Программа PhDi_ru_training

Руководство пользователя

Лаборатория химической термодинамики
МГУ имени М.В.Ломоносова

Авторы программы:
Д.х.н., проф. Г.Ф. Воронин
Д.т.н., в.н.с. Г.В. Белов

Назначение основных управляющих кнопок

+ -	**Ввод новой системы (+), исключение имеющейся или вновь введенной системы (-)**
Расчет (F9)	**Запуск программы расчета фазовой диаграммы**
Выбрать модель	**Выбор модели жидкой фазы (Маргулеса, Вильсона, NRTL, UNIQUAC)**
Особые точки	**Просмотр координат особых точек рассчитанной фазовой диаграммы**
Матрица	**Представление результатов расчета в виде таблицы, каждая ячейка которой соответствует фазовому состоянию системы при *T,x* = const**
Ред. график	**Редактирование графика (изменение осей, формата представления экспериментальных данных, фона рисунка и т.д.)**
Эксп. точки	**Нанесение на рассчитанную фазовую диаграмму экспериментальных данных**
Копировать	**Копирование рассчитанной диаграммы; для вставки рисунка в файл формата *.doc используйте опцию «Вставить» или «shift insert»**
Закрыть	**Завершение работы программы.** **В демо-версии созданные файлы не сохраняются!**

Рабочие окна программы

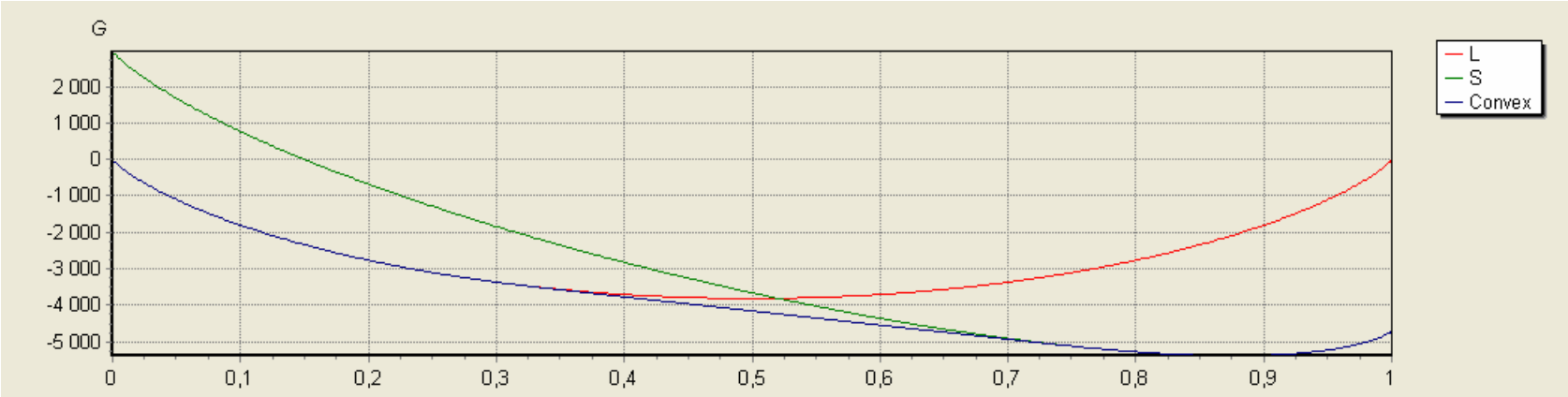
Основное рабочее окно.

