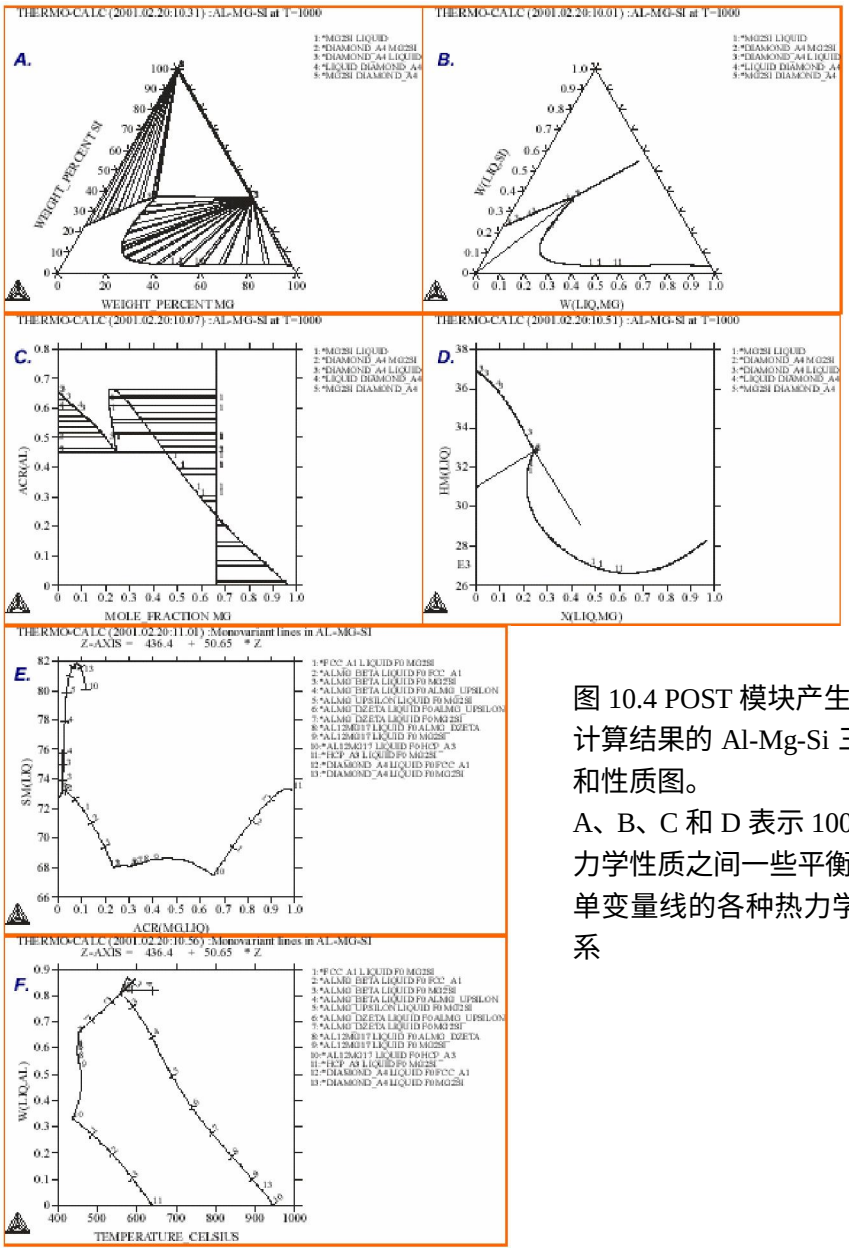


图 10.4 POST 模块产生的基于主选项（P&M）计算结果的 Al-Mg-Si 三元系的其它类型相图和性质图。

A、B、C 和 D 表示 1000K 时沿相界的各种热力学性质之间一些平衡关系；E 和 F 绘出了沿单变量线的各种热力学性质之间一些平衡关系

在目前时刻，有一个直接用于 TERN 模块而特别设计的三元和金融体数据库，描述如下：

Ø **PTER** TC Public Ternary Alloy Solutions Database (以前称为 TER98)

- 免费与 TCC 和 TCW 一起发布，也与 TCC_Demo/TC4A 和 TCW-Demo/TC4U 一起发布
- 覆盖 7 种元素（Al-C-Cr-Fe-Mg-Si-V）
- 包含以下 3 个三元系（液相和固溶体以及化学计量比相）

Al-Mg-Si　　C-Cr-Fe　　C-Fe-V

严格象正常溶体数据库一样，特别设计的 TERN 模块数据库必须包含所有类型的关于元素、端元（化学计量比相）、溶体相的二元与三元交互作用接合点、类型定义、缺省定义参考等信息。

因为没有从定义的三元系中拒绝或存储相的选项，一些不必要的相可能需要拒绝（使用溶体数据库的启动文件中的关键词序列 DEFAULT_COMMAND REJECT_PHASE）或简单地从数据库中删除。

最重要的，可直接用于 TERNARY 模块的溶体数据库必须包含一些数据库的整个化学系中所有三元系（已经严格评价）和关于如何计算每隔三元系的三元相图的方式的所有描述信息。这样的信息必须用

合法的 TDB 关键词 ASSESSED_SYSTEMS 编码，并在数据库的启动文件末端给处。此外，TERNARY 模块将仅能计算包括在 ASSESSED_SYSTEMS 描述信息单元中的那些三元系的各种类型相图（和单变量线）。

关键词 ASSESSED_SYSTEMS 和后续描述信息单元编码方式在本用户指南 6.3.18 节中进行了祥述。

给出 Al-C-Cr-Fe-Mg-Si 系中评价过的三元系信息的例子如下：

ASSESSED SYSTEM AL-MG-SI(;P3 *) C-CR-FE(;P3 *) !

在实践中，包含适当的 ASSESSED_SYSTEMS 描述信息单元的溶体数据库可用在 TERN 模块中，因此，总能在一般溶体数据库中或在用户指定的溶体数据库中对 ASSESSED_SYSTEMS 描述信息单元，然后用于不同用途的 TERN 模块中。

这样的溶体数据库，与 TERN 模块一起，对系统研究已经严格评价的三元系的各种类型相图（和单变量）有特殊意义，特别是对教学有用。

然而，PTER 数据库仅是一个具有一些公开数据的可仿效的数据库，初步目标是演示模块。着重推荐用户构建 TERN 模块计算的用户自己的数据库/数据序列。

10.5.3 TERN 模块计算的演示实例

在\TCEX 区（TCEX3.TCM）和 Thermo-Calc Examples Book 中由一个例子，说明了如何进行各种 tern 模块计算和图形加工：

例 3　TCEX3.TCM　C-Cr-Fe 三元系 TERN 模块主选项 P（相图）计算以及各种三元相图与性质图的一些进一步正常 TCC 命令行计算和图形加工的举例。

10.6 POT 模块

在金属-气体交互作用系，某些温度和压力下所谓的势图（用两个主要气体物种作为 X/Y 轴来绘图）对研究金属氧化物、硫化物、硫酸盐、碳酸盐、硅酸盐、氮化物、硝酸盐等以及其与交互作用气体混合相的关系是有用的。使用 TCC 中传统的命令行程序，可容易计算和绘制金属-气体交互作用系中各种势图，第 8 部分的祥述。

10.7 POURBAIX 模块

10.8 SCHAIL 模块

10.9 REACTOR 模块

第 11 部分 Gibbs 能系统模块（GES）

11.1 引言

Gibbs Energy System(GES)⇔是 Thermo-Calc 软件的基本模块，具有热力学计算全面的子程序包。该模块与 Thermo-Calc 和 DICTRA 中基本和高级模块交互地连接。大多数用户将从未使用 GES 模块，除非进行评价。

GES 模块的目标是，提供一套统一的子程序用在需要热力学数据的任何应用程序重。各种物质的所有类型热力学模型执行在 GES 模块中，然而，大多数依赖于模型的特性隐藏在模块内部，应用程序程序员可利用一套标准的子程序，即组装到 TQ 和 TCAPI 界面，来计算任何成分、温度和压力下每相整体的 Gibbs 能或其中的任何偏导数。

有一个子程序解析地计算 Gibbs 能对任何变量的一阶和二阶偏导数，是 Thermo-Calc 软件与其应用编程界面的独特特性。

GES 模块也给应用程序用户提供具有简单而通用的数据处理命令的用户界面，通过这样的用户界面，可交互地登录和修正相描述、模型廉洁、基本热力学参数等。本用户指南的目标是描述这个用户界面。

POLY 和所有其它基本的和特定模块，以及 DICTRA 程序，交互地访问 GES 系统内子程序来计算任何热力学量。

GES 是 Scientific Group Thermodata Europe(SGTE)定义的热力学计算标准软件界面工具。

GES 模块中有如下命令：

GES:?

AMEND_ELEMENT_DATA	ENTER_SPECIES	LIST_STATE
AMEND_PARAMETER	ENTER_SYMBOL	LIST_SYMBOLS
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	LISTPARAMETER	
ENTER_PHASE	LIST_PHASE_DATA	

GES:

11.2 热化学

热化学体系的 Gibbs 能是成分、温度和压力的函数。这些变量常数值的体系稳态用 Gibbs 能最小表示。GES 不提供任何寻找稳态的程序但利用 GES 这样做的方法在文献中有描述。

11.2.1 一些术语的定义

为了描述 GES 的结构必须定义几个术语：

- 元素（Element）是周期表中的元素外加空位（记为 Va）和电子（记作/-或 ZE）。空位用于描述与具有亚点阵的相中化学记量比的偏离。用户也可输入假想元素。
- 物种（Species）用于描述分子如可带有电荷的集合体。所有元素也是物种。
- 组元（Constituent）是构成相的物种。相的组元是物种的子集。
- 相（Phase）是体系中具有均匀成分和结构的均匀部分。在 GES 中所有热力学数据是针对相和其组元的。
- 相的成分（Coposition）是相的每个组元的量。
- 组元组（Constituent array）是一组组元，一个组元组来自相的每个亚点阵。
- 位置分数是亚点阵中一个组元的分数。每个亚点阵中位置分数之和等与 1。

11.2.2 元素与物种（Elements and species）

GES 模块中体系中的元素按字母顺序存储在列表中。字母顺序有两个例外。电子总是第一个空位总是第二个元素。在元素列表中每个元素指定一个编号，编号从电子的-1、空位的 0 开始，1 和以上的位其它元素。元素勇气一个或两个字母的名字来识别（仅有的例外是电子记为/-或 ZE）。只有与元素相联系的化学与物理数据是原子质量、选定元素参考态（SER）的名称和相对 0K 熵与焓差的 298.15K 时 SER 的值。

物种列表主要是为程序中的内部应用。但将弹性添加到体系，因为物种具有化学记计量比式和可以不同于化学记计量比的名称。作为相的组元，物种用其名来查阅，可容易区别计有同样化学记计量比但不同热化学性质物种，如具有同样化学记计量比 C2H2C12 的 C2H2C12_cis 和 C2H2C12_trans。物种的名称包括字母、数字、括号和字符（底线），必须以字母开头。注意，物种列表中的物种不涉及任何项，仅作为相的组元，有与物种相联系的热化学性质。

11.2.3 大小写模式

GES 模块可使用大小写模式。用户用 REINITIATE 命令选择模式。

在小写模式中，强制元素名的第一个字母大写，第二个和以后的小写。大写模式下，大小写处理为相同。物种的化学计量比一些情况下更简单地以小写模式来书写，如 CO 可用作一氧化碳，而大写模式下相同物种必须写成 C1O，因为 CO 将意思是钴。

11.2.4 相

热化学体系必须至少有一向。在 GES 模块中，对一个体系可输入任何数目的相，每象必须有一个 Gibbs 能如何随温度、压力和成分变化的描述。

因此一相有大量数据与其相关联，如：

- 一列组元；
- 可能有关于亚点阵等的结构信息；
- 关于用于描述任何两个组元间（见规则溶体模型中的信息）相互作用的多项式种类的信息；
- 可能有来自特定物理现象对相的 Gibbs 能贡献，如磁有序、假定的静电交互作用等；
- 描述存储的与相有关的热化学性质和特定物理性质[如居里温度、波恩（Born）函数]所需要的所有信息。

依赖于成分的 Gibbs 能在 GES 中用内部数据结构来描述，当输入相时创建。关于数据结构将在 11.5 节中进一步描述。相的 Gibbs 能总是涉及相的一个公式单位，即从每个亚点阵位置数中导出的量。若空位是亚点阵的组元，相中每个化学式中物质的量可随成分变化。在相的热化学描述中，有大量的参数依赖于温度和压力。这些参数的表达式可在用 T 和 P 的幂的和的非常自由的形式给处，也包含自然对数和指数函数。典型的表达式为 TP-function，在下一段将更详细描述。

11.2.5 温度与压力的函数

GES5 工作区中与温度与压力有关的参数描述为称作 TP-function 的类似于 FORTRAN 表达式。输入这样函数的规则是相当严格的。

TP-function 的基本实体称作“简单项（simple term）”，即

<a real number>*<a symbol name>**<exponent>*T** <exponent>*P** <exponent>

<>内的文本描述了期望的因数。必须逐字给出其它量并具有通常含义，即*为乘，**为指数。指数仅是整数。负指数必须用括号括起来。简单项的多余部分可省略。

简单项的例子是

```
1400
1.15*T
V1
1E-12*P**2
-456754.65*T**(-1)*P
10*V2*T
```

为了包括这些函数的对数和指数，允许用简单项乘以其它简单术语的对数和指数。代替对数和指数，也可能仅有其它符号。这个更普及的实体称作“项（term）”，这样的项的例子有：

```
1.15*T*LOG(T)
1E-6*LOG(-32000*T**(-1))
-5V3*EXP(V4*P)
0.078*V1**(-1)*T**2*V2
```

简单项与项彼此相连的写处以便形成一个表达式。

函数的例子为

```
1000-10*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);
```

通常一个函数用分号“;”或空行终止。注意，符号可表示一个数值或其它函数。

对函数的一些限制为：

- 必须服从简单项中因数的顺序；
- 除了指数、对数和负指数外不允许括好；
- 不允许除（允许负幂）；

- 符号与数值之间不允许有空格；
- 每个简单项只有一种符号；
- 只有整数才能用作指数。

这些限制中的一些应归于函数分解的简化，而一些归因于要求必须能快速计算函数的值和相对 T 和 P 的一阶与二阶导数。

这样的函数与参数如何存储在数据库中的更多信息见第 6 部分中 6.3.14（函数）和 6.3.15（参数）。

GES 命令 LIST_SYMBOL 可列出当前 GES5 工作区中已经定义的所有的和/或任何特定的符号（数值常量、数值变量、函数和表）。

除了从数据库中返回的预先定义函数外，可进一步使用 GES 命令 ENTER_SYMBOL 命令来定义其它必要的函数。此外，任何已经定义的符号可用 GES 命令 AMEND_SYMBOL 来修正。

11.2.6 符号

当输入 TP-function 时符号可对数值使用。由于热力学参数为 TP-function，这使在进一步定义参数函数时可能使用这些参数。

所有符号存储在一个列表中。实际上，此列表中的符号可表示一个数值常数、数值变量、函数和表：

- 数值常数不能改变其值，缺省时 SI 单位的气体常数存储为符号 R；
- 数值变量随时可修改其值；
- 符号列表中的函数实际是几个 TP-function，因为可能定义 TP-function 的每个低温和高温极限。这些温度断点是常数（即它们不随压力变化）。
- 当难于以任何方式表述量随温度变化时刻使用表。表中给出常数温度增量的量的值，在两个增量之间用线性插值。

可以用压力范围替代温度范围。给出低温限为-10000 来显示这个。断点将用压力来说明。基本要求是断点附近函数是平滑的，一阶和二阶导述是连续的。

符号特性使创建由 TP-function 语法提供的具有十分简单涵义的非常复杂表达式成为可能。由于符号可以是单个数值，也使同时处理所有 TP-function 的单个系数成为可能，涉及修正符号值的符号。在 PARROT 模块中（热力学数据的评价），这个特性用于调整相的描述以便获得与实验数据的最佳匹配。输入 TP-function 可使用的所有符号存储在 GES5 工作区的符号列表中。

GES 命令 LIST_SYMBOL 可列出所有和/或当前 GES5 工作区已经定义的任何特定符号（数值常数、数值变量、函数或表）。

除了从数据库中返回的预先定义的符号外，可使用 GES 命令 ENTER_SYMBOL 来定义其它必要的符号。此外，已经定义的任何符号可使用 GES 命令 AMEND_SYMBOL 来修正。

11.2.7 混溶裂隙

一相可同时存在量各或更多不同成分，通常称作混溶裂隙，也可归因于有序反应。相同的热力学参数描述两个相，但 GES 模块必须事先告知可有两个和更多成分序列，或在 GES 模块或在 POLY 模块中。见 AMEND_PHASE_DESCRIPTION 命令获得更多信息。也可见 POLY 模块中 SPECIAL_OPTION 命令。

11.3 热力学模型

每个项的积分 Gibbs 能依赖与其组成、温度和压力，用热力学模型来描述并以 GES 模块中数学方程来表示。与成分的关系通常复杂而难于找到良好模型来描述。然而，与温度和压力的关系对一些相液很复杂（如水溶液）。

GES 模块能够使用不同状态各种物质的大量热力学模型。详细情况给出如下：

表 11-1 GES 模块中执行的大量溶力学模型。

GES 中模型名	模型全名	适用的相
理想	理想间隙模型	理想气体
规则	规则溶体模型	二元合金
Redlich-Kister	Redlich-Kister 模型	二元合金

Redlich-Kister Muggianu	Muggianu 模型	三元或高阶有序合金
Redlich-Kister Kohler	Kohler 推断模型	三元或高阶有序合金
CEM	化合能模型（亚点阵模型）	合金、液体、气体、氧化物、…
TSILM	两个亚点阵离子液体模型	液体
缔合(Associate)	缔合模型	液体、矿渣
准化学	准化学模型	液体、矿渣
KFCM	Kappor-Frohberg 元胞模型	液体
MO	易欣磁性有序模型	合金
CVM	通过 CVM 方法的化学有序	合金
Muggianu	Muggianu 模型	高 PT 矿物/合金
Birch-Muggianu	Birch-Muggianu 模型	额外高 PT 矿物
超流体（SUPERLIQUID）	超流体（SUPERLIQUID）模型	真是气体和气体混合物
DHLL	Dedye-Hückel 有限定律	稀水溶液
SIT	特定离子交互作用理论	稀水溶液
PITZ	普适化 Pitzer 体系	浓水溶液
HKF	修正的 Helgeson-Kirham-flowers 模型	浓水溶液
FLORY	Flory-Huggins 模型	聚合物

对高级用户，可选择每相的特定模型，对一般用户，数据栈将为每相选择合适的模型。在任何模型中积分 Gibbs 能由依赖于温度和压力的参数所组成，并以组元因数相乘。

11.3.1 标准 Gibbs 能

最简单类型相仅有一种元素组成组元，仅有的参数是相的“标准”Gibbs 能。标准的 Gibbs 能为一下两者的差：

- 当前温度和压力下相的 Gibbs 能
- 元素 SER 态中 298K 和 1atm 时的焓。

对局有多于一个组元的相，有必要给出每个组元（或者若相有亚点阵则每个组元组）的标准 Gibbs 能。组元可以是几个元素组成的物种，但标准 Gibbs 能总是涉及元素的 SER 态。

使用标准 Gibbs 能而不是计算合金相图经常使用的“点阵稳定性”的原因时，可以计算热容和绝对焓差。

11.3.2 理想置换模型

对于具有可变组元的相，最简单的模型是理想置换模型（Ideal Substitutional Model）。此模型中，组元与元素相同，参数为此相中元素的标准 Gibbs 能。这些参数可与组元的分数相乘，添加混合的理想熵以便计算积分 Gibbs 能。

11.3.3 规则溶体模型

为了实际描述相的 Gibbs 能，理想置换模型通常是不够的，选择可靠模型有很多可能性。

规则溶体模型（Regular Solution Model）中，引入了相的每对组元的参数。通过与相同与不同原子之间键能的差异比较，也能给出这个“二元交互作用”参数的一些物理意义。此参数乘以两组元分数，当此分数为零时此参数没有给出贡献。

简单的二元参数在很多情况下是不够的，有大量所为的“过剩（excess）”模型，它使用以分数表示的各种幂级数以便描述二元参数如何依赖于成分。当相只有两个组元时所有这些是相等的，因为使用分数的总和为一的事实可在它们之间互相转换。因此，GES 模块仅被编程来处理已知为 Redlich-Kister 模型的幂级数。这个幂级数通常写成多项式：

X1*X2*(L0+L1*(X1-X2)+L2*(X1-X2)**2+L3*(X1-X2)**3+…)

其中 X1 和 X2 是组元分数，L0、L1 等是温度和压力的函数。因此 L0、L1 等描述了二元参数如何依赖于

成分。

为了将二元西外推到三元和更高阶系，自然的做法是使用来自以上表达式中三元系的分数，称作 Muggianu 模型。然而，当二元分数的总和不为 1 时，二元参数幂级数的另一种选择将给出不同的结果。这个差异已经引起一些关于通过选择幂级数和外推模型描述体系不对称特性可能性的讨论。

由于必须有这个不对称的物理原因，GES 使用更一般的亚点阵模型（Sublattice Model）。只是为了使用其它程序进行选定的计算成为可能，GES 允许使用所谓的 Kohler 外推模型（Kohler Extrapolation Model）。

GES 体系不限于二元相互作用参数，若有足够的信息来从实验数据中估价，三元、四元和更高阶参数可使用。三元相互作用参数很稀少的，在一些情况下，建议依赖于成分。在 GES 中，遵循 Hillert 建议，可能有的三元相互作用参数为

X1*X2*X3*(V1*L1+V2*L2+V3*L3)

其中 X1、X2 和 X3 分别为组元 1、2 和 3 的分数，而

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 只是 T 和 P 的函数。在三元系 1-2-3 种 Vi 和 Xi 是相同的，但在外推到四元和更高阶系是 Vi 的总和总是 1，而 Xi 的总和不一定是 1。

L1、L2 和 L3 参数有 ENTER_PARAMETER 命令中的 degree 来识别。若 L1、L2 和 L3 相等，仅需要具有 0 degree 的单个参数。

若有依赖三元成分的参数，必须输入所有三个参数 L1、L2 和 L3。这确保用户知道要做什么。若三元参数为零，则赋予它为零的函数或给出一个很小的值。

在体系 A1、A2 和 A3 中，置换相如液相的三元参数应是：

L(LIQUID,A1,A2,A3;0)要乘以 V1

L(LIQUID,A1,A2,A3;1)要乘以 V2

L(LIQUID,A1,A2,A3;2)要乘以 V3

11.3.4 使用组元而不是元素

在气体混合相中，经常有形成的分子，气相组元数经常大于元素数。对水溶液液是如此，有时对其它液相也是如此。甚至一些晶态固体是由分子而不是单个元素形成的。不是一种元素的组元要求的标准 Gibbs 能为，相对于形成组元的 SER 态元素的组元标准 Gibbs 能。在具有非元素物种的相中，可引入相的各组元相互作用参数，如以下模型所描述的（缔合模型、亚点阵模型、离子液体模型、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

若原子大小、电负性或电荷十分不同，它们更喜欢晶态固体的点阵中不同类型的位置。在一些情况下，溶质原子恰好占据正常点阵位置之间的间隙位置。所有这样的现象在 GES 中均用亚点阵的概念来处理。

具有亚点阵的相的混合熵计算为，每个亚点阵上组元的理想混合熵乘以亚点阵上位置数的和。若相的成分为每个亚点阵有单个组元，因此没有混合熵。

通过引入亚点阵，热力学中很多传统的概念对一般情况变得复杂。例如，例如，不能给出相的单独元素的偏 Gibbs 能的明确公式。为了用亚点阵描述相的热化学，有必要引入组元矩阵（constituent array）概念。组元矩阵是指定每个亚点阵中一个组元的矩阵。具有亚点阵的相 Gibbs 能的参考表面由所有可能组元矩阵的标准 Gibbs 能来构建。交互作用参数可用无亚点阵的相的相同方法来表示。

对亚点阵模型的全面描述，或更一般参考化合物能量模型，请参考 Hillert(1998)、Sundman 和 Agren(1985)。

11.3.6 离子液体模型，对具有有序化趋势的液体

离子液体在某些成分处通常有很低混合熵，符合离子的中性组合。

依据 Temkin 的建议，可通过假定阳离子彼此混合和阴离子彼此混合来模型化。数学上，等同与亚点阵模型，已经为晶态固体来描述。液体的复杂性为阳离子和阴离子亚点阵的位置数可随成分变化。

Hillert 详细讨论了这个问题，GES 中已经实现了一般公式即**两个亚点阵离子液体模型**。

11.3.7 缔合模型

在一些情况下，已经假定存在的分子作为组元，以便描述液体相的实验数据。这样的分子的生命周期可能很短，以至于不能找到一个独立的实体，引进缔合以便描述围绕某些成分的倾向。若有元素之间共价键合的倾向支持缔合的存在。

Thermo-Calc 软件包中执行的缔合模型将这类相处理违纪有分子的“ 气体混合 ”相，分子之间可能有交互作用项。

11.3.8 准化学模型

准化学模型还处于实验状态。液相可改进为离子液相（QUAS_IONIC 相），其熵可用准化学模型计算。

11.3.9 对 Gibbs 能的非化学贡献（如铁磁）

11.3.10 既有有序-无序转变的相

11.3.11 CVM 方法：关于有序/无序现象

11.3.12 Birch-Murnaghan 模型：关于高压贡献

在高压（和高温）条件下，金属、矿物和其它类型的材料的状态方程（EOS）可用 Murnaghan 或 Birch-murnaghan 模型来处理，描述其 P-V-T 关系和热力学性质（Saxena 等，1992）。**Murnaghan 模型**可用于 1bar 到 20GPa，化学计量比相的 Gibbs 能可隐含地表示为温度和压力的函数。**Birch-murnaghan 模型**可用于宽的压力范围（从 1bar 到 20GPa），而化学计量比相的 Gibbs 能只能从隐含地表示为温度和压力的函数的 Helmholtz 能转换而来。对高压下与成分有关的溶体相，通常用 GES 模块中 **Redlich-Kister 模型**或通用的**化合物能量模型**来处理。

11.3.13 理想气体模型相对非理想气体/气体混合物模型

11.3.14 DHLL 和 SIT 模型：关于稀水溶液

11.3.15 HKF 和 PITZ 模型：对浓水溶液

11.3.16 Flory-Huggins 模型：对聚合物

11.4 热力学参数

从以上的讨论中，相的热化学参数是温度和压力，将其值添加到 Gibbs 能之前乘以相的组元各种分数。参数可用相和其组元组来识别，组元的分数乘以这个参数。在一些情况下，相互左右参数与成分有关（见关于规则溶体模型的 11.3.3 节），与成分相关的各项用索引数来表示。这个索引值的插值与模型有关。

大量的其它量也可与成分有关（如磁有序临界温度），也可表示为参数乘分数的函数。一些其它量可以是温度、压力和成分的复合函数[如假设的静电效应的波恩（Born）函数]。

磁和静电贡献的这样参数以依据由特定标识符描述的“ 化学 ”Gibbs 能来区别。

- Ø 对“ 化学 ”参数，标识符是 G（标准 Gibbs 能）或 L（交互作用的过剩 Gibbs 能）
- Ø 对于磁贡献，需要两个依赖成分的量，使用的标识符为：
  - ı TC 表示磁有序的临界温度
  - ı BM（或 BMAGM）为波恩磁子数。
- Ø 水溶液中静电贡献（使用完全修正的 HKF 模型），来自溶剂（H_2O）的波恩函数（X、Y、Z、ω 等）存储在 GES 模块中一些特定执行子程序的数据单元，而溶剂的波恩函数$\omega_{Pr,Tr}$使用标识符 BM 存储在正常的 GES5 工作区，（注意：类似于波恩磁子数标识符的这个标识符类似于波恩磁子数标识符仅在版本 P 中临时使用，在以后的版本中将变为 WB）。

参数的一般形式为：

<identifier>(<phase>, <constituent array>; <digit>) <xxx> <expression> <yyy>
<keyword Y or N> <zzz> !

其中

identifier 为参数类型；

phase 为相名；

constituent array 为相中特定组元矩阵；

digit 为度（仅对交互作用、临界温度和波恩磁子数；若其值为零则省略掉）；

expression 为描述参数的数学关系式；

xxx 和 yyy 分别为参数表达式的适用温度范围的最低和最高温度限；

keyword Y or N 为是否有参数表达式的继续的指针；

zzz 为参数评价的参考数；

符号！用于指示当前参数定义结束。

注意，当有必要时，可从积分的 Gibbs 能中计算诸如 H（焓）、S（熵）、V（体积）和 F（Helmholtz 能）等量，但这些量从不以显式表达式来存储。

一个参数总是于一个特定相相联系，必须提供此相的名称，其名称可缩写。

通过组元来识别参数，组元的分数与参数相乘，组元的名称可缩写。注意，需要的是组元的名称，而不是化学计量比式。若相的每个亚点阵中只有一个组元，可省略其。

堆积有几个亚点阵的相，程序将询问每个亚点阵中至少一个组元。过剩参数如规则参数或三元参数，乘以同一亚点阵的两个或更多地组元分数。这些符加的组元必须给出交互作用组元。注意，具有亚点阵的相的每个亚点阵中可有交互作用组元。

用于描述过剩量的参数必须有两个或更多“交互作用”的组元。这些组元中哪个是第一个和哪个是交互组元是任意的。当参数写在提示里时程序总是按字母顺序将组元（每个亚点阵中）分类。对于一些参数来说重要的是参数的符号依赖于这个顺序。

对于每个参数，描述数学函数的表达式必须在参数名后面给处。有的时候，一个表达式可使用几个参数（如对于元素的参考能）。在此情况下，推荐将表达式输入为函数符，进一步定义参数时可使用此函数符。