Выражения для энергии Гиббса всех фаз системы вводятся в символьно-аналитическом виде; строки с комментариями следует начинать с символа %

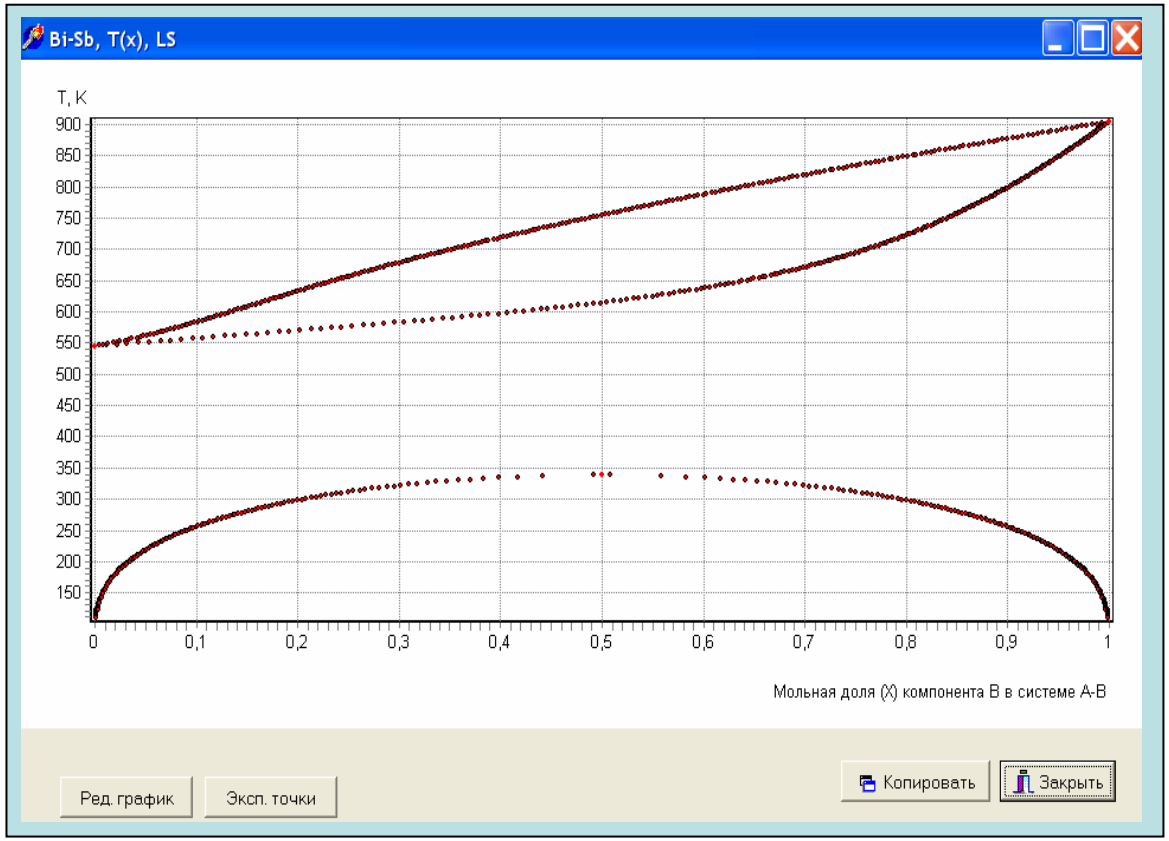
Выражения для расчета энергии Гиббса

```
% Пример реальной системы для ознакомления с возможностями программы
%_____________________________________________________________________

%    T(X) ДИАГРАММА  СИСТЕМЫ  Bi-Sb
%=========================================================================
% liquid (l) and solid (s) solutions.
% Данные из: М.А.Быков,Г.Ф.Воронин,Н.М.Мухамеджанова.
% Сб."Прямые и обратные задачи химической термодинамики",
% Новосибирск,Наука,1987,С.30.
% T=температура;X= мольная доля Sb;Sid=-R*(X*ln(X)+(1-X)*ln(1-X))

Gl = (2228-2.3*T)*X*(1-X)-T*Sid
Gs = (6500-2.6*T)*X*(1-X)-T*Sid-R*(2.458*(1-X)*(544.6-T)+2.645*X*(903.7-T))
```

Графики изотермических концентрационных зависимостей энергии Гиббса фаз системы и их огибающей (convex) в режиме реального времени счета строятся в верхнем окне



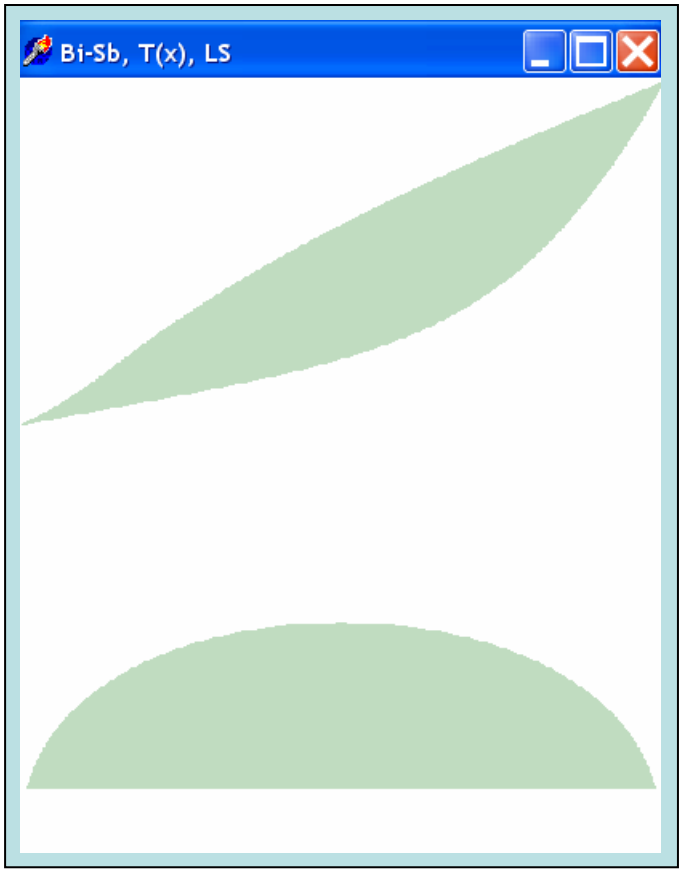
Окно с результатами расчета фазовой диаграммы появляется после завершения расчета, если активизирована опция ☑ Рабочая диаграмма