各种参数名的举例：

```
G(GAS,AL1CL2H1O1) 298.15 F243#+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 !
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+315.892*T+ZAD; 350 N 1 !
L(FCC_A1,CR,NI:VA;0) 298.15 +8030-12.88018T; 6000 N 1!
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;1) 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+6.658T; 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;2) 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_SYSBOL 可列出在当前 GES5 工作区已经定义的所有的和/或任何特定符号（数字常数、数值变量、函数或标），LIST_PARAMETER 命令可列出指定相的各种参数（若从不加密的数据库中返回）。除了从数据库返回预先定义的参数外，可进一步使用 GES 命令 ENTER_PARAMETER 或 ENTER_SYMBOL 来定义其它必要的参数。此外，可使用 GES 命令 AMEND_PARAMETER 或 AMEND_SYMBOL 来修正已经定义的参数。

11.5 数据结构

可以将前一节描述的所有模型结合起来，以相可有亚点阵、缔合物、交互作用参数、磁贡献等。每相在 GES5 工作区中也独立处理。

GES 中使用的各种模型要求数据存储必须在 FORTRON 提供的静态排列之上（beyond *static arrays*）开发。在现代计算机语言 LISP 和 Pascal 中使用的最普通的数据结构为“ ***lists*** ”。这些语言有成为语言组成部分的工具。在 FORTRON 中，有必要为这种数据结构写子程序软件包。在连接的结构中（linked structure），实际结构存储在分散在计算机存储器周围的记录中。这部分存储器通常称作堆。记录仅可通过指示器评定，记录包含指示其它记录的指示器。可创建柔性更普通的列表（lists）。列表结构的缺点是，与适合此类问题的程序相比，对简单的问题要求更长计算时间。

在 GES 系统中，工作区程序用于创建数据结构本身定义 Gibbs 能数学表达式的连接结构。这种结构用于计算积分 Gibbs 能和任何解析偏导。

11.5.1 构造

一相对每种亚点阵有一个列表，列表中存储用点阵的组元和其分数。

亚点阵用于描述从任意混合相的偏差，如具有不同尺寸的间隙或组元或电负性更喜欢相中不同点阵位置。

在化学计量比相的组元**排列**或相组元和相参数中的溶体相，各种亚点阵用“ : ”号分开，在特定亚点

阵中各组元用“ , ”号分开。更详细的信息，键 11.4 节和第 6 部分[数据库模块(TDB)-管理指南]。

11.5.2 Gibbs 能参考表面

每个相的标准 Gibbs 能参数定义相的参考表面。这些参数存储在以相记录开头的线性列表中。此列表中每个记录有指向存储分数的连续记录的指针，应乘以参数值。参数本身为 TC-function 被存储在其它列表中。

11.5.3 过剩 Gibbs 能

用于描述过剩 Gibbs 能的参数存储在**树结构**中，其根来自标准 Gibbs 能的记录。对此树的每级，有一列乘以同样数量分数的参数。下一级上，参数乘以多于一个分数。为零或不确定的过剩参数在此树简单略掉。这样节省计算时间，因为即有多组元的相的可能参数的数量远大于实际数。

11.5.4 存储私有文件

在 GES 中体系的定义和存储在计算机内存中的所有热力学数据可写在非格式化的文件（具有缺省扩展名“ GES5 ”）。以这种方式写的文件也可读回到程序。若数据栈每由于应用程序相联接，此文件存储是尽可能保存已经交互式输入的数据或在各种热力学软件之间转换的数据。注意，以“ GES5 ”扩展名书写的非格式化文件不能用于不同计算机之间转换数据。这些文件不能打印到打印机。

这样存储的*.GES5 文件在 PC Windows NT/2000/XP、Windows 95/98/ME、PC Linux 和各种 NUIX 平台上有同样的格式，它们对运行各种 Thermo-Calc 应用变成界面是基本的（如 MATLAB 中 TQ、TCAPI 和/或 TC-Toolbox）。

可在格式化的文件上作为简单文本（具有缺省扩展名“ DAT ”或“ TDB ”）写定义体系上存储信息部分和返回的热力学数据。这样的文件可在 Thermo-Calc 软件之外使用一些文本编辑器打开和编辑。

注意，从 TCC 版本 P 起对加密的数据库，不能使用此命令在屏幕上或*.DAT/*.TDB 中列出任何定义体系或体系中特定相的任何热力学数据。

11.5.5 加密与不加密数据库

从 TCC 版本 P 起（与 TCW 版本 2.1 和 DICTRA 版本 22），所有商业数据库以加密格式发布，而所有免费数据库还可使用不加密格式。这样加密数据库仅于从 TCSAB 或其代理处获得许可信息标号的特定数据库许可信息标号一起使用。加密数据库总是由带有扩展名*.TDC 的二元文件组成，而加密数据库可包含各种类型的具有不同扩展名（如*.TDB、*.DAT、*.REF 等）的文本文件。

*.TDC 数据文件不能用任何编辑器进行查看和编辑，仅在具有适当数据库信息标号文件的 TCC/TCW/DICTRA 软件内可用，由 TCSAB 为特定计算机/服务器基于从终端用户获得的唯一标识号码独自地制造的。封装或存储数据文件可用简单文本文件查看，而由于其限制结构用户应决不尝试编辑它（否则，不再能被 TCC/TCW/DICTRA 软件使用）。不封装数据文件可用简单文本编辑器十分小心的查看于编辑。用户指定数据库通常构建为不封装数据文件。

以前，数据库文件有时不依赖于 CPU，预示着 UNIX/Linux 系统和 PC Windows OS 文件是不兼容的，是由于不同数据结构。从 TCCP、TCW2.1 和 DICTRA22 起，自动转换数据库文件的标准程序已经实施，使从两种系统读取数据文件成为可能。若转换必要，程序给出警告消息。TDB 模块中热力学数据的返回和 GES 工作区中数据的存储对这样的加密数据库保持与不加密相同，而相组元的定义可使用 GES 命令 LIST_CONSTITUENT 或 TDB 命令序列 LIST_SYSTEM CONSTITUENT 来显示。

11.6 GES 系统的应用程序

GES 系统是一个子程序软件包，尽管可能使用其作为热力学量直接制表，GES 与应用程序一起正常使用，象 POLY 模块和 DICTRA 软件，需要热力学量以便进行一些计算。这种热力学计算的例子是化学反应计算、平衡计算和扩散控制相变驱动力计算。

通常，GES 系统与进行计算所需的热力学参数数据库相连接。然而，在 GES 模块中也可以交互式访问，并使用文件存储于返回这样的数据。

Thermo-Calc 软件中当前使用的 GES 系统是使用 Thermo-Calc 应用编程界面 TQ、TCAPI 和 MATLAB 软件中 TC-Toolbox 来进行用户编写程序。在此环境下，用户首先需要返回 TDB 模块中必要的热力学数

据并为特别定义体系产生 Thermo-Calc 软件的 GES 模块中*.GES 文件，然后在应用程序中打开这样的文件来进行热力学计算和动力学模拟。

11.7 用户界面

GES 模块使用一个从 **SINTRAN** 继承来的命令结构，在挪威 NORD 计算机系列（Norwegian NORD Computer Family）上的操作系统。象 Thermo-Calc 和 DICTRA 的其它模块中一样，GES 中的命令经常是一个全句和用连字号“ - ”或下划线“ _ ”分开的单词。连字号和下划线符号同样看待。若不产生模糊，则命令总是可缩写。连字号之间每部分可缩短。命令的后跟部分若其不必要则可完全排除。

对每个命令，程序通常需要一个或更多附加值，若用户在命令之后按<RETURN>键，程序将询问其值。通常，程序也建议一个缺省值作为斜线之间的答案，如/Y/或/.50/，若用户对此值满意，则可简单地按<RETURN>键。

指导程序将提问的问题的高级用户可在命令的同一行键入值作为回答，然后该值必须用空格分开。为了或的问题的缺省值，可为使用的每个缺省值键入逗号“ , ”。

对每个命令，也必须阶是其后提出的问题。通常这是与键入问号“ ？ ”在线得到的相同的信息。

一般帮助中有两个命令，然而，最重要的帮助工具是可能键入问号“ ？ ”，任何时候可被提问不能的可能性；通常，对每个命令和子提示，通过键入问号在线接受的信息与这里记录的相同。给给出程序要给出什么作为输入的简明描述。在一些情况下，通过键入两个问号“ ?? ”可获得更广泛的描述。

11.7.1 模块性和交互性

正如以上提到的那样，GES 系统是子程序软件包，可用在应用程序内部，如 Thermo-Calc。通常，应用程序由几个模块组成，并有标准的一组命令来实现各模块间切换。应用程序的每个模块通常有特定任务，因此必须使用几个模块来获得期望的结果。

GES 模块将指示，通过发出提示来准备接受输入：

GES：

然后用户必须键入 GES 命令，命令执行之后 GES 模块将再次写其提示。

11.7.2 控制符的使用

在屏幕上产生输入的命令处理过程中，通过 CTRL-S 可以停止输出，之后用 CTRL-Q 重新开始。当接受屏幕上的在线帮助时，一些情况下可能超过整个屏幕。CTRL-S 和 CTRL-Q 可用于使读取输出信息成为可能。为了打断程序的执行，可按 CTRL-C 两次。

11.8 帮助与信息的命令

通常有两种帮助命令，然而，更主要的帮助工具是，任何时候不全理解缺趁的问题时可以键入问号“ ? ”；通常地，键入问号时在线得到的信息与这里每个命令和子提示提交的信息相同。应给出程序要你给出输入简明描述，在一些情况下通过键入两个问号“ ?? ”来获得更广泛的描述。

11.8.1 HELP

描述：磁命令列出可以得到的命令或给出特定命令的解释。

提要 1：HELP <command name>

提要 1：HELP

接着提示：COMMAND: <command name>

选项：command name—要获得帮助的命令名称（GES 命令之一）

注意：没有键入命令名而按<RETURN>键将列出所有的 GES 命令。

指定唯一的命令名将在屏幕上打印出命令的解释（通常与用户指南中发现的相同文本）

键入不是唯一的缩写命令名将列出所有匹配的命令。所期望的命令信息可通过键入唯一缩写和命令全称而获得。

11.8.2 INFORMATION

描述：可用此命令获得关于 GES 主题（概念与模型）的基本信息，正如本章不同部分所描述的。

提要：INFORMATION

接着提示：WHICH SUBJECT /PURPOSE/: <subject name>

从下列对 GES 模块应用重要的主体指定应给出信息的主题（或其唯一的缩写，如 SPE、STA、STO、SUB、SUR、SYM 等），（若键入问号“？”可见到这个列表）：

PURPOSE	HELP	APPLICATION PROGRAMS
USER INTERFACE	MODULARITY	CONTROL CHARACTER
DATA STRUCTURE	CONSTITUTION	SURFACE OF REFERNCE
EXCESS GIBBS ENERGY	STORED PRIVATE FILE	ENCRYPTED DATABASE
THERMOCHEMISTRY	DEFINING SOME TERMS	UPPER AND LOWER CASE
ELEMENTS	SPECIES	PHASE
FUNCTIONS	SYMBOL	PARAMETERS
SUBLATTICES	CONSTITUENT ARRAY	MISCIBILITY GAPS
MODELS	STANDARDISED GIBBS ENERGEY	IDEAL MODEL
REGULAR MODEL	USE OF CONSTITUENTS	COMPOND-ENERGY MODEL
IONIC LIQUID MODEL	ASSOCIATED MODEL	QUASICHEMICAL MODEL
NON-CHEMICAL TERMS	FERROMAGNERISM	BORN FUNCTIONS
ORDER-DISORDER	CVM APPROACH	BIRCH-MURNAGHAN MODEL
AQUEOUS SOLUTIONS	DHLL AND SIT MODEL	HKF AND PITZ MODELS
FLORY-HUGGINS MODEL	GAS EOS AND MIXING	

11.9 改变模块与终止程序命令

11.9.1 GOTO_MODULE

描述：此命令完成明快之间的切换。必须键入期望的模块名。为了获得一组模块，按<RETURN>键。

提要 1：GOTO_MODULE <module name>

提要 2：GOTO_MODULE

接着提示：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
TERNARY_DIAGRAM

MODULE NAME: <module name>

选项：module name—随后打开的模块名。

11.9.2 BACK

描述：此命令切换控制回到最近模块，见 GOTO_MODULE。

提要：BACK

11.9.3 EXIT

描述：此命令终止程序和返回到操作系统。除非已经执行了 SAVE 命令（在 GES、POLY 或 PARROT 命令中），否则将丢失所有数据与结果。

提要：EXIT

11.10 输入数据命令

通常，GES 模块与数据库一起使用，从数据库中获取必要的数据。高级用户需要对定义的体系添加数据，因此 GES 提供输入基本实体元素、物种和相的命令。也有输入辅助量如符号等的命令，可用于输入热化学参数。

11.10.1 ENTER_ELEMENT

描述：用户用此命令交互指定体系。程序将查找当前切换的或预先设定数据库来为给定元素获取数据。

数据库中元素的数据为：

- 质量；g/mol；
- 298.15K 通常是稳定相中选定元素参考（SER）态的名称；
- 298.15K 与 0K 时 SER 态中元素的焓差；
- 298.15K 时 SER 态中元素的绝对熵

两种预先定义的元素即电子和空位分别具有化学符号/-和 VA。最初，这些是悬挂的而用此命令或 CHANGE_STATUS 命令输入。

若涉及水溶液相，应在 GES 模块输入称为 ZE 的特定水溶液中电子。这是为水溶液体系中适当计算标准电子势而特别设计的。

提要 1：ENTER_ELEMENT <element name>

提要 2：ENTER_ELEMENT

接着提示：ELEMENT NAME <element name>

用户可在一行上指定几个元素。元素名是其化学符号。化学符号必须用空格分开。假想的元素名为合法的，而在数据库中将会发现没有数据。

注意，元素名可以使第一个字母大写第二个字母小写（即小写模式）或都是大写或小写（极大写模式）。用 REINITIATE 命令选择大写或小写。注意，REINITIATE 命令移走所有数据，因此在任何其它命令之前应执行它们。

11.10.2 ENTER_SPECIES

描述：用户可交互地指定有已经输入的元素组成的物种。对每个物种，必须给出其名称和化学式。注意，所有元素作为物种同时自动输入。相的组元必须是物种，除了作为相的组元没有与物种相联系的热力学数据。

提要 1：ENTER_SPECIES <species name> <chemical formula>

提要 2：ENTER_SPECIES

接着提示：SPECIES NAME: <species name>

用户必须提供物种的唯一名称，通常式化学式但可以是以字母开头的仅包含字母或数字、括好“ () ”和下划线“ _ ”的任何串。用于表示电荷的特定组合/-或/+也是合法的，例如

NACL2、FE2O3、FEO3/2、FE1O1.5、CA.5MG.5SI1O3、AL1H1O1_A1(OH)、AL1H1O1_HA1O、C2H4O3_124TRIOXOLANE、NA+、SIO4-4、H1/-1、AGC2N2-1

物种名可用于以相同化学计量比分开异构体，如：

C2H2C12、(CHC1)2_cis，(CHC1)2_trans，CH2_CC12

STOICHIOMETRY /species name/: <chemical formula>

物种的化学计量比为物种的化学式。输入的物种名为对提问的缺省回答。

化学式中元素通常用化学计量比数分开。化学式中既不允许括好“ () ”也不允许下划线“ _ ”，而可使用特定组合/-或/+。

在大写模式下（见 REINITIATE 命令），只有当两个字母组成元素符号时，化学计量比数 1 可不用写。在小写模式下，元素必须以第 1 个字母大写第 2 个字母小写来键入，因此可在没有任何化学计量比数时能够区别 CO（一氧化碳）和 Co（钴）。

注意，物种中所有元素必须已经在输入物种之前输入。

11.10.3 ENTER_PHASE

描述：通常，必须已经指定元素和物种之后系统从预先定义数据库返回的数据。通过 TDB 数据库模块内 GET_DATA 命令自动完成这个。在一些情况下，用户要用此命令交互指定一相。

提示：ENTER_PHASE

接着提示：NAME OF PHASE: <phase name>

相名为以字母开头并仅包含字母、数字或下划线符号的任何串。相名必须是唯一的。

TYPE CODE: <type code>

若不是普通溶体相，必须为相指定类型代码。若是普通相可按<RETURN>。

可定义如下类型码：

- G 为气体。注意体系仅存在一种气体。
- A 为水溶液相。
- Y 为液相（但不是水溶液或离子相）。
- I 为具有带电相（但不是 A、G 或 Y）。

NUMBER OF SUBLATTICES /1/: <sublattice number>

具有化学计量比约束的相通常由两个或更多亚点阵。在每个亚点阵上一个或更多物种作为组元输入。亚点阵树必须不能超过 10。没有亚点阵的相可处理为具有一个亚点阵的相。

NUMBER OF SITES ON SUBLATTICES # /1/: <site number>

对具有亚点阵的相，必须给出每个亚点阵（用#标记）上位置比值。程序请求所有亚点阵的值（通过重复每个亚点阵的这个提问），这些可以有提取的共同因数。推荐若可能使用整数作为位置数。对没有亚点阵的相将不显示这个问题。

NAME OF CONSTITUENT: <constituent name(s)>

对每个亚点阵用户必须指定至少一个物种作为组元。从而可给出几个组元（在重复提示下）或在同一行用空格分开。将重复这个问题直到仅按<RETURN>或给出一个分号“ ; ”，意味着列出的组元用“ ; ”或一个空行终止。

Will you add constituents later /NO/: <Y or N>

若 Y（是）给为回答，用户可通过在 ENTER_PARAMETER 命令指定新的组分以后将其它组元加到相中（键 11.10.5 节）。缺省回答为 NO（或按<RETURN>）。

若使用合法的组分，当输入参数时，程序将稍后给出出错消息。

370

Do you want a list of possible parameters /NO/: <Y or N>

若给出 Y（是），程序将产生输入相的高达 5 个交互作用次序的一列所有参数。按<RERURN>（不），将不显示列表。

11.10.4 ENTER_SYMBOL

描述：通常，符号可用于表示数值量、函数和表。当输入参数时稍后可使用输入的符号，这表示处理热力函数的一种柔性方法。若相同函数用于几个热力学参数，则符号特别有用。

符号可用 GES 模块中的这个命令输入。在 GES 模块中输入的符号在 PARROT 模块（数据优化）也可列表与使用，其中可使用 GES 模块中输入的符号（变量、函数或参数）来定义要优化的参数。但是，GES 模块中输入的符号不是与 POLY 和 POST 模块中定义的相同符号。

若指定了参数，此命令等同于 ENTER_PARAMETER 命令（见 11.10.5 节）。若用户要定义一个常数量，可将其输入为在所有（温度）范围内具有常数值的简单函数。

提要：ENTER_SYMBOL

接着提示：VARIABLE、FUNCTION、TABLE or PARAMETER? /FUNCTION/: <keyword>

关键词可以是变量、函数、表或参数。

- Ø 函数是状态变量或其同函数的表达式。
- Ø 变量类似于函数，因为它们也可以是状态变量的表达式。任何时候以新的表达式输入变量是可能的。
- Ø 表用于列出结果。一张表由一列任何数目的状态变量、函数或变量组成。
- Ø 用这个选项参数符号特别用于将相参数值（用命令 ENTER_PARAMETERM 命令定义的）赋予指定特征化符号。注意，若还没有定义相参数，参数符号将赋值为零或值为零的符号。以此方法，用户容易在进一步定义其它相参数时参考这样的输入相参数。

NAME: <name of the symbol>

每个符号具有唯一的名称，必须以字母开头，最长有 8 个字符。

取决于符号所选类型（变量、函数、表或参数），将继续不同的问题，显示如下：

- Ø 若符号是变量应赋予其值：

VALUE: <number value of variable>

对变量，这里赋予其值。注意，接受的是常数数字值，而不接受表达式。

- Ø 若符号是函数，将询问输入低温限、表达式、高温限以及上限是否有表达式：

Low temperature limit /298.15/: <low temperature inK>

对于函数，指定低温限，其不使用表达式。所有类型数据的缺省低温限为 298.15K。计算时检查函数的低温限，若实际温度在给定范围以外，将设定指针。

若低温限给定负值，将假定此函数有压力断点。其它限也将取为压力值。

Function: <definition for a function>

函数由温度项和压力相组成。进一步信息简 11.2.5 节（温度与压力函数）。表达式为类 FORTRAN 表达式，可使用操作符+、-、*、=和**（**紧接着正数幂）。也可使用一元函数象 LOG、LOG10、EXP、SIN、COS 和 ERF。一个表达式可连续写在几行上。函数可由几个温度范围，每个区有不同表达式。函数必须用分号“ ;”或空行终止。注意，一行可写多于 80 个字符。若一行上空间不足，按<RETURN>在下一行继续。程序提示与符号“ & ”期待继续。

若在各种温度范围内函数有多个表达式将重复这个问题。

& <continuation of the definition for the current function>

与符号“ & ”意思是若一行对函数是不够的，则在新的行可继续写此函数。若已经完成写函数，仅再次按<RETURM>即可。

High temperature limit /6000/: <high temperature limit in K>

对函数，指定高温限，在此温度以上当前表达式不适用。所有类型数据的缺省上限为 6000K。

若负值给作低温限，则解释为低压限，高温限也将取作当前表达式的高压限。

若在各种温度范围内函数有多个表达式将重复这个问题。注意目前输入的函数的所有低温限必须按增加的顺序，否则整个函数将给定为单个零值。

如需要几个范围描述这个函数与温度的关系，当前使用的表达式的高温限将是下一个范围的低温限。计算过程中，如实际温度超过最高温度将设定指针。

Any more ranges /N/: <Y or N>

若用户对这个问题回答 Y（是）程序将为新的有效函数请求以上最后的高温限和下面新的高温限。温度范围最大树为 10。

重要提示：用户必须自己确信函数与其偏导过断点处是连续的。

- Ø 若符号是稳定的，应指定每个温度处低温和高温限、温度步长和表值：

Low temperature limit /298.15/: <low temperature limit in K>

表有值的最低温度。

High temperature limit /6000/: <high temperature limit in K>

表有值的最高温度。

Step in temperature /100/: <temperature step>

表种每个值之间温度步长。这个步长对整个表必须是常数。若一张表不能在单个步长内描述，必须为不同温度范围分成几张表。截去上下限来给出合理的必须指定表值。

Table value at xxx /yy/: <table value>

必须给出特定温度（xxx）表的值。缺省值（yy）是最后的值。

- 若符号是参数，应输入相参数正确的明（包括奇标识符、相名、组元和各种亚点阵交互作用组元（若存在）和参数度。

PARAMETER: <parameter name>

指定正确的参数名。若参数名是不接受的或用户按<RETURN>出现以下警告消息：

***ERROR, PLEASE RE-ENTER EACH PART SEPARATELY

和程序将为参数名的每部分分开的输入进一步提示。

Identifier (/X/): <G or L, or TC, or BM>

指定以下类型合法符号（G 或 L、或 TC、或变 BM）之一。与 ENTER_PARAMETER 命令种相同。

Phase name (/ABCD/): <phase name>

指定相名。与 ENTER_PARAMETER 命令种相同。

Constituent (in SUBLATTICE # /abc/): <species name>

指定交互作用组元名；若没有交互作用组元，仅按<RETURN>。与 ENTER_PARAMETER 命令种相同。

INTERACTING CONSTITUENT (IN SUBLATTICE #/xyz/): <species name>

若有多与一个交互作用组元，指定它们；否则仅按<RETURN>。与 ENTER_PARAMETER 命令种相同。

Degree /#/: <degree>

指定一个数值作为相参数的度。与 ENTER_PARAMETER 命令种相同。

11.10.5 ENTER_PARAMETER

描述：用户用此命令为交互作用相的特定参数输入 TP-function。若已有定义的参数表达式，删除它。

参数的输入 TP-function 可用命令 AMEND_PARAMETER 在以后改变。

参数名为（更详细内容见 11.4 节）：

<identifier>(<phase>, <constituent array>; <digit>)

参数名举例：

G(GAS, C1O2)	气体中 CO2 分子的形成 Gibbs 能；
G(FCC,FE:VA)	具有间隙原子的 fcc Fe 的形成 Gibbs 能；
L(LIQ,Fe,Cr;0)	液态种 Fe 和 Cr 的规则溶体参数；
L(LIQ,Fe,Cr;0)	亚规则溶体参数；
TC(BCC,Fe:Va)	bcc Fe 的居里温度。

参数名有即部分组成，第一个是类型标识符，以下标识符是合法的：G（Gibbs 能）、TC（磁有序温度）、BM（波恩磁子数）。可使用 L 作为 Gibbs 能参数标识符。在输出上 L 用于相互作用参数标识符。注意，类型标识符 BM 也用于水溶液物种的波恩函数标识符。

在 TCC 版本 N 中，有以下信心的标识符：

V0 为 298.15K 和 1bar 的体积（仅时数值）标识符；

VA 为积分的热膨胀系数 $\int_{298.15}^{T}\alpha(T)dT$) 的标识符；

VB 为 1bar 时体积模量。

标识符必须后跟括号及括号内的相名、逗号和组元列。随意地，组元列后跟分号和数字。参数名由括号结束。

组元列由一列组元名组成。交互作用参数由两个或更多来自同一亚点阵并用逗号分开的组元组成。若相由几个亚点阵，必须至少指定每个亚点阵的一个组元。必须按亚点阵的顺序给出不同亚点阵中的组元并用逗号分开。

组元列之后，半括号后可指定亚索引数字，此数字必须在 0 到 9 范围内。亚索引的节是依赖于相中使用的过剩模型。若没有给出半括号和数字，亚索引的值假定为零。

可使用星号“＊”来标示参数独立于特定亚点阵的组元。如 L(L12, AL,NI:*)，含义是第一亚点阵上组元 AL 和 NI 之间二元相互作用的相互作用参数，而独立于第二亚点阵上的所有组元。

提要：ENTER_PARAMETER

接着提示：PARAMETER：<parameter name>

指定正确的参数名。若参数名是不可接受的或用户仅按<RETURN>，出现以下警告消息：

***ERROR, PLEASE RE-ENTER EACH PART SEPARATELY

同时程序将进一步提示分开输入每部分参数名：

Identifier (/X/): <G or L, or TC, or BM>

指定下列类型合法标识符之一：

- G 或 L　能量参数（形成 Gibbs 能或交互作用参数）；
- TC　磁有序温度参数；
- BM　波恩磁子数参数（或水溶液物种的波恩函数）。

注意，当必要时，量如 H（焓）、S（熵）、V（体积）、F（Helmholtz 能）等可从 Gibbs 能中计算。

若此命令已经使用一次或几次，此提示的以前值将设定为缺省。若是同一类型标识符，或指定新类型，一旦按<RETURN>既可接受缺省值。

Phase name (/ABCD/): <phase name>

每个参数仅对特定相有效，必须提供该相的名称，此名称可缩写。

若此命令已经使用一次或几次，此提示的以前值将设定为缺省。若是同一相，或指定新的相名，一旦按<RETURN>既可接受缺省值。

Constituent (in SUBLATTICE # /abcd/): <species name>

用组元来识标参数，其分数与参数相乘。组元名称可缩写。注意这里需要的是物种名，而不是化学计量比式。

若此命令已经使用一次或几次，此提示的以前值将设定为缺省。若组元识相同的，或指定新的物种名，一旦按<RETURN>就接受缺省值。

对于具有几个亚点阵的相，程序将询问每个亚点阵中的一个组元。

过剩参数如规则参数或三元参数，要与来自相中同一亚点阵的两个或更多分数相乘。必须给处这些附加组元作为交互作用组元（若如在以下提示中）。注意，具有亚点阵的相可有每个亚点阵中的交互作用组元。星号“＊”可用于表示参数独立于亚点阵的成分。

INTERACTING CONSTITUENT (IN SUBLATTICE # /xyz/): <species name>

用于描述过剩量的参数必须有两个或更多彼此“交互作用”的组元。哪个组元给定为第一组元或交互作用组元是任意的。程序将总是按字母顺序对组元（每个亚点阵中）分类。这对参数标记依赖于此顺序的一些参数是重要的。

若此命令已经使用一次或几次，此提示的以前值将设定为缺省。若组元识相同的，或指定新的物种名，一旦按<RETURN>就接受缺省值。

注意，要取消互作用组元的缺省值，必须键入 NONE 或其它组元的名称。

此问题将不断重复直到指定勒相中特定亚点阵的所有感兴趣交互作用组元，最后已经施加了简单的<RERURN>。

Degree /#/: <degree>

度的含义是模型依赖性，对二元交互作用参数，度通常是 Redlich-Kister 表达式的指数(power)。对三元交互作用参数，通常是 Hittler 三元指数（index）。

若此命令用于纯成分的输入 G 参数，可不提示此问题。

此提示之后，程序将在屏幕上回映期望相参数的完整定义。

Low temperature limit /298.15/: <low temperature limit in K>

指定参数函数的低温限，与输入函数相同。

Function: <definition for a function>

函数由 T 和 P 相组成，与输入函数相同。

& <continuation of the definition for the current function>

函数定义的继续，与输入函数相同。

High temperature limit /6000/: <high temperature limit in K>

指定参数函数的高温限，与输入函数相同。

Any more range /N/: <Y or N>

对再有更多函数指定 Y（是）或对结束此命令指定 N（不），与输入函数相同。

11.11 列出数据的命令

11.11.1 LIST_DATA

描述：登录体系的所有数据以可读方式写在输出文件。若没有指定输出文件，数据显示在屏幕上。

输出数据由一列所有元素与其数据后跟一列所有相和与每个相联系的数据所组成。每相列出的热化学参数总是 SI 单位。

注意：从 TCC 版本 P 起，对加密数据库不可能使用此命令列出任何数据。

提要：LIST_DATA

接着提示：OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/: <file name>

指定一合理方式写数据的文件名。缺省值为屏幕（按<RETURN>）

OPTION?: <option(s)>

选择一个或几个如下输出选项：

- N 输出写成“用户”数据库格式；
- P 输出写成宏文件为进一步输入。这对为评价创建*.SETUP 文件；
- S 符号被压缩；