Демонстрация

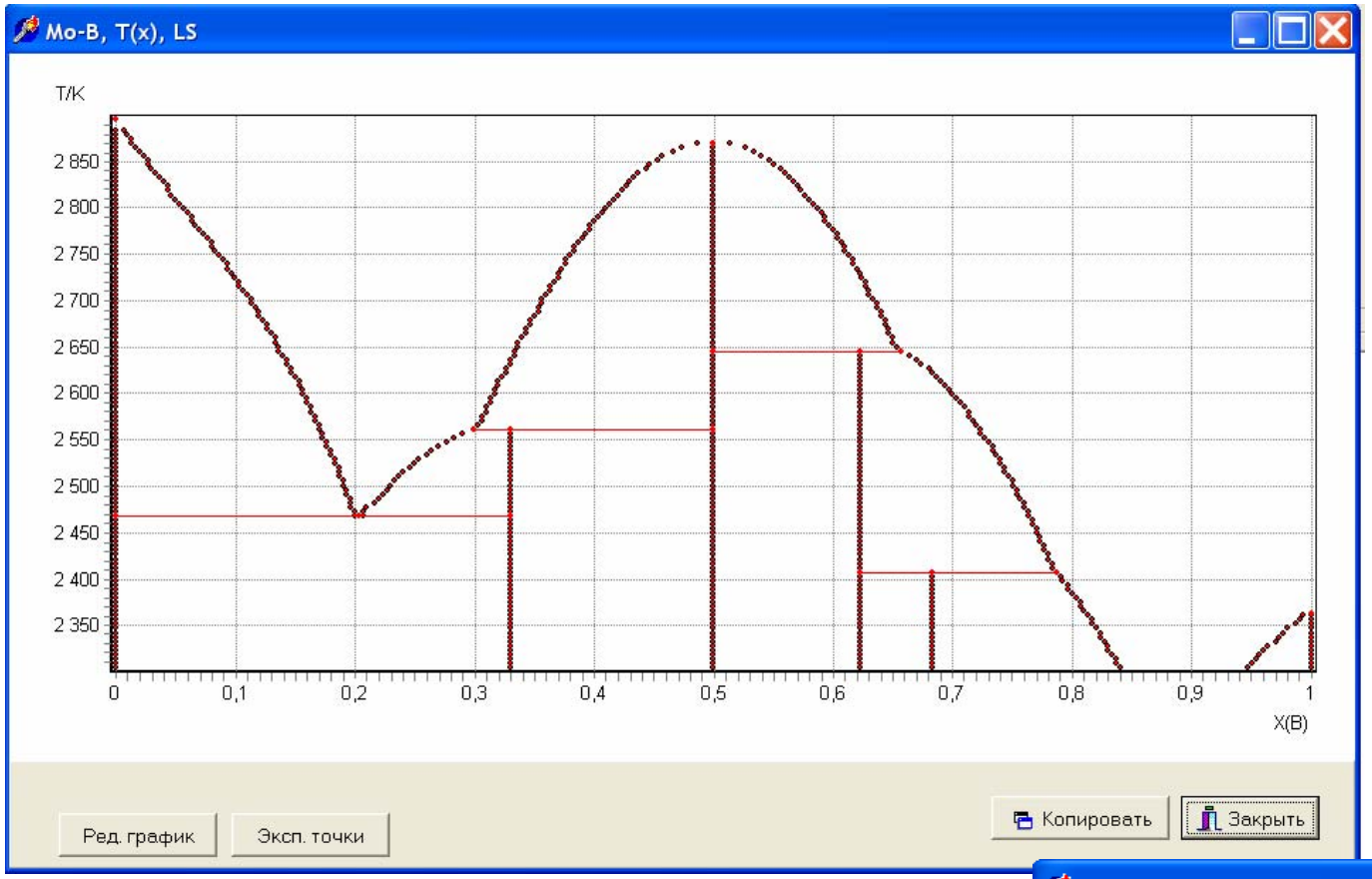
☑ Мозаичная диаграмма

☑ Рабочая диаграмма



Окно с промежуточными результатами расчета активировано в процессе построения диаграммы, если включена опция

☑ Мозаичная диаграмма



Для вывода на экран координат особых точек (фазовых переходов, эвтектик, перитектик, дистектик, коннод и т.п.) после завершения расчета фазовой диаграммы системы следует активировать кнопку Особые точки

Special points coordinates

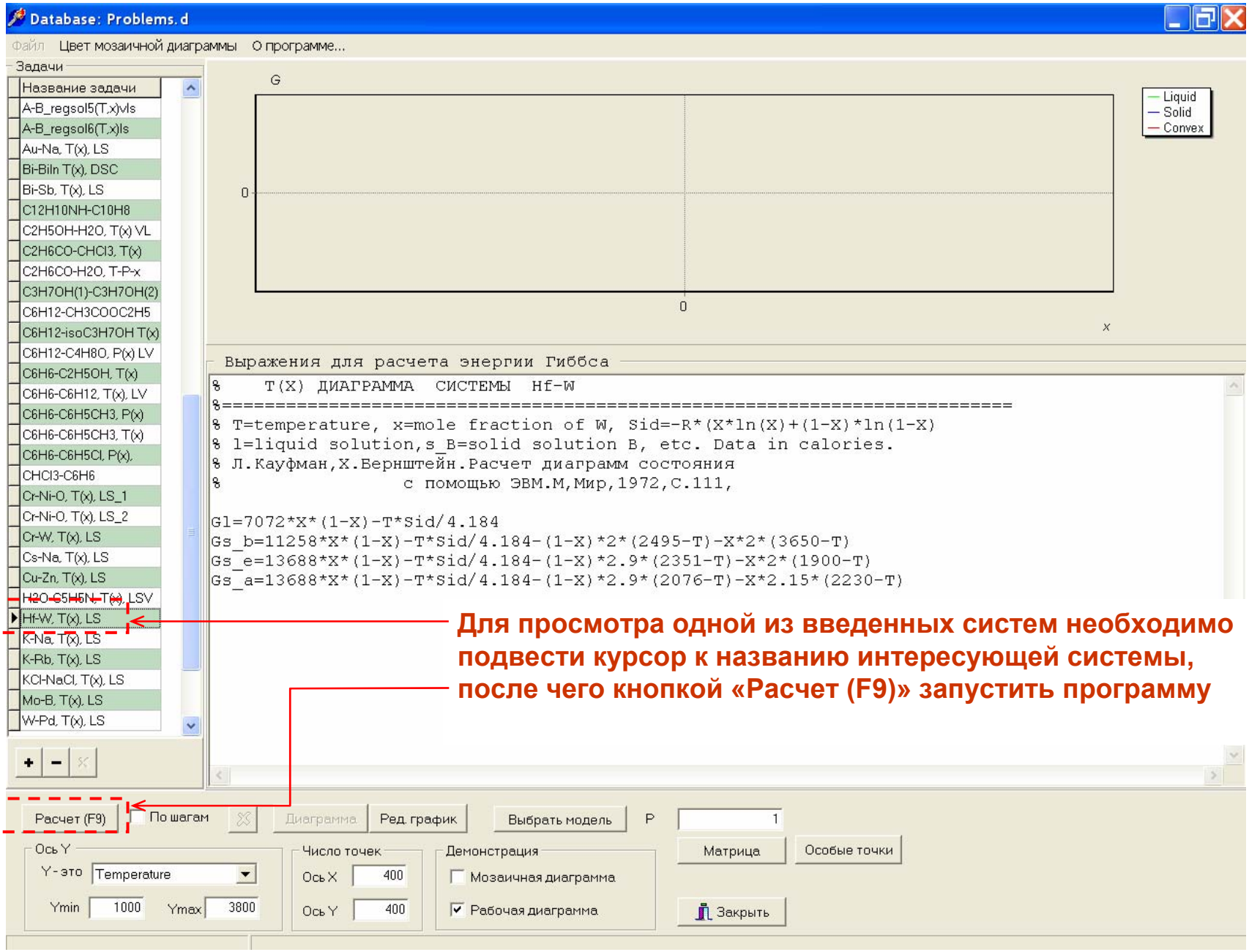
Ноды

T	X(лев.)	X	X(прав.)
2645,333	0,5	0,623	0,657
2561,333	0,3	0,33	0,5
2468	0	0,203	0,33
2407,333	0,623	0,683	0,787
2197,333	0,683	0,88	1
2076	0,683	0,792	1
1796	0,5	0,623	0,683