- R 列出参数的参考（今对一些由参考的数据库）。
- L 写输出适合于 LaTeX 预处理器。

11.11.2 LIST_PHASE_DATA

描述：特定的所有数据以合理方式写在屏幕上。每相列出的热化学参数总是 SI 单位。

注意：从 TCC 版本 P 起，对加密数据库不可能使用此命令列出任何数据。

提要 1：LIST_PHASE_DATA <phase name>

提要 1：LIST_PHASE_DATA

接着提示：PHASE NAME: <phase name>

指定相名称（若缩写，应是唯一的）。

11.11.3 LIST_PARAMETER

描述：此命令在屏幕上列出相的特定参数的 TP-function(s)。必须提供相参数名，详细情况见命令 ENTER_PARAMETER.

参数名为（详细情况见 11.4 节）

<identifier>(<phase>, <constituent array>; <digit>)

参数名举例：

G(GAS,C1O2)　气体中 CO2 分子的形成 Giibs 能

G(FCC,FE:VA)　具有间隙原子的 fcc Fe 的形成 Giibs 能

L(LIQ,Fe,Cr;0)　液体中 Fe 和 Cr 规则溶体参数。

L(LIQ,Fe,Cr;1)　亚规则溶体参数。

TC(BCC,Fe:Va)　bcc Fe 的居里温度。

参数名有几部分组成。第一部分是类型标识符，以下标识符是合法的：以下标识符是合法的：G（Gibbs 能）、TC（磁有序温度）、BM（波恩磁子数）。可使用 L 作为 Gibbs 能参数标识符。在输出上 L 用于相互作用参数标识符。注意，类型标识符 BM 也用于水溶液物种的波恩函数标识符。

在 TCC 版本 N 中，有以下信心的标识符：

V0 为 298.15K 和 1bar 的体积（仅时数值）标识符；

VA 为积分的热膨胀系数 $\int_{298.15}^{T}\alpha(T)dT$ 的标识符；

VB 为 1bar 时体积模量。

标识符必须后跟括号及括号内的相名、逗号和组元列。随意地，组元列后跟分号和数字。参数名由括号结束。

组元列由一列组元名组成。交互作用参数由两个或更多来自同一亚点阵并用逗号分开的组元组成。若相由几个亚点阵，必须至少指定每个亚点阵的一个组元。必须按亚点阵的顺序给出不同亚点阵中的组元并用逗号分开。

组元列之后，半括号后可指定亚索引数字，此数字必须在 0 到 9 范围内。亚索引的节是依赖于相中使用的过剩模型。若没有给出半括号和数字，亚索引的值假定为零。

可使用星号“ * ”来标示参数独立于特定亚点阵的组元。如 L(L12, AL,NI:*)，含义是第一亚点阵上组元 AL 和 NI 之间二元相互作用的相互作用参数，而独立于第二亚点阵上的所有组元。

当请求参数名或者若不适当地输入整个参数名时若按<RETURN>，将询问名称中每项。

注意：从 TCC 版本 P 起，对加密数据库不可能使用此命令列出任何数据。

提要 1：LIST_PARAMETER <identifier>(<phase>,<constituent array>;<digit>)

提要 1：LIST_PARAMETER

接着提示：PARAMETER: <parameter name>

指定正确的参数名。若参数名是不可接受的或用户仅按<RETURN>，出现以下警告消息：

***ERROR, PLEASE RE-ENTER EACH PART SEPARATELY

同时程序将进一步提示分开输入每部分参数名：

Identifier (/X/): <G or L, or TC, or BM>

指定下列类型合法标识符之一（G 或 L，或 TC，或 BM），与 ENTER_PARAMETER 中相同。

Phase name (/ABCD/): <phase name>

指定相的名称，与 ENTER_PARAMETER 中相同。

Constituent (in SUBLATTICE # /abcd/): <species name>

指定组元的名称，与 ENTER_PARAMETER 中相同。

INTERACTING CONSTITUENT (IN SUBLATTICE # /xyz/): <species name>

指定交互作用组元的名称，与 ENTER_PARAMETER 中相同。

若有多与一个互作用组元，指定它们；否则仅按<RERURN>。与 ENTER_PARAMETER 中相同。

Degree /#/: <degree>

指定数值数作为相参数的度。与 ENTER_PARAMETER 中相同。

11.11.4 LIST_SYMBOL

描述：当为系统中各相输入模型参数输入 TP-functions，此命令在屏幕上列出可以使用的符号。

提要：LIST_SYMBOL

接着提示：NAME: <symbol name>

指定符号名。注意，仅列出与此名匹配的那些符号。或者按<RETURN>列出体系中输入所有符号。

OUTPUT TO SCREEN OR FILE /SCREEN/: <file name>

指定以合理的方式写处输入符号的文件的名称（作为以后用文本编辑器打开并编辑的简单文本）。缺省值是屏幕（按<RERURN>）

11.11.5 LIST_CONSTITUENT

描述：此命令在屏幕上列出定义体系的所有相所有组元（作为位置分数）。这主要有利于软件管理。注意，在 GES 监视器中没有命令设定组元。

提要：LIST_CONSTITUENT

11.11.6 LIST_STATUS

描述：此命令用其状态词列出输入元素、相和物种。此命令主要利于系统管理者。

提要：LIST_STATUS

接着提示：每个元素、物种、相和符号有一套状态比特。这些比特的值用 LIST_STATUS 命令列出。通常对用户不重要的，这里仅解释其含义。

以十六进制列出比特，即以十六进制数写四个比特。两个十六进制数构成一个字节。在十六进制中 0 到 9 位正常数字 A 到 F 的值为 10 到 15。数 E4000000 因此有位 1、2、3 和 6 等于 1。对最重要的（最左边的）位比特是以 1 开始的数。

元素状态词：

位的含义

1 若元素不能删除（仅为空位和电子）则设定；

2 若悬挂（包括位 3 和 4 的 OR）则设定；

3 若明确悬挂则设定；

4 若隐含悬挂（对元素不能发生）则设定；

物种状态词：

位的含义

1 若元素的物种记录（每个元素有一个物种记录）则设定；

2 若悬挂（包括位 3 和 4 的 OR）则设定；

3 若明确悬挂则设定；

4 若隐含悬挂（如若悬挂物种元素）则设定；

……

11.12 修改数据命令

11.12.1 AMEND_ELEMENT_DATA

描述：用此命令可改变元素的数据。仅用于数据库没有任何数据的元素。除了质量外其它值不影响计算。

提要：AMEND_ELEMENT_DATA

接着提示：ELEMENT NAME: <element name>

指定要改变数据的元素名称。

NEW STABLE ELEMENT REFERENCE /ABCD/: <name of SER>

按<RETURN>接受缺省的 SER 或为元素指定一个新的 SER。

重要的注释：若从数据库为其返回数据，元素的 SER（稳定元素参考态）缺省命不应改变。当列出相参数，数据库假定稳定元素参考与数据库中相同，则使用此名。只有从数据库没有取来元素数据，如手工输入，可指定新的 SER。

NEW ATOMIC MASS /xx.xxxx/: <yyyyyy>

按<RETURN>接受缺省原子量或为元素指定新值。元素的原子量以 g/mol 给处。

NEW H(298.15)-H(0) /xxx.xxx/: <yyyyy>

按<RETURN>接受缺省 H(298.15)-H(0)或为元素指定新值。H(298.15)-H(0)为元素在其标准态下 298.15K 与 0K 之间的焓差。

NEW H(298.15) /xx.xxxx/: <yyyyy>

按<RETURN>接受缺省 S(298.15)或为元素指定新值。S(298.15)为元素在其标准态下 298.15K 时熵的绝对值。

Defaut element reference state symbol index /#/: <index>

为缺省列出参数（符号）指定适当索引，或按<RETURN>接受预设的索引。

索引（index）是为了定义打印在参数列出的符号。符号可以是 G、H298 或 H0：

- G　　意思是各温度下 Gibbs 能的数据（也称点阵稳定性）；
- H298　意思是 298.15K 和 1bar 下元素的焓的数据
- H0　　意思是 0K 下元素的焓的数据

注意，索引值改变符号，不改变任何值！通常由数据库正确设定索引。只有当手工输入数据时，必须设定索引来获得正确符号。

索引值	符号
0	G
1	H298
2	H0

11.12.2 AMEND_PHASE_DESCRIPTION

描述：此命令可用于指定相具有混溶裂隙、特定过剩模型或者其具有对 Gibbs 能的特定附加贡献。

提要：AMEND_PHASE_DESCRIPTION

接着提示：PHASE PHASE: <phase name>

指定相名。

AMEND WHAT /COMPOSITION_SET/: <subject>

可改变相的几个主题，但更常见的是，此命令用于输入相的两个或更多成分系列。如相有混溶裂隙，有必要有两个成分系列，每个可能相可同时稳定。

在以上提示下键入问号“？”，可获得所有可以改变的主体的完全列表，显示如下;

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
ZERO2_TRANSITION
REMOVE_ADDITION
QUASICHEMICAL_LIQ
ELECTROSTATUS_HKF

下面将演示用此命令（与其后续提示）如何改变相的这些不同主题。

For COMPOSITION_SET:

若用户要改变成分序列的数目，将提示：

NEW HIGHEST SET NUMBER /#/: <set number n>

缺省值（#）将通常高于当前值。所有相最初具有一个成分序列。若给出较低值（即低于缺省值），将删除特定成分。注意，不能带走第一个成分序列。

GIVE FOR COMPOSITION SET n

Major constituent(s) for sublattice #: /AB/: <major constituent(s)>

为亚点阵#指定新的主组元，或按<RETURN>接受依据相的特定成分序列设定的缺省值。

对选定相中所有亚点阵将重复此提示。可给出每个亚点阵中主组元。具有混溶裂隙的相对每个成分序列有不同主组元的计算平衡时，可简单给出开始值。

For NEW_CONSTITUENT:

若用户要在相中添加新组元，用此选项可完成这个。添加新的组元到离子液体相是合法的。

SUBLATTICE /#/: <sublattice number>

指定新组元所处的亚点阵。

SPECIES: <species name>

给出有效的物种名。

For MAJOR_CONSTITUENT:

若用户要设定相的每个程序列每个亚点阵上主组元，将有提示：

Composition set /1/: <composition set number>

给出给定相的成分序列（数字数），或者若用户希望设定指定成分序列的主组元按<RETURN>。

Major constituent(s) for sublattice #: /AB/: <major constituent(s)>

指定亚点阵#的新的主组元，或按<RETURN>接受依据相的指定成分序列自动设定的缺省值。

此提示将因为指定成分序的选定相所有的亚点阵而不断重复。

可指定每个亚点阵中主组元。这将有利于计算收敛更快和更容易（因为当具有混溶裂隙的相每个成分序列有不同主组元的平衡计算时可简单地给出开始值）。当返回数据时数据库通常自动设定几个相的主组元。

For RENAME_PHASE

若用户要添加新组元到一相时，由此选项来完成。添加新组元到离子液体相是合法的。

NEW PHASE NAME /ABCD/: <phase name>

给出选定相的新相名，或者，若用户不改变缺省显示的相名则按<RETURN>。

这是通过在新相名下隐藏来“删除”相的方法。

For EXCESS_MODEL

若用户要改变相的过剩模型，将有提示：

Model name /ABCDEFG/: <model name>

缺省模型是预设的溶体相模型，通常是 REDLICH-KISTER-MUGGIANU 模型。可从下列模型中选择一种作为改变的模型：

REDLICH-KISTER-MUGGIANU
REDLICH-KISTER-KOHLER
FLORY-HUGGINS POLYMER MODEL
HKF
PITZER

Redlich-kister 过剩模型的 Muggianu 和 Kohler 表达式都是从二元或三元系过剩模型的外推（仅适用于四元，见 11.3.3 节中的细节）。HKF 和 Pitzer 模型仅在水溶液相是合法的

注意：有很多溶体模型在各系统中实现（记录于 11.3 节中）。然而，可用不同的方法切换与处理（通过各种 GES 模块）：

- 第一种方法是把非理想模型化为过剩（EXCESS）部分，即通过修改 EXCESS_MODEL 主题，如这里显示的那样。
- 第二种方法是把非理想模型化为附加（ADDITIONAL）部分，即用此命令修改相的其它主题，例如，MAGNETIC_ORDERING 为磁贡献模型，
  DISORDERED_PARD 对有序/无序现象模型化的 CVM 方法，
  DEBYE_HUCKEL 稀水溶液相的 DHLL 模型化。
- 第三种方法是将模型整体或部分贯彻到 GES 系统和相关数据库，例如用完全 Revised_HKF 模型的静电对水溶液相的贡献，高压贡献的 Birch-Murngham 模型，非理想气体和气体混合物的 SUPERFLUID 模型。

For MAGNETIC_ORDERING

若用户要改变相的磁有序参数，将提示：

THE ANTIFERROMAGNETIC FACTOR /xx/: <yy>

指定选定相的反铁磁因数。BCC 相为-1，其它相为-3。

SHORT RANGE ORDER FRACTION OF THE ENTHALPY /xx/: <yy>

磁有序为二级有序转变，由于此转变的部分焓是由于短程有序而产生的。此值是总焓的分数，总焓是磁转变温度以上短程有序引起的。缺省值（xx）对 bcc 相是 0.40，fcc 和 hcp 相为 0.28。

For BEBYE_HUCHEL:

若用户要使用稀水溶液相的 DHLL（Debye-Huchel 有限定律）可切换到 ADDITIONAL 部分。

注意，这将移走以前设定的选定水溶液相非理想的 ADDITIONAL 部分。

For CLASS_TRNSITION:

若用户要使用液相玻璃转变的特定模型，可切换到 ADDITIONAL 部分。

注意，这将移走以前设定的选定水溶液相非理想的 ADDITIONAL 部分。

For DISORDERED_PART:

用没有有序亚点阵（无序相名）描述来自无序状态的贡献的有序相的特殊处理是需要此命令。

Disordered phase name: <phase name>

给处无亚点阵的无序相名。

有序无序兼容（亚点阵、位置和组元）进行几个检查。接着在相之间创建一个链，无序相从应用程序中隐藏起来。有序相的 Gibbs 能也包含在无序相的 Gibbs 能中。

有物序有序转变相将使参数分裂为两相，因此，作为 GES 系统的两相。其中有一相有有序化的亚点阵，其它项表示无序状态。

以前版本中有此工具，而现在对多元有序更经常使用。“ 两相 ”的描述意思是有序相仅有描述有序的参数。“ 无序 ”相有参考态和描述无序相的所有参数。

……(P386)

For ZERO2_TRANSITION

还没实行。

For QUASICHEMICAL_LIQ

For ELECTROSTATIC_HKF

For STATUS_BITS

For REMOVE_ADDITION

11.12.3 AMEND_SYMBOL

描述：此命令用于交互计算当前温度和压力条件下函数和表的当前值（由切换的数据预先定义的或有 ENTER_SYMBOL 命令以前输入的）。

注意，计算函数和表使用的温度于压力的当前值以 LIST_STATUS 命令列出，无法交互改变当前温度于压力值。

为了修改输入符号（变量、函数或参数）定义，此命令的执行略不同于来自其它的，描述如下：

- 对变量，其值可变；
- 对函数，各范围的低与高温线以极其表达式可改变；
- 对参数，各范围的低与高温线以极其表达式可改变；

提要：AMEND_SYMBOL

接着提示：NAME: <symbol name>

指定以前输入的符号名；

对于表和函数（或参数，用带有 parameter 关键词的 ENTER_SYMBOL 命令而不是 ENTER_PARAMETER 命令输入值后被处理为函数,），指定符号名之后，程序自动计算当前温度和压力下的值，并在平模上列出这些值，如：

FUNCTION VALUE　2.52500000E+01

TABLE VALUE　1.56000000E+2

对于变量和函数（或参数），将有已写进一步提示，依赖于要修改的符号类型显示如下：

对变量：

Value /current value/: <new value>

对变量，显示器当前值，用户可将其改变为新值。

对函数（和输入为符号的参数）：

DO YOU WANT TO CHANGE THE NUMBER OF RANGES /NO/: <Y or N>

若有多于一个范围，将提示此问题。但是，还不能实行此选项。这里只能按<RETURN>。

RANGE NUMBER (0 TO EXIT) /0/: <range number>

若函数在两个温度非不同，指定要修改函数的范围。或者按<RETURN>或键入 0 没有进行任何改变而退出此命令。

Function:

编辑以前的函数。编辑只能在一般的子程序 FOOLED 中进行。此程序以下列方式提示用户：

1:+:>

提示由串中当前位置和两个冒号之间“ :: ”位置的字符组成

可给出以下命令：

Help	?
Move CP to last or first character	<+/-> A
Delete characters from CP	<+-#characters> D
Eixt	E
Find	<#occurrences> F<string>@
Insert	I<string>@
Move	<+-#positions> M
Restore string	R
Substitute	S<OLD>@<NEW>@
Type string	T

其中 CP 表示串中当前位置，#意思是串的号，@为输入或搜索串的中终止符。

注意，当键入串时，当前位置的字符已被下划线“ _ ”取代。此帮助也可从在线键入的“ ? ”

来获得。

要结束编辑当前函数，在提示下见如 E。

RANGE NUMBER (0 TO EXIT) /0/: <range number>

给出编辑函数的范围述，或者按<RETURN>或者键入 0 退出此命令。

11.12.4 AMEND_PARAMETER

描述：用户可用此命令交互地改变参数的温度-压力函数。这有助于更正键入错误，因为对终端交互编辑可得旧的函数。如何定义参数简 11.10.5 节。

提要：AMEND_PARAMETER

接着提示：PARAMETER: <parameter name>

指定正确的参数名。若参数名是不可接受的或用户仅按<RETURN>，出现以下警告消息：

***ERROR, PLEASE RE-ENTER EACH PART SEPARATELY

同时程序将进一步提示分开输入每部分参数名：

Identifier (/X/): <G or L, or TC, or BM>

指定下列类型合法标识符之一（G 或 L，或 TC，或 BM），与 ENTER_PARAMETER 中相同。

Phase name (/ABCD/): <phase name>

指定相的名称，与 ENTER_PARAMETER 中相同。

Constituent (in SUBLATTICE # /abcd/): <species name>

指定组元的名称，与 ENTER_PARAMETER 中相同。

INTERACTING CONSTITUENT (IN SUBLATTICE # /xyz/): <species name>

指定交互作用组元的名称，与 ENTER_PARAMETER 中相同。

若有多与一个互作用组元，指定它们；否则仅按<RERURN>。与 ENTER_PARAMETER 中相同。

Degree /#/: <degree>

指定数值数作为相参数的度。与 ENTER_PARAMETER 中相同。

正确指定参数名之后程序将在屏幕上列出其当前定义（或者是数据库中预先设定的或用 ENTER_PARAMETER 命令以前定义的），如：

L(PHASE2,Al,MG;1)=

298.15<T<2000.00: +5000

2000.00<T<4500.00: +4500

4500.00<T<6000.00: +4000

接着程序提示改变参数定义，显示如下：

DO YOU WANT TO CHANGE THE NUMBER OF RANGE /NO/: <Y or N>

若用户要改变选定函数的范围述，或改变定义中的温度限，键入 Y（是），必须重新键入低温限/高温限和函数（见 ENTER_PARAMETER 命令中保持的细节，没有其它可能来这样做）。

若用户不想改变范围数二要改变一个或多个范围中的函数，按<RERURN>接受缺省回答 N（不），屏幕上列出所有范围中选定参数的全部定义，如：

DIFFERENT FUNCTIONS IN THESE RANGES

1 298.15<T<2000.00

2 2000.00<T<4500.00

3 4500.00<T<6000.00

接着提示：

DO YOU WANT TO CHANGE RANGE LIMIT /NO/: <Y or N>

若有多于一个范围，将提示此问题。但还没有执行，因此只能按<RERURN>。

RANGE NUMBER (0 TO EXIT) /0/: <range number>

若函数在两个温度非不同，指定要修改函数的范围。或者按<RETURN>或键入 0 没有进行任何改变

而退出此命令。

Function:

编辑以前的函数。编辑只能在一般的子程序 FOOLED 中进行，就象在 AMEND_SYMBOL 命令中描述的那样。此程序以下列方式提示用户：

1:+:>

提示由串中当前位置和两个冒号之间“ :: ”位置的字符组成

可给出以下命令：

Help	?
Move CP to last or first character	<+/-> A
Delete characters from CP	<+-#characters> D
Eixt	E
Find	<#occurrences> F<string>@
Insert	I<string>@
Move	<+-#positions> M
Restore string	R
Substitute	S<OLD>@<NEW>@
Type string	T

其中 CP 表示串中当前位置，#意思是串的号，@为输入或搜索串的中终止符。

注意，当键入串时，当前位置的字符已被下划线“ _ ”取代。此帮助也可从在线键入的“ ? ”来获得。

要结束编辑当前函数，在提示下见如 E。

RANGE NUMBER (0 TO EXIT) /0/: <range number>

给出编辑函数的范围述，或者按<RETURN>或者键入 0 退出此命令。

11.12.5 CHANGE_STATUS

描述：状态可以是 ENTERED 或 SUSPENDED。悬挂状态可以是显式的或隐式的。若其化学式中的元素显式悬挂，隐式悬挂状态可为物种设定。若其所有元素设定为输入的，则隐式悬挂的物种都自动变位输入的。

此命令之后，将显示哪个元素/物种/相已被悬挂或存储（输入）。因此，将改变特定元素或物种或相的状态位，同 LIST_STATUS 命令列出的。

提示 1：CHANGE_STATUS <keyword> <new status> <name1; name2, …>

提示 1：CHANGE_STATUS

接着提示：FOR ELEMENT, SPECIES OR PHASE /SPECIES/: <keyword>

指定关键词（元素或物种或相）

SUSPEND /Y/: <Y or N>

状态从 ENTERED 改变为 SUSPENDED(Y)，或相反（N）。

若元素被悬挂，则具有此元素的物种都变成隐式 SUSPENDED。若相的所有组元或亚点阵中的所有组元为悬挂的，则相变成隐式悬挂的。

List of ELEMENTS/SPECIES/PHASES: <name of elements or species or phases>

指定关键词（元素或物种或相）

SUSPEND /Y/: <Y or N>

从 ENTERED 状态改变位 SUSPENDED 状态（Y），或者相反（N）。

若悬挂元素则具有此元素的所有物种也都变成隐式的 SUSPENDED。若相的所有组元或亚点阵中的所有组元相为悬挂的，相也可变成隐式的 SUSPENDED。

List of ELEMENTS/SPECIES/PHASES: <name of elements or species or phases>

指定将变成悬挂的或活动的那些元素或物种或相的名称或索引。对于名称，应用空格分开通使用分号结束；对于索引，可以有由连字符联接的两组数字给出其范围，用分号结束。

例如

5 1 7-12 FE;

11.12.6 PATCH_WORKSPACES

描述：此命令仅式对那些已经知道要做什么的人。

提要：PATCH_WORKSPACES

11.12.7 SET_R_AND_P_NORM

描述：气体常数值（R）用于定义用作数据输入的能量单位，在输出上，所有数据是 SI 单位。1atm 压力值用于说明应用程序给出的压力值。

提要：SET_R_AND_P_NORM

接着提示：VALUE OF GAS CONSTANT IN YOUR ENERGY UNITS /8.31451/: <new value>

气体常数的缺省值是 SI 单位（8.31451）。若用户改变此值，仅影响来自终端交互给出能量数据的解释，例如，若此值设定为 1.98717，用户则给出以卡为单位的值。

VALUE OF ONE BAR IN YOUR PRESSURE UNITS /100000/: <new value>

在 GES 系统中使用之前，应用程序给出的压力值将除以此值，然后以帕斯卡表示的 1bar 的值。

11.13 删除数据的命令

11.13.1 REINITIATE

描述：抹去存储 GES 系统中的所有数据，所有变量初始化为缺省值。

提要：REINITIATE

接着提示：UPPER CASE ONLY /Y/: <Y or N>

元素和物种名可以是大写（通过键入 Y 或按<RETURN>）、或者具有两个字母的元素第一个字母大写第二个字母小写（键入 N）。注意，大写模式时所有小写的输入将自动转换为大写。

LOWER TEMPERATURE LIMIT /298.15/: <lowest T inK>

当交互输入时，此使用作低温线。

Defaut element reference state symbol index /1/: <1 or 2 or3>

对缺省列出的参数指定适当索引，或按<RETURN>接受预设的所有（1）。

索引是为了定义参数列表中打印的符号。符号可以是 G、H298 或 H0。

- G　　意思是数据为变量温度的 Gibbs 能（也称点阵稳定性）。
- H298　意思是数据为 298.15K 和 1bar 下元素焓。
- H0　　意思 0K 下元素焓。

注意，索引仅改变符号，不改变其值！通常索引由数据库正确设定。只有当手工输入数据时，才必须设定索引来得到正确的符号。

索引值	符号
0	G
1	H298
2	H0

11.13.2 DELETE

描述：还没执行。

提要：DELETE

11.14 存储或读取数据的命令

11.14.1 SAVE_GES_WORKSPACE

描述：GES 使用的数据区可保存在一个文件上（Windows 下用扩展名“ *.GES5 ”，UNIX/Linux 下用“ *.ges5 ”）。缺省文件名是“ RESULT.GES5 ”或等于以前 READ_GES_WORKSPACE 命令中使

用的一个。注意，述初始非格式化的并且不能打印。

提要 1：SAVE_GES_WORKSPACE <file name>

提要 1：SAVE_GES_WORKSPACE

接着提示：WORKSPACE FILE /ABCD/: <file name>

在 UNIX 和 Linux 下，此提示将指定写当前 GES3 工作取的文件名。

在 Windows 下弹出如图 11-1 所示“ Save As ”窗口。用户将在“ File name ”框给出一个名称，当希望在“ Save in ”框中保存文件时用户可进一步指定工作目录。通常在“ Save as type ”框中缺省文件类型是适合于 GES5 工作区格式的（即 GES5 文件）。

图 11-1 “ Save As ”窗口：保存 GES5 工作区文件

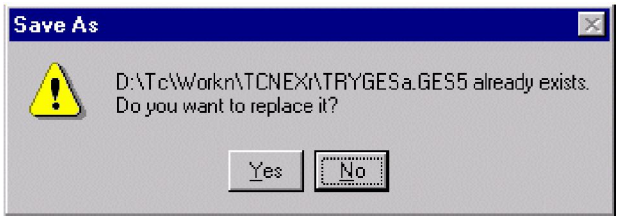


图 11-2 “ Save As ”警告窗口：进行或取消保存

若已有相同名称的一个*.GES5 文件保存在当前工作目录下，弹出如图 11-2 显示一个有警告消息的小屏幕。用户选择“ Yes ”钮来进行以前*.GES5 文件的替换或选择“ No ”取消当前保存。对后一种情况，用户可给出其它名或改变工作目录以便在文件上保存当前 GES5 工作区。

11.14.2 READ_GES_WORKSPACE

描述：用 SAVE_GES_WORKSPACE 命令以前保存在文件上的数据取读回到 GES 系统。注意，这些保存的文件对每个 CPU 类型是唯一的，因此保存在一个 CPU 类型上的数据区不能用于其它 CPU 类型。

提要 1：READ_GES_WORKSPACE <file name>

提要 1：READ_GES_WORKSPACE

接着提示：WORKSPACE FILE /ABCD/: <file name>

在 UNIX 和 Linux 下，此提示将指定写当前 GES3 工作取的文件名。

在 Windows 下弹出如图 11-3 所示“ Open file ”窗口。用户将在“ File name ”框给出一个名称，当希望在“ Look in ”框中保存文件时用户可进一步指定工作目录。通常在“ File of type ”框中缺省文件类型是适合于 GES5 工作区格式的（即 GES5 文件）。

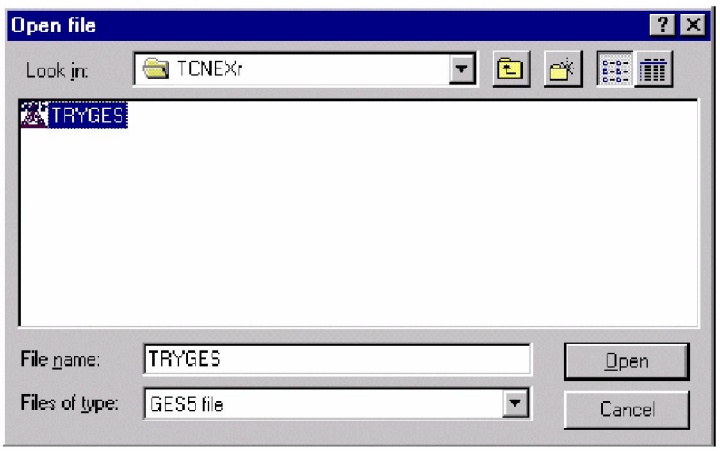


Figure 11-3. **The “Open file” window: Opening the GES5 workspace file.**

11.15 其它命令

11.15.1 SET_INTERACTIVE

描述：此命令用于演示或宏文件以便停止 GES 模块中命令文件的执行。在交互模式下此命令无意义。
提要：SET_INTERACTIVE

第 12 部分 优化模块（PARROT）

12.1 引言

PERROT 模块⇔是 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件的另一个重要而基本模块，具有以各种不均匀交互作用体系中描述一系列平衡态或动力学过程的量的试验观察值来评价热力学与动力学模型参数的全面子程序包。模块交互地与 Thermo-Calc 和 DICTRA 中其它基本模块相联接。

PERROT 模块利用 GES 模块来处理多元系中形成的各种相的模型，以及用 POLY 模块来存储和计算复杂不均匀平衡。使用 Thermo-Calc 中 PARROT 模块之前，应熟悉 POLY 模块同时也学习 GES 模块。这里解释有关模型、参数、函数和平衡态等各方面，在 DICTRA 软件中，也可利用 DICTRA 工具存储和模拟扩散控制相变的动力学过程性质。

PARROT 模块的目标时，提供统一的一套子程序用于相对实验数据和文献数据来评价各种热力学与动力学参数。非常鼓励高级用户使用此模块进行数据评价和数据库建立。然而，由于严格评价的特殊目的，此模块不包含在第三部分应用程序界面，即 TQ 界面。

类似于 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件中使用的其它模块，PARROT 模块给用户提供具有用户界面的应用程序，用户界面有一套简单而通用的数据编辑和参数优化命令。通过这个用户界面，可交互输入与修正相描述、模型连接、基本热力学参数等。通过访问 EDIT_EXPENRIMENTS 命令由 PARROT 的子模块 ED_EXP 来完成数据编辑任务（见 12.7.7 节和第 13 部分）。

象 POLY 和 GES 模块一样，此模块有具有动态存储的自己的工作区。它连续地将所有类型热力学/动力学数据和计算的平衡态或动力学过程传递到 POLY3、GES5 和 DICTRA 工作区。

PARROT 模块有如下命令：