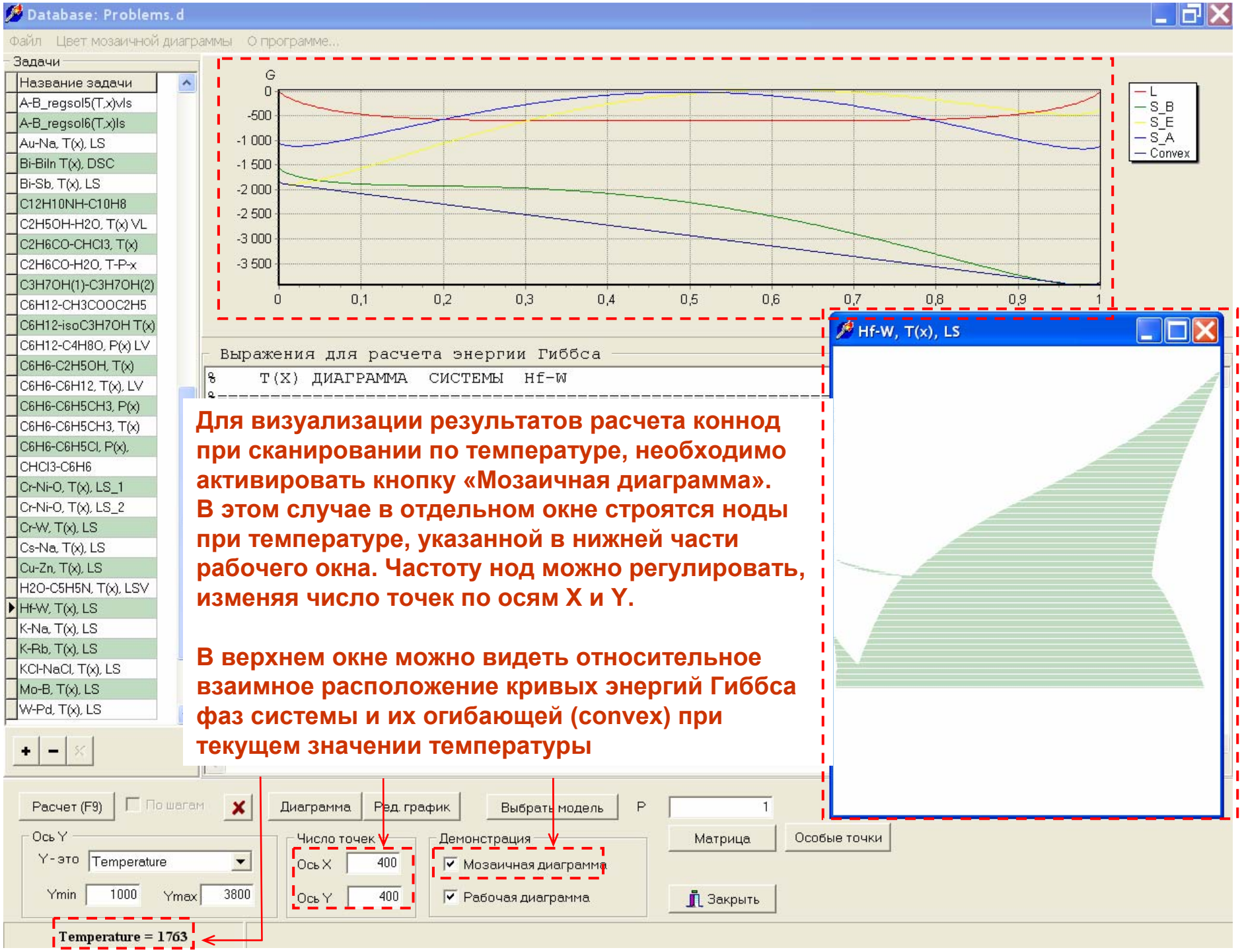
Прочие особые точки

T(X = 0) = 2895
T(X = 0,5) = 2869,333333
T(X = 1) = 2363

Работа с системами, имеющимися в базе данных