```
PARROT:?
  AMEND_PARAMETER          LOIST_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_WORKSPACE      SET_SCALED_VARIABLE
  INFORMATIONRE            RECOVER_VARIABLES          SET_STORE_FILE
PARROT:
```

12.1.1 热力学数据库

对描述真是体系的热力学模型参数的严格评价已经证明具有理解材料性质、结构和工艺的工业意义，这是因为在确定所有二元与多个三元以及一些具有多种模型的高阶体系的热力学模型参数时花费了大量的努力。

从这样的模型与参数中，可预测多元系的稳定态。具有 10-15 种元素的热力学数据库可精确预测一些工业金属体系如钢、铝合金、钛合金和镍基超合金的稳定态。此外，在长期国际间合作下的严格评价工

作已经使建立一些多种用途的大规模、内部自洽热力学数据库成为可能，如 SGTE 物质与溶体数据库（目前包含 83 种元素）。

严格评价热力学数据库的优点总结如下：

- 将大量实验数据和并同时减少为少数几个模型参数的唯一方法；
- 实验热力学与相图数据的一致评价；
- 热力学数据的可靠内插与外推；
- 计划新的实验工作的有用工具；
- 模型化与模拟相转变的基础。

以上的最后一点也许是最重要的。很多动力学过程的理解通常很贫乏，必须通过试错来确定输入与操作条件变化的敏感性。热力学提供了不仅关于体系试图达到稳定态的信息，而且提供了介稳状态化学势与驱动力的信息。这是复杂材料过程的动力学模型化与模拟的基础。

12.1.2 优化方法

对于以可忽略的不准确度决定的所有独立状态变量，从最大可能原理导出的最佳配合的标准将使残差平方和最小化。在 PARROT 模块中以两种方式考虑实验条件中不准确度：

a) 在 POLY 模块中可预先描述条件即独立状态便两种的不准确度。此种情况下，以独立状态变量的实验值计算平衡。假定非独立状态变量与独立状态变量呈线性关系的误差传播定律来计算非独立状态变量的标准偏差。

b) 条件的“真实”值可使用定义的变量作为条件来优化，这可用实验数据文件中的 IMPORT 命令来获得。在此种情况下，以实验数据文件中 EXPERIMENT 命令指定独立状态变量的实验观察值。实验数据文件中使用的命令为，带有少数扩展名的 POLY 模块命令的一个子集，在第 13 部分中有详细阐述。

从 Harwell Subroutine Library 中用子程序 VA05A 可找到给出平方和最小的一套变量。

12.1.3 请求使用最小平方方法

最小平方方法可提供给模型参数一个良好骨架，假设：

- 观察量的随机性具有高斯几率分布；
- 观察量仅服从随机误差；
- 不同实验是无关联的；
- 大的观察数；
- 所考虑的模型是准确的

在通常热力学评价中几乎不能满足所有要求。但是没有其它更好的方法，仅能尽可能尝试接近这些要求。

1 2.1.4 其它优化软件

由 Lukas 博士开发的二元系优化的传统程序称为 BINGSS。为了与此软件兼容，已经开发了从 BINGSS 到 PARROT 转换的大量应用程序：

c2g 这个 c2g（coe-to-ges）程序将 BINGSS“COE”文件转换为访问所有元素、相和参数的 PARROT 的 setup 文件；

d2p 这个 d2p（dat-to-pop）程序将带有试验数据的 BINGSS“DAT”文件转换为“POP”文件；

t2c 这个 t2c（tdb-to-coe）程序将 Thermo-Calc“TDB”文件转换为 BINGSS 的“COE”文件。这是从 Thermo-Calc 数据库中为纯元素提取参数用于 BINGSS 的一种方法。

12.2 开始

这使用户指南，并不进行评价的工具。这里给除了进行评价的不同步骤的简要阐述。这里提到的命令的更详细情况，请参阅本部分和下一部分记录的相应章节。

有一个 Thermo-Calc 软件/数据库包提供的假想体系评价的例子，Thermo-Calc 例子一书中进行了描述，应仔细研究。也要研究其它公开的评价，特别是要学习模型。

12.2.1 试验数据文件：POP 文件

评价者首先要收集选定体系的试验结果与文献数据，同时访问称作*.POP 文件上（因为缺省扩展名为.POP）的所有试验数据。由具有一些附加特性的 POLY 命令描述实验平衡与测量。在第 13 部分的特定章节描述了*.POP 文件中合法的命令。

*.POP 文件非常重要，因为其描述了一个体系已知的实验数据。通常当有新的信息或相模型变化时几年以后要重新评价同一体系，当某些人也作了评价时，重要的是 POP 文件中的信息要很好组织和记录，它对人和程序都是可读的。

*.POP 文件中的语法应是自记录的，也应独立于用于描述体系中相的模型。

指定试验平衡的推荐方法应尽可能接近实际试验条件，通常，已知几套稳定相，以及温度、压力和一些或所有成分。

12.2.1.1 单相平衡

具有单个稳定相平衡的试验通常强调混合或化学势。例如，对 Au-Cu 系试验的描述：

```
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
COMMAND Measurement by Topor and Kleppa, Met trans 1984
LABEL ALH
EXPERIMENT HMR=-1520:200
```

本例中前五个命令为标准 POLY 命令，在 POLY 用户值南（第 8 部分）中进行了描述。而第一个命令 CREATE 在 POLY 模块中很少使用，值得一些注释。每个试验平衡必须以 CREATE 命令开始，命令之后给出的第一个整数是唯一的标识符，用于以后交互是用来为例子设定重量。第二个整数为初始码，其中 0 意味着最初悬挂所有组元和相；1 意味着访问所有组元而悬挂所有相，2 意味着最初访问所有组元和相。

最后三个命令 COMMENT、LABEL 和 EXPERIMENT 仅在实验数据文件和 ED_EXP 模块中有。第 13 部分中有详细描述。

EXPERIMENT 命令指定要通过优化而拟合的量。此命令的语法类似于 POLY 命令 SET-CONDITION，后跟一个状态变量或一个函数名与一个值和一个不确定值。

CONMMENT 命令后跟在优化工作文件中保存的文本。也可在美元符号“ $ ”后给出主时，但是当编译试验数据是要丢失这些注释（下面要描述编译）。

LABEL 命令提供指定设定重量时用户要处理为一个实体的一套平衡。一个标签最大有四个字符，并且必须以字母“ A ”开始。

12.2.1.2 两相平衡

来自相图大多数试验信息涉及量相或更多相。例如，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-ALTENATE-CONDITION X(LIQUID,CU)=0.16
```

上面描述了除了最后一个之外的所有命令。最后一个命令指定平衡时液相成分的估计值。实际上是不必要的，除非在交替模式计算中使用这个实验平衡。下面将更详细解释交替模式。

注意，此情况下的试验是温度，可同样很好地描述温度作为 CONDITION 和成分作为 EXPERIMENT 的相同熔点，因为两者都是测量量。用作 CONDITION 的选定量应基于实验技术。那些具有最低精度的应该用作 EXPERIMENT。

12.2.1.3 不变平衡计算

PARROT 模块的特性是，不变平衡为提供给评价的最重要试验信息，因此推荐在 POP 文件的体系有所有的不变平衡，即使其中一些没有明确测量。来自已有试验数据的合理估计通常可能就足够了。但是，应小心使用按地形学方法绘制的相图，其中有很少数据限制了艺术家的想象力。在评价的结尾，应排除这种估计的平衡，但是它们对获得模型参数的开始值是很有用的。

下面给出一个二元系中一个三相平衡（即给出不变平衡）的例子：

```
CREATE-NEW-EQUILIBRIUM 1 1
CHANGE-STATUS PHASE FCC BCC LIQUID=FIX 1
SET-COND P=1E5
EXPERIMENT T=912:5
SET-ALTENATE-CONDITION X(FCC,B)=0.1 X(BCC,B)=0.4 X(LIQ,B)=0.2
LABEL AINV
COMMENT Estimated compositions
```

交替模式计算需要交替条件来使用这个实验，不变试验的另一个例子是全等转变：

```
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
```