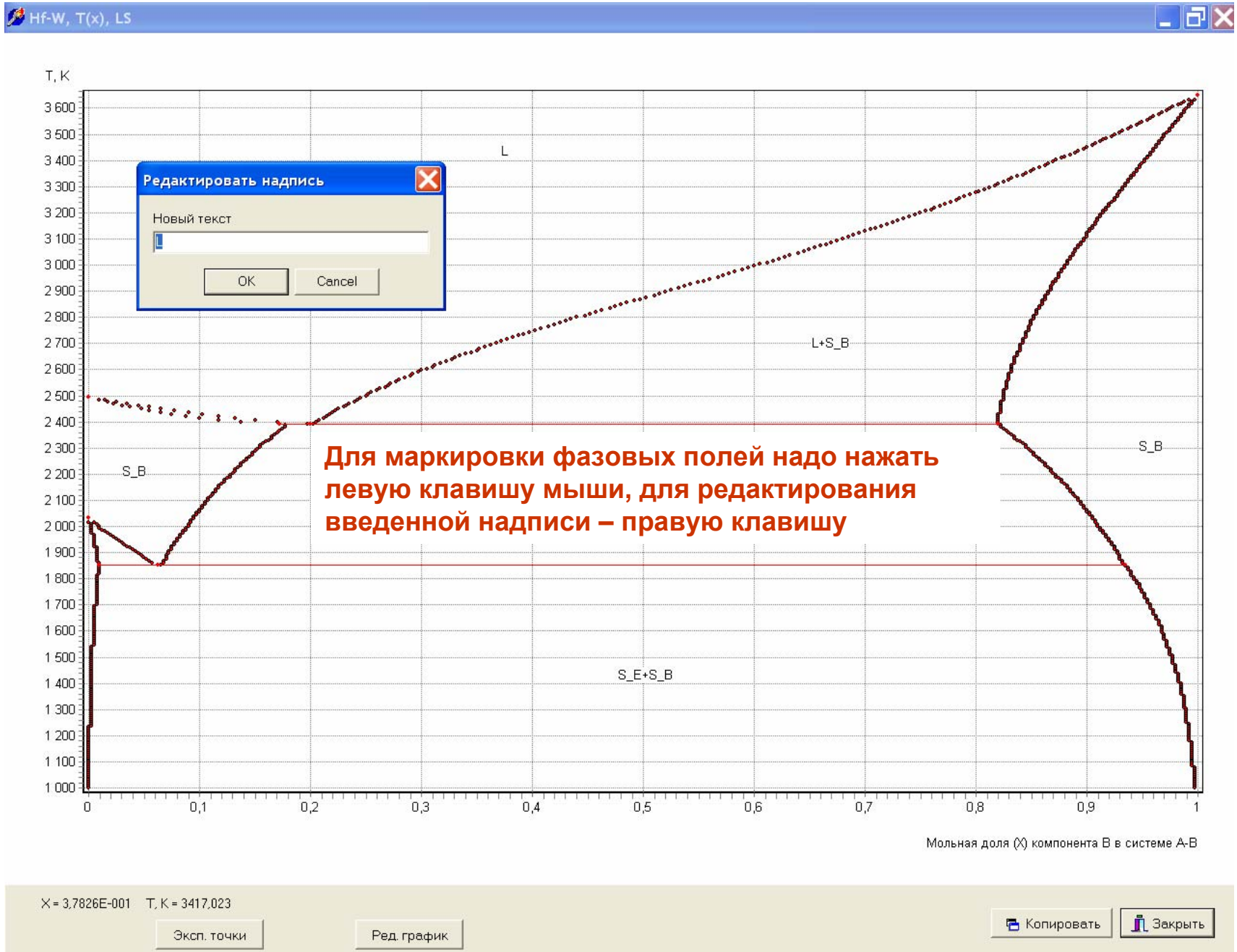
Для просмотра одной из введенных систем необходимо подвести курсор к названию интересующей системы, после чего кнопкой «Расчет (F9)» запустить программу