由于来自相图估价的一些实验，可能估计亚稳不变平衡。特别地，这样的亚稳平衡对同时减少要评价的相的数目是有用的。例如可假定某些中间相不形成与外推稳定三相平衡以下的液相面，估计两个其它相与液相之间亚稳三相平衡的温度与成分。

另一个有用的技术是，外推包晶平衡的液相线来估计化合物的全等熔化温度。这可能比包晶平衡本身更有用，因为它仅涉及两相。

12.2.1.4 三元与高阶试验

PARROT 模块可用与二元相同的方法来处理三元与高阶信息的优化。仅有的差异是，每个组元需要再添加一个条件。

实际上，四元与高阶信息主要用于优化二元或三元参数。在三元系，使用条件上具有不确定性的特性可能更重要。若有两相，温度与压力已知，确定二元系的结线并测量其中一相的成分。对于三元系中的结线，必须测量至少两个成分同时都具有同样的不确定性。然后可将不确定性赋予选定为条件的成分。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)=0.12:0.02
LABEL AFB
SET-ALTERNATE-COND X(BCC,B)=0.17 X(BCC,C)=0.07
```

下面解释交替条件。

二元评价的一个问题是，用非常不同的模型参数通常几乎等同地描述试验信息。通常将这些评价外

推到给出关于模型参数最佳的信息的三元系。有时，需要来自几个三元系的信息来决定二元系的最佳描述。

12.2.1.5 二元与三元试验的同时使用

PARROT 模型允许同时优化二元与三元（和高阶）信息。通过使用已 COMPONENT 作为关键词的 CHANGE_STATUS 命令，可有来自同一 POP 文件上的二元与三元系的实验信息；命令 CHANGE_STATUS COMPONENT C=SUS 是脆弱的。然而，需要受共设定来适当工作。在三元（A-B-C）中二元（A-B）三相平衡（FCC-BCC-LIQ）的例子是：

```
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 fron A-B
```

注意在 CREATE-NEW-EQUILIBRIUM 命令中初始编码 0 的使用，这意味着必须输入所有的组元。

12.2.2 图形试验文件：EXP 文件

为了绘制带有试验数据的相图，推荐以及“ DATAPLOT ”格式在文件上也书写试验数据。本用户指南的第 15 部分描述了这个。在某些情况下，POP 文件中的表可容易地转换为 DATAPLOT 格式。DATAPLOT 文件缺省扩展名为“ .EXP ”（在 Windows 下）或“ .exp ”（在 UNIX/Linux 下）。

12.2.3 系统定义文件：SETUP 文件

第二步是创建一个“ SETUP ”文件，该文件由元素、物种与相名称上的定义、相模型上的定义和如“ 点阵稳定性 ”或 Gibbs 形成能等所有已知信息所组成。

纯元素的大多数值可在 SGTE 获得的 Alan Dinsidale 在 CALPHAD(1991,317-425)中发表的收集中找到。这些也可从与 Thermo-Calc 软件包一起免费发布的 SGTE 纯元素数据库中提取。在 GES 模块中有带有选项 P 的命令 LIST-DATA，可用于从 PURE 数据库中提取数据之后创建临时系统定义文件。必须编辑这个临时文件，同时必须添加新相与参数。SETUP 文件的缺省扩展名为“ *.TCM ”，这是 Thermo-Calc MACRO 文件的简写。

在 SETUP(TCM)结尾，PARROT 命令 CREATE-NEW-STORE-FILE 将为要评价的体系创建工作文件。

12.2.3.1 相模型

具有为 POP 文件收集试验数据的文献通常包含对象模型化有用的信息。对描述各种相热力学有用的模型的勘定可从来自发表在 CALPHAD 杂志（1997，139-285）的 Second Ringberg Workshop 的报告中找到。大多数晶态固体的当前使用模型可在 Sundman 与 Ågren（J Phys Chem Solid 1981, 297-301）描述的亚点阵模型基础上用化合物能形式（CEF）描述。

为了进行与已有数据库一致的评价，大多数溶体的模型通常必须取自数据库。对金属之间的相，确定相与其它体系的象是否有相体结构是重要的。

对模型的选择应考虑一下准则：

- 物理可靠性；
- 尽可能少的优化参数；
- 模型的适当外推；
- 与以前评价的一致性

12.2.3.2 模型参数

PARROT 模块储备了 99 个优化变量，并可处理单个评价体系中 1000 个实验测量。但对同时的变量与实验数有限制，每次优化程序列出这些限制。

变量称为 V1 到 V99，当输入函数与参数来优化势使用它们，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

使利用每个都与温度线性相关的 3 个 Redlich-Kirster 系数来表达液相的 Gibbs 能成为可能。然后可优化变量 V1 到 V6 来描述试验信息。在系统定义文件中通常引入必须要还多的变量，因为在每相后续阶中拥有它们很方便。

在某些条件下，模型要求几个热力学参数是相关的，这可通过使用相同变量来方便地处理几个参数。例如 B2 有序相的参数可描述如下：

ENTER-FUNCTION GAB 298.15 V10+V11*T; 6000 N
ENTER-FUNCTION G(B2,A:B) 298.15 GAB; 6000 N
ENTER-FUNCTION G(B2,B:A) 298.15 GAB; 6000 N

具有测得热容数据的化学计量比化合物可要求几个变量来描述其温度关系，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

有可能优化 GES 中所有类型参数，这些参数可描述为温度、压力和成分的参数。例子是，标准形成焓、熵、热容、摩尔体积，热膨胀系数、压缩系数、磁性转变的居里温度、波恩函数等。

12.2.4 工作文件或存储文件：PAR 文件

正如上面 12.2.3 节所述，在 SETUP(TCM)文件的结尾；PARROT 命令 CRATE-NEW-STORE-FILE 的使用将为评价体系创建工作文件（或称存储文件）。这种工作文件也可使用相同命令 CRATE-NEW-STORE-FILE 在 PARROT 模块中创建。存储在 GES、POLY 和 PARROT 模块中使用的工作区的体系（元素、物种、组元、相）、符号（常数、变量、函数、表）、参数等的定义上的所有当前数据将自动存储在这样的工作文件上，但不存储任何实验信息。

工作文件有一个缺省扩展名“ .PAR ”（在 Windows 与 UNIX/Linux 下）。注意，这样的工作文件不能直接用任何编辑起来编辑。此外，他们依赖于硬盘（意思是它们对每种 CPU 型号是唯一的，因此保存在一种 CPU 型号上的工作文件不能在其它 CPU 型号上使用）。

12.2.5 各种文件名与其关系

由于文件具有不同扩展名，对一个评价的所有文件使用相同名称是可能的，因此对 Au-Cu 系，有 aucu.POP、aucu.EXP、aucu.TCM 和 aucu.PAR。特殊低，工作文件（PAR）在评价过程中可存在于几个拷贝中，但是推荐更新文本文件 POP、TCM 和 EXP 来反映 PAR 文件中所有交互变化。

文本文件基*SETUP 文件、*.POP 文件、*.TCM 文件与*.EXP 文件使评价的重要文件。在评价的结尾，这些硬以这样的方式更新，即可直接运行*SETUP 文件来编译实验与进行优化，以便快速取得最终结果。这要求在*POP 文件中输入最终分数和设定为参数开始值的最终参数。利用这样的文件，使用新的实验数据或欣模型更容易重新评价体系。

工作文件（*.PAR）应考虑，这总是包含最后优化的参数和选定实验的分数。工作文件包含 POLY3 和 GES5 的工作区。当从当前工作文件计算相图时，创建*.POLY3 文件。此*.POLY3 文件将有当前参数的拷贝。如要完成进一步优化，用户偶然尝试读取旧的*.POLY3 文件，可破坏新的参数并用旧的覆盖。因此当运行 PARROT 时必须决不读取*.POLY3 或*.GES5 文件。但是，以当前参数计算相图时当然可保存新的*.POLY3 或*.GES5 文件。

12.2.6 交互运行 PARROT 模块

用三个文件 POP、SETUP 和 EXP，用户可开始交互地运行 PARROT。这可划分为一些分开的步骤。通常，通过循环修正分数、修正模型、添加新的信息等重复这些分开的步骤。确定评价完成的时间实际上是困难的，通常公开的最终期限设定为工作的极限。

用宏命令执行 SETUP 文件上的命令。通常有大量出错消息，必须更正 SETUP 文件并重新运行，直到没有出错消息。在 PARROT 模块中，可交互列出相的描述、参数表达式和优化变量值。成功运行 SETUP

文件后，应检查是否已经正确输入所有的模型与参数。

12.2.6.1 实验的编译

下一步是“编译”实验数据文件（POP），完成编译的命令是 COMPILE。这个编译也将通常导致大量由于语法错误而出现的出错消息。当发现出错和给出可以理解的消息是通常停止编译。这种语法错误必须在 POP 文件中更正，同时文件必须再次编译。编辑与编译时使用几个窗口是很方便的。有时出错信息难懂，同时程序实际找到之前出错可发生在一些行中。与专家探讨通常是快速更正这些类型问题的最佳方法，因为手工难于找到正确的位置。当 SETUP 文件与 POP 文件为文本文件时，可容易的利用 E-mail 发送到世界各地的专家手中。

12.2.6.2 设定交替模式

当已经正确编译实验数据文件时，出现第一个真正大问题，这是要从模型中计算体系中相的实验信息。最初，所有模型参数为零，在很多情况下不可能从模型中计算测量值除非参数有合理的值。

最近，通过在 PARROT 模块中引入交替模式已经简化了这个问题。命令 SETALTERNATE-MODDE YES 意思使用近似技术（下面分开的一节将描述）计算涉及两相或更多相的实验平衡。用户可通过设定 ED_EXP 模块中的分数选择所使用的实验信息。

以交替模式使用 PARROT 模块中 OPTIMIZE 命令直到其收敛。通常需要几个 OPTIMIZE 命令，同时也许用户将不得不改变实验数据的选择。这个再次在 ED_EXP 模块中完成。用命令 LIST-RESULT 以可读形式获得优化结果。工作文件不断更新，并总是包含最后的油画变量与计算结果。有的时候当尝试实验数据或模型的各种选择时用户可对保存当前工作文件的拷贝感兴趣。这个通过进行工作文件的拷贝来完成并给出拷贝的另一个名称。

12.2.6.3 绘制中间结果

读取来自 LIST-RESULT 命令的输出通常不足以理解如何获得好的（或坏的）拟合。由于 PARROT 模块是 Thermo-Calc 软件包的一部分，使用 POLY/POST 模块直接计算相图和有关热力学性质的其它图是可能的，并可与保存在 EXP 文件中的实验数据一起绘图。由于非常频繁地作这个工作，有这样计算命令序列并在宏文件（TCM）上绘图是方便的。当要优化的变量远离其最终值时计算与绘制相图可给出令人惊讶的的结果!

12.2.6.4 实验数据的选择

以交替模式优化给出一套参数的开始值。当收敛时，用户应关闭交替模式并使用正常模式计算所有平衡。在 ED_EXP 模块中以 CALCULATE-ALL 命令可完成这项工作。几个实验平衡还可收敛失败，用户可能不得不提供手工的开始值或甚至取消一些平衡点（通过将其分数设定为零）。在评价稍后阶段，导游化的参数接近其最终值时，用户能够存储并计算所有的平衡。

当在 ED_EXP 模块中能计算选定的平衡时，用户应仅用 0 迭代使用 OPTIMIZE 命令在 PARROT 模块中再一次计算所有的实验点。来自 LIST-RESULT 命令的输出应仔细检查

在这个输出中，最右边行中以星号“*”标记拟合不好的实验信息。在最终阶段很多实验数据拟合不好不是问题，但是应仔细处理 PARROT 中优化本身不能解决的出错。这样的问题的典型例子是，当一相有同成分熔点同时都有同成分转变两侧的实验信息时，可能发生计算的平衡位于同成分点的“错误的”一侧因此给出大的出错。用户必须在 ED_EXP 中手工更正这个问题。当实验信息来自一侧同时计算给出两侧的成分时，溶解裂隙出现类似的错误。

12.2.6.5 实验数据与参数的临界集

当已经发现实验数据的切合实际的分量，称作“临界集”。当确定该集时应考虑以下几点：

- 实验技术的可靠性；
- 相同量的独立测量之间的一致性；
- 不同实验方法获得的数据之间的一致性；
- 应仅使用实验确定的性质，没有量的转换；
- 小心实验估计精度；

Ø 更正系统错误（例如温度标度）；

Ø 利用以前评价的经验；

Ø 利用“负的”信息，例如，在某些成分或温度范围内相时不稳定的。

评价者也必须确定要优化的一系列合理的模型参数。利用更多的参数，通常减少误差的总和，而同时参数更不好确定。由列出的每个优化变量的相关标准偏差 RSD 栏给出参数有效位的量度标准。RSD 的含义是没有改变具有多个单位的误差的总和时，用此因数改变参数的+/-。大的 RSD 意味着变量不好确定。

只有当用户在 RESCALE 命令之后运行优化并几乎立即收敛即“标度因数”与“值”相同时 RSD 才有意义。若有 RSD 大于 1 的变量时，意味着使用了过多的变量。

RSD 值也依赖于实验的分量。通过改变分量有可能减小 RSD

若有一个或更多的 RSD 大于 1 的变量时，应尝试取消一个或多个优化变量，即将其设定为零，或者可从其它信息来确定一些值，如用一些半经验估计方法。

12.2.6.6 优化与连续优化

使用偶尔可修正的实验临界集，并且当尝试各种要优化的模型参数时，用户必须使用其技巧来或的最佳可能的结果，误差总和越小结果越好。通过给出命令 OPTIMIZE、CONTINUE、RESCALE 和再次的 OPTIMIZE，当 PARROT 声明不能改进一系列优化变量时用户可最终达到一个点。然而，这可能是不可信的，应使用再多几个 OPTIMIZE 命令。但是如果 PARROT 以相同量迭代收敛势（当有变量要优化），不的不接受这个集。

几次使用 OPTIMIZE 取得优化收敛的问题是，有时参数突然开始改变几个数量级。这个行为可导致不可能的参数值，要求仔细地重新考虑实验临界集的分量和要优化的参数的分量。

若用户对整个拟合还不满意，必须改变分量或添加更多信息来促使沿正确的方向优化。这样处理的成功性依赖于优化者的技巧。

12.2.6.7 一些提示

优化过程中可能发生很多问题与错误，不可能给出如何处理这些问题与错出的简单解释。主要推荐是，排除给出奇怪结果的所有试验而确信合理计算所有重要不变平衡。如果一些不变平衡不能计算，可更好排除这些平衡中的中间相，并在第一步仅优化液相和最重要的溶体相。当对最重要的溶体相或的合理的结果时，放回中间相，并优化其，而液相与已经优化的溶体相保持固定。更多的提示见 12.4 节，本阶段步可能给出更一般的建议。

12.2.6.8 结果分析

在极少的情况下，评价者以不成改进的感觉完成评价。正如如上所述，当将完成评价是通常有其它的因素。但应进行最终结果的如下分析：

Ø 试验临界集的满意描述；

Ø 不包含在临界集中的数据的满意描述；

Ø 一系列合理的参数值；

Ø 热力学性质的合理外推到高阶体系；

Ø 使用其它临界集或模型来比较结果；

Ø 最终参数的统计性质分析；

在来自评价的报告和出版物中也应注释这个分析。

12.2.7 参数修整

当所有优化变量有小于 1 的相对标准偏差时，可接受其作为评价的最终参数。然而，所有的参数有很多数字，它们必须以某种方式圆整。处理金属系时最简单的圆整通常是使在 1000K 处很多数字将小于 1 J/mol 的差异。对于水溶液或非常不同温度范围的体系，必须使用体它判据。但是，给出差异大于 1 J/mol 的圆整可给出相图上或与其它试验具有可察觉的变化。

12.2.8 交互完成的变化要求编译

12.3 交替模式
408

12.4 诀窍与处理
410
12.4.1 冲突的数据

12.4.2 缺乏数据与坏数据

12.4.3 时间估计

12.4.4 参数量

12.5 命令结构
12.5.1 一些项的定义
412

12.5.2 与其它模块连接的命令

12.5.3 用户界面

12.6 一般命令
413

12.6.1 GOTO_MODULE

12.6.2 HELP

12.6.3 INFORMATION

12.6.4 BACK

12.6.5 SET_INTERACTIVE

12.6.6 EXIT

12.7 最频繁使用的命令

12.7.1 CREATE_NEW_STORE_FILE

12.7.2 SET_STORE_FILE

12.7.3 COMPILE_EXPERIMENT

12.7.4 SET_ALTERNATE_MODE

12.7.5 SET_OPTIMIZING_VARIABLE

12.7.6 SET_FIX_VARIABLE

12.7.7 EDIT_EXPERIMENTS

12.7.8 OPTIMIZE_VARIABLES

12.7.9 LIST_RESULT

12.7.10 CONTINUE_OPTIMIZATION

12.7.11 LIST_ALL_VARIABLES

12.7.12 RESCALE_VARIABLES

12.8 其它命令

12.8.1 SET_OUTPUT_LEVELS

423

12.8.2 SAVE_PARROT_WORKSPACES

第 13 部分 编辑-实验模块（ED-EXP）

p436

第 14 部分 系统实用模块（SYS）

14.1 引言

Thermo-Calc 和 DICTRA 软件的传统版本有所谓的系统实用模块（System Utility Module⇔）（在 SYS 提示下），提供对模块内部通讯、宏文件创建与操作、工作与会同环境设置以及命令信息搜索的主要控制。它们对适当进行一般计算、如愿地获得计算结果和容易地管理各种任务都是基本的。

也利于一些零散特性，如用户界面设置、命令单元设置、出错报告优先顺序、终止特征定义、工作区列表、通过一个单元打开与关闭文件、交互计算、消息返回等。一些这样的零散命令用于进行用户优先选择，一些是为调试程序而设计的。少数零散命令仅包括在一些特定模块中，在最近的版本中已经废止。

SYS 模块中有如下命令：

SYS:?

BACK	LIST_FREE_WORKSPACE	SET_INTERACTIVE_MODE
CLOSE_FILE	MACRO_FILE_OPEN	SET_LOG_FILE
EXIT	NEWS	SET_PLOT_ENVIRONMENT
GOTO_MODULE	OPEN_FILR	SET_TERMINAL
HELP	PATCH	STOP_ON_ERROR
HP_CALCULATOR	SET_COMMAND_UNITS	TRACE
INFORMATION	SET_ERROR_MESSAGE_UNIT	

SYS:

14.2 一般命令

14.2.1 HELP

描述：此命令列出所有命令和给出特定命令的解释。将给出指定命令的广泛描述。

此命令可缩写。可用下划线或连字符分开命令的词。命令用空格终止，然后用户在同一行键入对命令的意见。命令之后用户也可点击<RETURN>键，接着将提示意见。意见必须按程序提示的指定顺序给出。

提要 1：HELP <command name>

提要 2：HELP

接着提示：COMMAND <command name>

选项：command name—获得帮助的 SYS 模块命令的名称

注意：没有键入命令名而按<RETURN>键将列出所有 SYS 模块命令。

指定唯一的命令名将在屏幕上打印命令的解释（通常是与用户值南中找到的相同文本）。

键入不是唯一的命令缩写将列出所有匹配的命令。键入唯一的缩写或完整命令名可获得期望的命令信息。

14.2.2 INFORMATION

描述：此命令给出 Thermo-Calc 软件系统的特性的信息。可获得关于各种主题（概念和模型）的基本信息，就象本手册不同部分描述的一样。要用此命令显示简要信息，请参阅 14.4 节。

提要：INFORMATION

接着提示：WHICH SUBJECT /PURPOSE/: <subject name>

必须给出主题名。可得到下面列出的各种主题的广泛信息（如键入问号“？”可见到此列表）。

PURPOSE (Introducing the THERMO-CALC Software Package)

COMPUTATIONAL THERMODYNAMIC

TCC-THERMO-CALC CLASSIC	TCW-THERMO-CALC WINDOWS
TC4A-THERMO-CALC FOR ACADEMIC	TC4U-THERMO-CALC FOR UNIVERSITY
MODES IN THERMO-CALC	MODULES OF THERMO-CALC
DATABASES IN THERMO-CALC	FUNCTIONALITY OF THERMO-CALC
STATE VARIABLES	DERIVED VARIZBLES
PHASE DIAGRAM	PROPERTY DIAGRAMS
TDB(DAYTABASE 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)
APPLICATION 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)

14.2.3 GOTO_MODULE

描述：此命令是线在模块之间的切换。也必须键入所期望的模块名。为了获得一列模块，按<RETURN>键（也可参见 5.4.11 节）

提要 1：GOTO_MODULE <module name>

提要 2：GOTO_MODULE

接着提示：MODULE NAME:

NO SUCH MODULE, USE ANY OF THESE:
SYSTEM_UTILITY
GIBBS_ENERGY_SYSTEM
TABULATION_REACTION
POLY_3
BINARY_DIAGRAM_EASY
DATABASE_RETRIEVAL
FUNC_OPT_PLOT
REACTOR_SIMULATOR_3

PARROT
POTENTIAL_DIAGRAM
SCHEIL_SIMULATION
POUBAIX_DIAGRAM
TERNARY_DIAGRA
MODULE NAME: <module name>

选项：module name—后续打开的模块名。

14.2.4 BACK

描述：此命令给出回到最近模块的控制。在一些情况下，有必要在 Thermo-Calc 软件的两个模块之间向前和向后切换，此命令比通用命令 GOTO_MODULE 更简单。

提要：BACK

14.2.5 EXIT

描述：此命令终止程序并返回操作系统。除非已经执行了 SAVE 命令（在 GES、POLY3、PARROT 或 REACTOR 模块中），否则将丢失所有数据与结果。

提要：EXIT

14.2.6 SET_LOG_FILE

描述：此命令使在简单的文本文件上保存用户在 Thermo-Calc 软件中键入的一切成为可能。当执行一个命令序列有问题时，此命令可用于保存在日志文件上键入命令。管理员可检查什么是错的。

此命令也将是体系对所有键入的命令回应完整命令。由于缩写命令对新用户很难遵循，当演示系统时此特性有用。

保存的日志文件可作为宏文件使用简单文本编辑器来编辑。这对为类似的计算运行宏文件或运行 Thermo-Calc 例子宏文件很有用，详细情况参阅 14.2.7 节。

提要：SET_LOG_FILE

接着提示：OUTPUT FILE: <file name>

必须给出文件名，所有以后命令都将保存在其上。

注意：在 Windows 环境下，若命令值后没有给出文件名屏幕上将弹出 Save As 窗口，所以可适当指定路径（在 **Save in** 框）和文件名（在 **File name** 框），如图 14-1 所示。若具有相同名称的*.LOG 文件存在于当前工作目录下，将写在其上面。

不能改变文件类型（即 Save as type 框中的 LOG）。按 **Save** 钮，程序在指定*.LOG 文件中保存所有后续命令

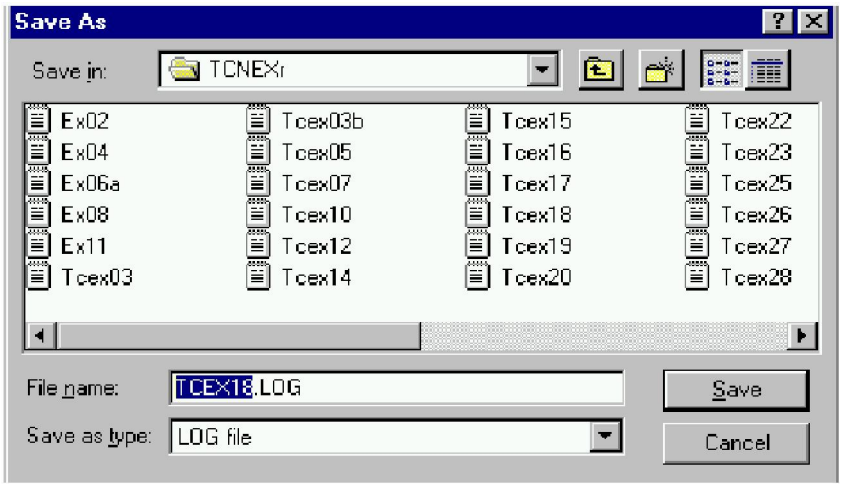


图 14-1 “ Save As ”窗口：在*.LOG 文件上保存所有后续命令

14.2.7 MACRO+FILE_OPEN

描述：宏是预先在文本文件上定义序列命令的方便方法，用此命令可执行宏。当进行仅由很小变化的相同计算时这个命令很有用。适用此命令的较好情况是从评价中计算相图。有了宏文件（通常具有缺省扩展名“ TCM ”），可在一个文件上存储所有类型 Thermo-Calc 命令，仅通过文件名键入继续的宏命令。

宏文件可包含任何合法的 Thermo-Calc 命令。宏必须用命令 EXIT 来终止。或在 SYS、GES、POLY、PARROT 或 POST 模块中用命令 SET-INTERACTIVE 来终止。

宏的有趣的工具是允许于用户进行的交互作用。因此，可以下列方式输入：

GO POLY-3

SET-AXIS-VAR 2 T

@?Low-temperature-limit

@?high-temperature-limit

宏将停止在“ @? ”，在屏幕的“ ？ ”之后写文本并等待用户输入。将使用用户输入作为对 Thermo-Calc 程序的输入；此时为低轴限和高轴限的值。

可有记为#1、#2 等的宏变量。最多有 9 个变量，有以下方式赋值：

@#3First element?

将在“ @#3 ”之后写文本作为对用户提示和等待用户输入。输入赋予宏变量 3。可使用宏的不同部分中这些变量，如：

DEFINE-SYSTEM ##3

宏变量 3 内容的文本复制将插入到“ ##3 ”处。应在更复杂的命令中使用它：

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

将宏变量 3 的摩尔分数设定为轴 1。

再次注意，当处在 POLY、POST、SYS、GES 或 PARROT 模块中时，必须用命令 SET-INTERACTIVE 终止宏命令。

从 TCC 版本 N 起，宏文件可有 5 级，即宏文件可访问另一个宏文件，若宏文件用命令 SET-INTERACTIVE 终止则将继续上一级宏文件的下一个命令。若用 END-OF-FILE 终止，将异常中断 Thermo-Calc 程序。

宏文件在“ @& ”处有一个暂停，再宏文件名之后键入任何符号（除了 Y）可防止停止在任何暂停处。

提要：MACRO_FILE_OPEN

接着提示：Macro filename: <name of a MACRO file>

指定具有宏命令的文件名。缺省扩展名为“ .TCM ”。

注意：在 Windows 环境，若命令之前没有给出适当的宏文件，将在屏幕上弹出 ***Open file*** 窗口，以便适当指定路径（在 **Look in** 框）和文件名（在 **File name** 框），如图 14.2 所示。

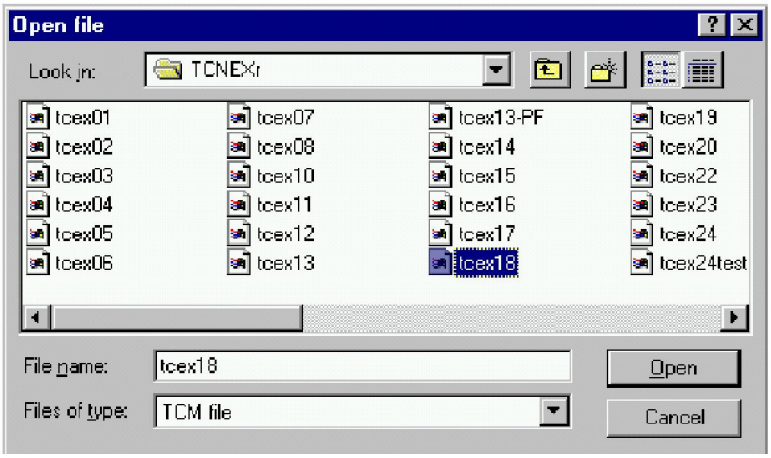


图 14.2 “ Open file ”窗口：打开已存在的 TCM 文件

若宏文件包含设定 LOG 文件的一些 SYS/TDB/GES/POLY/POST/PARROT/ED_EXP 模块文件、保存/读取 GES/POLY/PARROT 工作区、切换 USER 数据库、编译实验（来自存在的*.POP 文件）、创建新的*.PAR 文件、附加实验数据文件、绘制/倾卸图等，屏幕上将弹出相应窗口（如 Save As、Open file、Print 等）。详细情况见相关命令。

14.2.8 SET_PLOT_ENVIRONMENT

描述：此命令允许用户优先在其初始化文件 tc.ini 中设定绘图设备，通常已经访问了，并在不同的 Thermo-Calc 安装下可以改变

注意：此命令必须以空行或两个逗号终止。

提要：SET_PLOT_ENVIRONMENT

接着提示：DEFAUT PLOTDEVICE NUMBER /defaut number/: <device number>

这里给出的号码对每类图形设备是唯一的。为了在屏幕上绘制 Thermo-Calc 图，通常选择缺省（默认）设备号码，如 1 是 PC Windows 上的 MS-Windows 或 IBM-VGA，9 是 PC-Linux 上和所有类型 UNIX 平台上的 X-Windows。其它设备号码（如 PostScript 肖象模式、PostScript 风景画模式、HP7550 绘图仪等）为硬拷贝。

问号“ ? ”将总是给出 Thermo-Calc 使用的所有设备列表。

PSEUDO FILE NAME: <Pseudo-file name>

这里给出的名称是当用户询问图形输出文件时可用于指示物理图形设备的符号。

PLOTDEVICE NUMBER /1/: <device number>

指定图形设表类型的号码。

PLOT FILE NAME: <file name or printer name>

在系统水平上图形设备的名称（文件和打印机名称）

输出举例：SET_PLOT_ENVIRONMENT 1 lasp 5 a0tr, ,

此例将缺省绘图设备号设定为 1（通常对 PC-Windows 为 1，对 PC-Linux 上和所有类型 UNIX 平台为 9），同时定义为绘图设备 5 命名的并连接到名为 a0tr 的打印机上的别名。

14.3 Odd 命令

14.3.1 SET_INTERACTIVE_MODE

描述：此命令将输入和输出单位设定为初始值，即键盘和屏幕。记住，作为最后一个命令将其添加宏文件中，以便在执行宏命令后能与软件交互。

提要：SET_INTERACTIVE_MODE

14.3.2 SET_COMMAND_UNITS

描述：此命令对文件上已经用文本编辑器准备的输入是有用的。这样的输入可能是一个值或大量参数的表。必须用 OPEN_FILE 命令打开此文件。

注意：从输入文件读取任何输入是将跳过输入文件的前两行。

提要：SET_COMMAND_UNIT

接着提示：INPUT UNIT NUMBER /5/: <input unit number>

指定从 OPEN_FILE 命令返回的输入单元号。此文本命令将取自与此单元号相联接的文件。当初在 POLY 或 SYS 模块时此文件上最后命令必须是 EXIT 或 SET_INTERACTIVE，以便回到从键盘读取数据。缺省值是当前输入单位。

OUTPUT UNIT NUMBER /6/: <output unit name>

指定从 OPEN_FILE 命令返回的输出单元号

14.3.3 SET_ERROR_MESSAGE_UNIT

描述：此命令允许用户将出错消息保存到文本文件上。

提要：SET_ERROR_MESSAGE_UNIT

接着提示：UNIT NUMBER /6/: <unit number>

指定将保存出错消息文本文件的输入单位号。

14.3.4 LIST_FREE_WORKSPACE

描述：此命令仅用于系统调试目的。

提要：LIST_FREE_WORKSPACE

14.3.5 PATCH

描述：此命令仅用于系统调试目的。

提要：PATCH

14.3.6 TRACE

描述：此命令仅用于系统调试目的。当访问子程序时，每次在指定的*.TRC 文件上列出一些子程序的讨论值

提要：TRACE

接着提示：TRACE OUTPUT FILE: <file name>

指定轨迹输出文件的名称（带有扩展名 TRC）。将打开此文件并且在其上将写子程序访问的轨迹。若没有给出任何文件，则将关闭以前打开的轨迹文件并关掉轨迹。

14.3.7 STOP_ON_ERROR

描述：此命令对成批作业有用，以便防止程序的错误命令序列引起计算机行为的浪费。若给出 ON，在不合法的或不明确的命令之后终止程序。给出 OFF 来使重新设定此命令的功能成为可能。默认值为 ON。

提要：STOP_ON_ERROR <argument>

在 STOP 命令之后给出优选的争论（ON 或 OFF）。

14.3.8 OPEN_FILE

描述：由此命令打开文本文文件以便用于必须有单位号的其它命令。程序自动给单位号赋值。

提要：OPEN_FILE

接着提示：FILE NAME: <file name>

必须指定合法的文件名。

14.3.9 CLOSE_FILE

描述：用此命令关闭以前打开的文本文件。

提要：OPEN_FILE

接着提示：UNIT NUMBER: <unit number>

必须指定程序以前以命令 OPEN_FILE 给出的单位号。

14.3.10 SET_TERMINAL

描述：此命令现在已经废弃。

提要：SET_TERMINAL

14.3.11 NEWS

描述：此命令在新的版本中已经废弃。

提要：NEWS

14.3.12 HP_CALCULATOR

描述：这是使用颠倒精炼符号的 QBA 简单交互计算：

REVERSE POLISH CALCULATOR

0.0000000E+00

```
HCP>?
  This is a calculator with HP flavour
  Input are number, + - * / and ^ and OPCODEs.
  Use HELP to list OPCODEs.
  Several number an operations can be give 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 *
  Coputes 2*EXP(1.5**3-3000/(8*1273))
```

提要：HP_CALCULATOR

注意：下面列出所有 OPCODEs（HPC 码）

```
HCP>HELP
  BACK        CLX         HELP      RCL_REG     SQRT        [ACOS
  CHSIGN      COS         LIN       LN          ROT_STACK   [ASIN
  CLEAR_REG   DISPLAYREG  LOG       SHOW_STACK  SWITCH_XY   [ATAN
  CLSTACK     EXP         POEWR-2   SIN         TAN
HCP>
```

必须使用 BACK 命令退出 HP_CALCULATOR，以便回到 SYS 模块。

14.4 一般信息的显示

当在 SYS 模块中使用 INFORMATION <SUBJECT>命令序列时，在屏幕上可显示关于于 Thermo-Calc 软件/数据库/界面报有关的以下简要信息：

PURPOSE (Introducing the THERMO-CALC Software Package):

Thermo-Calc 是一个计算热力学领域中最强大和最灵活的软件包之一，已经广泛用于所有类型复杂不均匀相平衡和多元相相的热化学计算。由于可用于大多数平台，Thermo-Calc 软件提供了基本热力学需要，如多元系中平衡计算、相与性质图以及热力学因数（驱动力）。

Thermo-Calc 的特色是具有广泛的模型，使进行涉及热力学的最复杂问题计算成为可能。

Thermo-Calc 由几个基本模块和高级模块组成，来进行平衡计算、相图与性质图计算、热力学两制表、数据库管理、模型参数评价、实验数据处理以及图形表达的后处理。

Thermo-Calc 能使你通过基于所有类型实验信息的严格评价建立自己的数据库。

Thermo-Calc 利用灵活的易于使用的用户界面。此外，已经开发了完全 GUI（图形用户界面）版本，即 TCW（Thermo-Calc Windows）。

Thermo-Calc 给出了可进行最快最稳定数学和热力学求解的标准热力学计算引擎。其它要求精确计算热力学量的任何软件都可通过 TQ 和 TCAPI 编程界面来使用 Thermo-Calc 引擎。

Thermo-Calc 的优点是起多重计算。同一公司、研究所和大学的几个部门可为不同目的使用此软件包。验证过的应用例子包括钢厂、航空、运输和制造工业。利用 Thermo-Calc 提供的工具，可优化材料工艺来产生更高生产率，在更低成本下生产更好产品。

COMPUTATIONAL THERMODYNAMICS:

在过去十年里与计算机计算和模拟的材料科学与工程相联系的研发已经产生了各种材料概念性设计的新方法。热力学与动力学的全面组合使从各种材料加工过程结果预测材料成分、结构和性质成为可能。

产品开发与过程控制的数学模型化的越来越多的重要性已经证明对热力学计算与动力学模拟的高要求。新材料的现代设计已从计算热力学与动力学中获得了巨大受益。

Thermo-Calc 的热化学计算和 DICTRA 动力学模拟可加强制造过程设计、热处理温度的选择、工艺过程的油画等能力。这些全面的软件/数据库/界面软件包已经广泛证明是，帮助降减少昂贵耗时的实验改进质量性能和可值环境影响的最强大和最灵活工程工具。

TCC -THERMO-CALC CLASSIC:

现在使用 Thermo-Calc 软件（TCC）的传统版本。

TCC 具有命令行界面和宏文件特色。它使 Thermo-Calc 软件的所有功能更容易，并适于材料化学热力学复杂不均匀平衡、亚稳平衡、相图、性质图等的研发。

TCC 在计算热力学领域具有最高的声誉，是由于强大的引擎、多重功能、灵活用户界面、高质量后处理、多样化实用性、广泛应用等。

所有有经验的 Thermo-Calc 用户已经长时间在研发活动中喜欢 TCC。

TCW – THERMO-CALC WINDOWS:

TCW 是 Thermo-Calc 软件的 Windows 界面，提供 Windows 下用户友好环境，是建立于完全 GUI 界面基础上。TCW 可使每个人能够通过点记进行各种热力学计算。

很少几次双击窗口保证你可靠地获得所期望的多元相平衡、相图和性质图。

TCW 的使用非常值解，不要求全面理解如何计算不均匀平衡或多元相图或性质图。后处理（产生图和将图合并图形或文字文档）容易处理，总是提供高质量的表达。

TCW 包含与 TCC 相同的大范围材料的热力学模型和数据库。TCW 中有一些高级 TCC 特性（如二元相图计算的 BIN 模块、凝固模拟的 SCHEIL 模块等）。在将来版本中将有参数优化的 PARROT 模块和 Poubaix 相图计算的 POUBAIX 模块。

利用详细的有帮助的指导，可容易地利用所有工具和特性。

TC4A – THERMO-CALC FOR ACADEMIC (TCC_DEMO):

Thermo-Calc 传统的科技版（TCC，Thermo-Calc 软件传统版本）从 1997 年起已经自由地发布到大学。TC4A 的功能与 Thermo-Calc 软件传统版本几乎相同，但合适的应用程序限于 4 组分系统（对合金此限制减少为 3 个元素）。有十个小的但免费的数据库，覆盖了一些无机材料（元素、二元合金于散元合金、二元半导体、矿物、六体、水溶液、气体等）。与 Thermo-Calc 应用编程界面不兼容。

连同公开的 TC4A 软件许可一起，TC4A 仅限于科技目的的应用（即大学教学和一些基本科学评价）。在特殊请求和签署的特殊临时序可基础上，可用于工业或研究公司，在有限的特定的时间周期内仅用预测试和购买评价。将 TC4A 用于商业目的是不合法的。

注意：由于有限的特性，不推荐在任何研究项目中使用 TC4A。只有 Thermo-Calc Classic 的完整版本才能保证高质量的热力学计算。

有所有类型的平台（PC Windows 和 PC Linux、Solaris/SGI UNIX）。通常与 Thermo-Calc Classic 开发以更新。

TC4U – THERMO-CALC FOR UNIVERSITY (TCW_DEMO):

类似于 TC4A，从 2000 起，Thermo-Calc Windows 的大学版本已经自由发布于大学用户。TC4U 的功能 Thermo-Calc Windows 几乎相同，但其适合的应用仅限于 4 元系（对于合金系限制可减小到 3 元素）。有十个小的但免费的数据库，覆盖了一些无机材料（元素、二元合金于散元合金、二元半导体、矿物、六体、水溶液、气体等）。与 Thermo-Calc 应用编程界面不兼容。

连同公开的 TC4U 软件许可一起，TC4U 仅限于科技目的的应用（即大学教学和一些基本科学评价）。在特殊请求和签署的特殊临时序可基础上，可用于工业或研究公司，在有限的特定的时间周期内仅用预测试和购买评价。将 TC4U 用于商业目的是不合法的。

注意：由于有限的特性，不推荐在任何研究项目中使用 TC4U。只有 Thermo-Calc Classic Thermo-Calc Windows 和的完整版本才能保证高质量的热力学计算。

有所有类型的平台（PC Windows 和 PC Linux、Solaris/SGI UNIX）。通常与 Thermo-Calc Windows 开发以更新。

MODELS IN THERMO-CALC:

用于均匀系的热力学模型的例子为：

- 理想置换模型
- 规则溶体模型

Ø 亚点阵（化合物能）模型
Ø Redlich-Kister 模型（用 Kohler 或 Muggianu 外推）
Ø 二亚点阵离子模型（适于液体）
Ø 缔合模型（适于液体）
Ø 准化学模型（适于液体）
Ø Kapoor_Frohberg 胞模型
Ø CVM（簇变方法）模型（适于化学有序）
Ø Flory-Huggins 模型（适于聚合物）
Ø Birch-Murnghan 模型（用于高压贡献）
Ø SUOERFLUID 模型（用于高 TP 的 C-H-O-S-N-Ar 气体混合物和流体）
Ø SIT（特定交互理论）模型（适于稀水溶液）
Ø PITZ（推广 Pitzer）形式（适于低 TP 的浓水溶液）
HKF（完整修正的 Helgeson-Kirkham-Flowers）模型（适于框范围的浓水溶液）

一些情况下，分开描述物理效应，如磁有序、静电贡献、玻璃转变等。这样特殊效应在 Thermo-Calc 软件的 GES 中称为 ADDITIONS。

MODULES OF THERMO-CALC:

有几个基本 Thermo-Calc 模块，对普通数据库返回数据与管理、热力学模型与书局处理、不均匀平衡与相/性质图计算、相/反应性质制表、图形表达、数据评价、实验数据编辑以及已本系统管理是必要的。它们是

SYS 系统使用
TDB 数据库返回
GES Gibbs 能系统
POLY 平衡与相/性质图计算
POST 后处理器 （作为 POLY 模块的子模块）
PARROT 数据评价与参数优化
ED_EXP 编辑试验 （作为 PARROT 模块的子模块）

还有几个特殊模块，是为特殊用途设计的，如易于计算相图或性质图、凝固过程模拟、稳态反应过程模拟等。这些是

BIN 二元相图计算
TERN 三元相图计算
POT 势图计算
POURBAIX Pourbaix 图与含水性质图计算
SCHEIL Scheil-Gulliver 凝固过程模拟
REACTOR 稳态反应模拟

本手册的各部分都有这些模块的详细描述。在 INFORMATIOM 命令下将起指定为 SUBJECT 也可查看这些模块的一些基本信息。

DATABASES IN THERMO-CALC:

与 Thermo-Calc 的强大计算特性同样重要的是，软件使用的数据。Thermo-Calc 使用了来自试验数据的评价过的热力学数据库。这些数据存储为数据库中的数学函数，已由研究者可通过自己的试验工作和文献研究进行了严格评价。

通常，这些 Thermo-Calc 数据库要被推广，每个覆盖一个种类的材料和应用。对于钢（包括铸铁、不锈钢、HS 和 HSLA 钢）、Al-/Ti-/Mg-/Cu 基合金、Ni 基超合金、硬材料、陶瓷、熔体、熔盐、炉渣、半/超导体、焊料、核材料、地质材料、无机化合物、水溶液、气体/流体、聚合物、有机物等现有有多个数据库。

有两个覆盖多种不同金属基合金的广泛应用数据库，为 SGTE 溶体数据库（SSOL）和 TCAB 钢数据库（TCFE2 或 TCFE3）。在请求下，可提供一些数据库的特殊子集。

目前，TCC 和 TCW 传递 10 个免费数据库。但是，有很多来自 Thermo-Calc AB 的商业数据库，其中一些是通过与皇家技术研究院的合作建立的，而一些来自与外部资源（如 SGTE、HermoTech、UES 等）。

Thermo-Calc AB 及其合作者正致力于进一步开发更多的具有新的应用的面向工业的数据库。

FUNCTIONALITY OF THERMO-CALC:

Thermo-Calc 具有广泛独特的功能下面列出了软件与界面的主要功能：

功能：

纯物质与溶体相的热力学性质；

化学反应的热力学性质；

热力学因数、驱动力；

不均匀平衡（多达 40 种成分合 1000 个物种）；

亚稳平衡、仲平衡；

所有类型溶体相的混溶裂隙；

磁贡献（居里温度、磁子数）；

静电贡献（波恩函数）、水溶解/缔合；

水溶液的传输性质；

钢/合金/矿物、气体和超临街流体的高压贡献；

特殊量：T_0、A_3 温度、绝热 T、激冷因数、∂T/∂X 等；

多元相图（多达 5 个轴变量）（二元、三元、等温、等值等）；

性质图（多达 40 个成分）；

CVD 图、薄膜形成；

气体分压、易挥发物种的化学势；

Pourbaix 图和多个其它涉及水反应系的图；

Scheil-Gulliver 凝固模拟；

CVM 计算、化学有序-无序；

玻璃转变；

钢表面氧化层形成、钢/合金细化、PRE；

热液、变质、火山、沉积、风化过程的演化；

腐蚀、回收、重熔、烧结、焚化、燃烧中物种形成

稳态反应；

基于实验的各种热力学评价；

数据序列和数据库的建立与修改。

STATE VARIABLES

热力学仅处理处于平衡的体系，即相对大量变量如温度和压力等内部函数的状态稳定。。这意味着这些变量已经定义了平衡态的值或性质，因此称作状态变量。状态变量的另一个例子使压力（记作 P）和化学势（记作 u）。热力学提供这些状态变量的大量关系，可以计算任何其它平衡态变量值。

状态变量可有两种类型，广义变量和强度变量。广义变量的值依赖于体系的大小，如体积；而强度变量的值如温度独立于体系的大小。每种状态变量有其它类型的补充变量。补充体积的变量使压力，而组元成分的补充变量是其化学势。

这里值得提到的是，组元的活度总是可以使用简单的数学关系从其化学势中获得。也可能选择活度或化学势的任何方便的参考态。计算机上热力学数据栈的优点之一是，可没有麻烦用户而内部处理大多数情况下参考态这种变化。

若将限于与环境交换压力体积功，指定值为 N+2 个状态变量可获得体系平衡状态，其中 N 是体系组

元数。

Thermo-Calc 用户指南中 3.2.5 和 8.3.3 节列出并简要描述了 Thermo-Calc 软件包中合适的基本广义变量和强度变量。

DERIVED VARIABLES:

对于一些材料体系（如涉及水溶液的不均匀反应、气体混合物、液体等），有必要利用一些附加导出变量，这些变量定义为状态变量的函数。Thermo-Calc 软件包（特别是一些高级的、易于使用的模块）预先定义了一些导出变量作为一些相的赋值符号（变量、函数和表）。用户也可定义任何导出变量，就象对其体系更喜欢的变量。

Thermo-Calc 用户指南中 8.13.3 节列出并简要描述了 Thermo-Calc 软件包中 PARROT 模块为水溶液相和气体混合物相预先定义的导出变量的一些例子。

PHASE DIAGRAMS:

相图意思是当量各或更多状态变量作为坐标轴时体系中存在相所显示的任何图，如绘制的二元或三元或更高阶体系的 T-X 图，三元系 X_1-X_2-X_3 三角等温断面或液相面等。因此，Pourbaix 图、优势区图、Kellogg 图等仅为相图的变体，将化学势或温度的倒数作为轴变量。

用 BIN 和 TERN 可分别容易地制作二元与三元相图，而用正常的 POLY 模块可获得多元相图，其中有相图的自动 mapping 程序。

PROPERTY DIAGRAMS:

性质图，意味着仅使用一个状态变量作为坐标轴的任何图，其中一个或多个导出变量或用户定义的变量/函数/表作为另一个坐标轴，换句话说，性质图是至少一个轴不是标准状态变量。

进行 POLY STEPPING 计算之后，所绘的图通常为性质图。从 POLY STEPPING 计算中，通常可不仅绘制几个相图而且可绘制体系的性质图。

TDB (DATABASE RETRIEVAL):

平衡计算（Thermo-Calc 中）或扩散模拟（DICTRA 中）使用的数据为用测量量评价的模型参数，这些参数存储在数据栈中，但是目前有必要有几个数据库，因为评价不总是一致的。

从参数之中，可以重计算评价中使用实验数据，也可能进行差之和外推。具有大的值能够使用热力学模型对此量数据进行外推。这是为什么进行了很大努力来评价是值得的原因。

为了方便，为易于数据库管理、选择和为 Thermo-Calc 计算返回所有类型热力学数据和为 DICTRA 模拟动力学（迁移率）数据而开发了 TDB 模型。

GES (GIBBS_ENERGY_SYSTEM)

Gibbs 能系统（GES）是 Thermo-Calc 软件的重要而基本模块，具有热力学模型交互处理和热化学计算的全面子程序包。可以使用具有亚点阵、物种和离子的香。模型交互地与 Thermo-Calc 和 DICTRA 中所有基本的和高级的模块相连接。

GES 模块的目标是，提供统一的一套子程序用于需要热力学数据的应用程序中。GES 模块中使用了各类物的所有类型热力学模型。然而，最依赖于模型的特性隐藏在模块内部，应用程序可使用一套标准子程序，打包在 TQ 和 TCAPI 界面或 MATLAB 软件中的 TC-Toolbox 中，来计算任何成分、温度和压力下每相的积分 Gibbs 能。

还有解析计算积分 Gibbs 能相对任何变量的一阶和二阶偏微分，是 Thermo-Calc 软件与其应用编成界面的独有特性。由于这一点，Thermo-Calc 是可解析计算所有类型相的积分 Gibbs 能一阶和二阶偏微分的唯一软件。

GES 模块也给具有用户界面应用编程的用户提供一套简单而通用的数据处理命令。通过这样用户界面，可交互输入和修改相描述、模型连接、基本热力学参数等。

象 POLY 和 PARROT 模块一样，此模块有自己的带有动态存储的工作区，不断将所有类型热力学数据和计算的性质传输到 POLY、PARROT 和 DICTRA 工作区。

GES 是欧洲热数据科学组（SGTE）定义的热化学计算标准软件界面的执行。

POLY (EQUILIBRIUM CALCULATIONS):

此软件是单独复杂不均匀平衡计算的软件包，可以计算多种不同类型平衡与相图，特别是多元相图，因此是开发新材料与工艺的重要工具。

POLY 可使用不同类型热力学数据库，因此可用于钢、合金、陶瓷、熔盐、炉渣、半/超导体、气体/流体、水溶液以及聚合物和有机物。POLY 使用 Gibbs 能系统（GES）来队每相热力学性质模型化。

必须十分小心地提供给用户以最灵活的工具。所有正常热力学状态变量，或用户定义变量与函数可用于设定条件。唯一的工具是将单个相的成分或任何其它性质设定为条件。任何条件可沿轴变化以便产生图。

图的计算过程中，所有计算的平衡与热力学量（包括所有标准状态变量、用户定义变量/函数/表/常数）的完整描述存储在 POLY 工作区域用户指定的 POLY 文件中（若在 MAP 或 STEP 命令之前使用 SAVE 命令）。在图中，整个计算完成之前任何状态变量或用户定义的变量/函数/表可选择为图轴。

与 PARROT 模块一起，POLY 也用于评价试验数据以便开发热力学数据库。命令 GOTO POLY-3 可用于到达此模块。

POST – (POST_PROCESSOR):

这是与 Thermo-Calc 和 DICTRA 相联接的非常强大而灵活的后处理器，已经开发为产生相图、性质图、扩散轮廓的各种图形表达以及很多其它类型的用户期望从 Thermo-Calc 计算或 DICTRA 模拟中得到的图。POST 模块通常使用特殊的 POLY 或 DICTRA 命令而不是访问模块（即 GOTO <module name>的正常方式来监视，但是有时使用 TAB 模块中的 TABULATE_REACTION 或 TABULATE_SUBSTANCE 命令或使用 POLY 模块中的 DEFINE_DIAGRAM 命令或通过一些高级模块（如 BINARY、TERNARY、POTENTIAL、SCHEIL 或 POURBAIX）自动接合。

利用这个独特的模块，用户可容易地定义各种图，包括图类型、轴变量、轴文本等。通常，从单个 Thermo-Calc 或 DICTRA 计算中，可产生多种图来表达计算体系的各量之间的内部关系。可选择任何状态变量或任何输入的符号作文 X/Y 轴。在 POST 模块中，也可定义所期望的变量。相可悬挂或存储在缩绘图形中。

当绘制图形时，可进一步指定各种定义高标准图的表观参数，即曲线标注选项、图题与子标题、绘图大小、轴长度、轴类型、轴 tic 类型、结线状态、自动或手工标度与缩放、在相界与相区半自动或手工加标注、图形格式、文本字体、颜色、光栅绘图等。计算结果也可在 POST 模块中制表，而没有必要进入 TAB 模块。

用户可容易地将实验数据添加到所绘图形上。可在将坐标保存在文本文件上，可编辑并用于实验文件合并到题它图形中或用于 PARROT 模块评价的*.SETUP 文件的一部分。

PARROT (ASSESSMENT)

有 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件中严格数据评价的全面模块，称作 PARROT。这是以描述各种不均匀反应系中一系列平衡态或动力学过程的量的实验观察来评价热力学与动力学模型参数的优化工具。

PARROT 模块利用了 POLY 子程序包来存储和计算平衡。GES 用于处理体系中各项的模型。从 1996 年起，不再是分开的程序，而已经转换为 Thermo-Calc 和 DICTRA 的内模块。

PARROT 模块为应用程序用户提供一系列数据编辑与参数优化的简单而通用的命令。通过这种用户界面，可交互访问与修改相描述、模型连接、基本热力学参数等。本用户指南的目标时，描述此用户界面。呼叫 EDIT_EXPERIMENTS 命令通过 PARROT 子模块 ED_EXP 可完成数据编辑任务。同 POLY 与 GES 模块一样，此模块有自己的带有动态存储的工作区，连续地将所有类型热力学/动力学数据和计算的平衡状态或动力学过程传递到 POLY、GES 和 DICTRA 工作区。

ED_EXP (EDIT_EXPERIMENT):

ED_EXP 模块实际是 PARROT 模块的子模块，是 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件编辑用于严格评价热力学与动力学模型参数的实验数据的基本而强大的工具，它总是与对 PARROT 模块的访问相连接。在评价过程中，通常要求 PARROT 与 ED_EXP 模块之间频繁来往通讯，以便进行合适选择与设置以及调整优

化实验点的最佳开始值。

ED_EXP 模块以特殊的方式使用 POLY 模块，以便每个实验数据点可作为平衡来计算。因此，多个 ED_EXP 命令与 POLY 模块相同，而其功能可略有不同。一些 POLY 命令不出现在此模块中，一些新的命令已经添加到 ED_EXP 监视其中。

运行 Thermo-Calc 或 DICTRA 过程中第一次访问 ED_EXP 模块（通过 PARROT 模块的 EDIT_EXPERIMENTS 命令）之前，已经成功正常编译了实验数据（Thermo-Calc 中的 POP 或 DICTRA 中的 DOP）。这是为什么 ED_EXP 命令可直接用于 POP 或 DOP 文件中。

类似于 Thermo-Calc 和 DICTRA 软件中使用的其它模块，ED_EXP 模块提供给应用程序用户以一套有化过程中实验数据编辑与中间平衡计算的简单与通用的命令。通过这样用户界面，可溶已指导所有类型交互编辑任务，这对良好油画是必要的。

ED_EXP 模块利用使用中的 PARROT 工作文件中 POLY 工作区部分。两个 POLY 命令 READ_WORKSPACE 与 SAVE_WORKSPACE 与 POLY 工作区部分交互作用，因此它们仅与当前 PARROT 工作文件而不是直接与特定 POLY 文件相联系。由 SAVE 命令，迅速将所有计算实验平衡点或动力学步长传递到 POLY（然后 DICTRA）工作区。在 DICTRA 中，在 ED_EXP 模块中也有一些 DICTRA 命令。

BIN_MODULE (BINARY_DIAGRAM):

这个特殊的易于使用的模块计算仅计算二元相图，要求二元系的热力学参数与关于体系的信息（如混溶裂隙等）一起存储在特定的数据库中。与 TCC、TCW 和 TC4A/TC4U 一起免费发布的 PBIN（TC 公共二元合金）数据库设计为此模块使用的例子。若用户使用 SGTE SSOL 溶题数据库，可获得包含多个二元合金的扩展 BIN 二元合金数据库。

模块计算二元合金内不同温度的相界，绘制标准 T-X 图后结束在 POST 模块。然后用户可用轴上不同状态变量绘图。计算结果与图信息自动存储在名为 BINARY.POLY3 的文件中，可读入 POLY 模块来进一步计算和绘图。

也有一个选项来对给定二元系计算和绘制 Gibbs 能曲线。

TERN_MODULE (TERNARY_DIAGRAM):

这个特殊的易于使用的模块计算仅计算二元相图。如同 BIN 模块，要求三元系的热力学参数与关于体系的信息（如混溶裂隙等）一起存储在特定的数据库中。与 TCC、TCW 和 TC4A/TC4U 一起免费发布的 PTER（TC 公共三元合金）数据库设计为此模块使用的例子。

模块计算二元合金内不同温度的相界，绘制标准三角等温断面、Gibbs 能曲线或相分数曲线后结束在 POST 模块。然后用户可用轴上不同状态变量绘图。计算结果与图信息自动存储在名为 ISOTERN.POLY3、MONOVAR.POLY3 或 PFCURVE.POLY3 的文件中，可读入 POLY 模块来进一步计算和绘图。

POT_MODULE (POTTENTIAL_DIAGRAM):

这个特定并易于使用模块允许用户简单地计算并绘制给定温度的以两种气体物种作轴的三元系图（如 Fe-O-S）。用户指定基体元素、两个气体物种和温度。

包含化学计量比固体、固溶体和气体的数据库可与此模块相连接。作为简单离子设计了与 TCC、TCW 和 TC4A/TC4U 一起免费发布的 PSUB（TC 公共物质）数据库。若用户有 SSUB 数据则可获得称为 POT（势数据库）的 SGTE SSUB 物质数据库的子集。

计算不利用通常为化学计量比的相，而可使用溶体相。模型计算由指定温度的特定气体物种（如 Fe-O-S 系的 O_2 和 SO_2）的势支配的三元系中的相界，在绘制 PA-PB 图之后终止于 POST 模块。用户和进一步使用不同图轴。计算结果与图信息自动存储在名为 POT.POLY3 的文件中，可在 POLY 与 POST 模块中进一步处理。

POURBAIX_MODULE (POURBAIX_DIAGRAM):

……

TAB_MODULE (TABULATION):

CHEMICAL EQUATION

SCHEIL_MODULE (SCHEIL_SIMULATION)

REACTOR (REACTOR_SIMULATION)

FOP (FUNCTON_OPT_PLOT)

473

USER INTERFACE OF THERMO-CALC:

GUI (GRAPHICAL USER INTERFACE):

APPLICATIONS OF THERMO-CALC:

THERMO-CALC ENGINE

第 15 部分 数据绘图语言（DATAPLOT）

p476