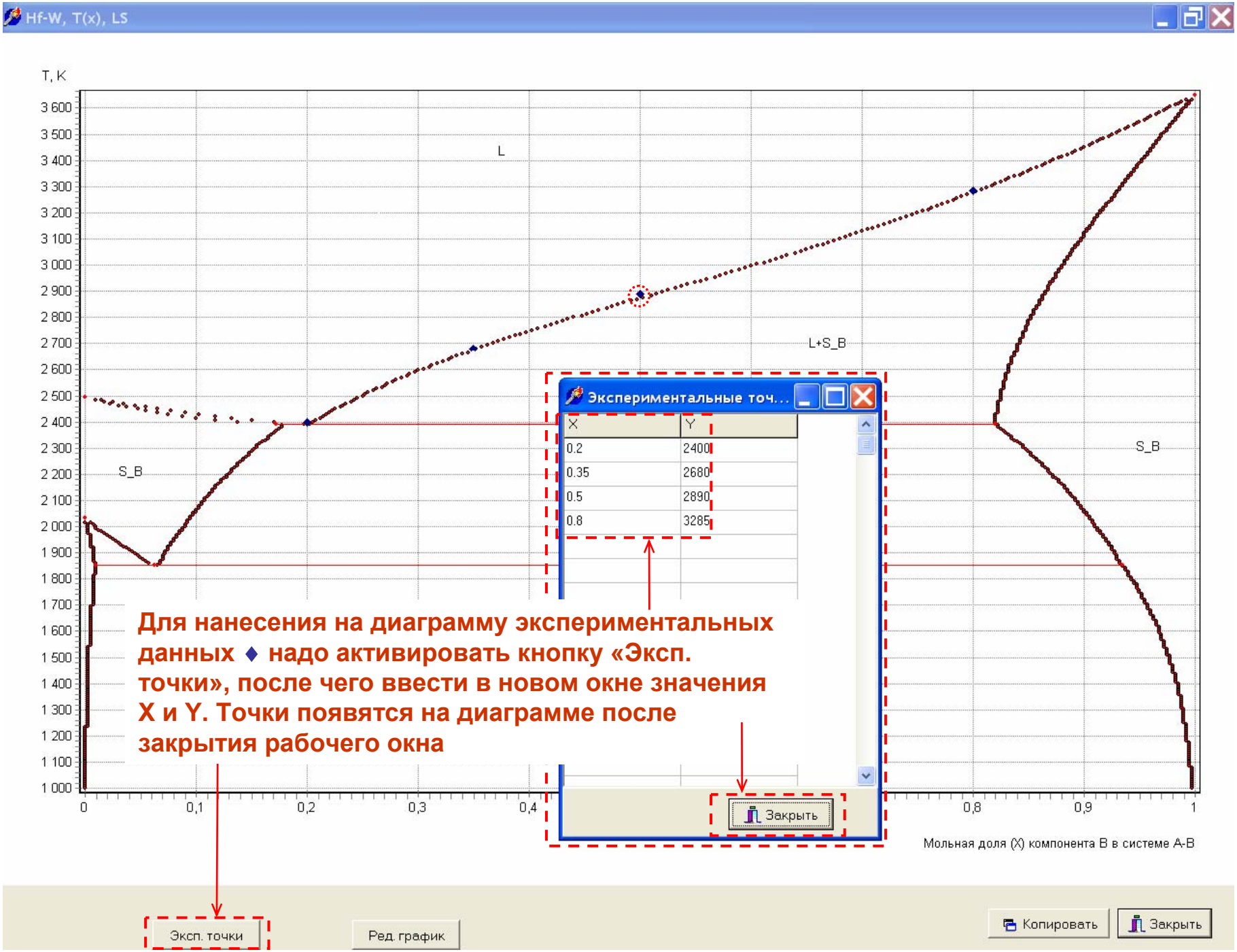
Для визуализации результатов расчета коннод при сканировании по температуре, необходимо активировать кнопку «Мозаичная диаграмма». В этом случае в отдельном окне строятся ноды при температуре, указанной в нижней части рабочего окна. Частоту нод можно регулировать, изменяя число точек по осям X и Y.

В верхнем окне можно видеть относительное взаимное расположение кривых энергий Гиббса фаз системы и их огибающей (convex) при текущем значении температуры

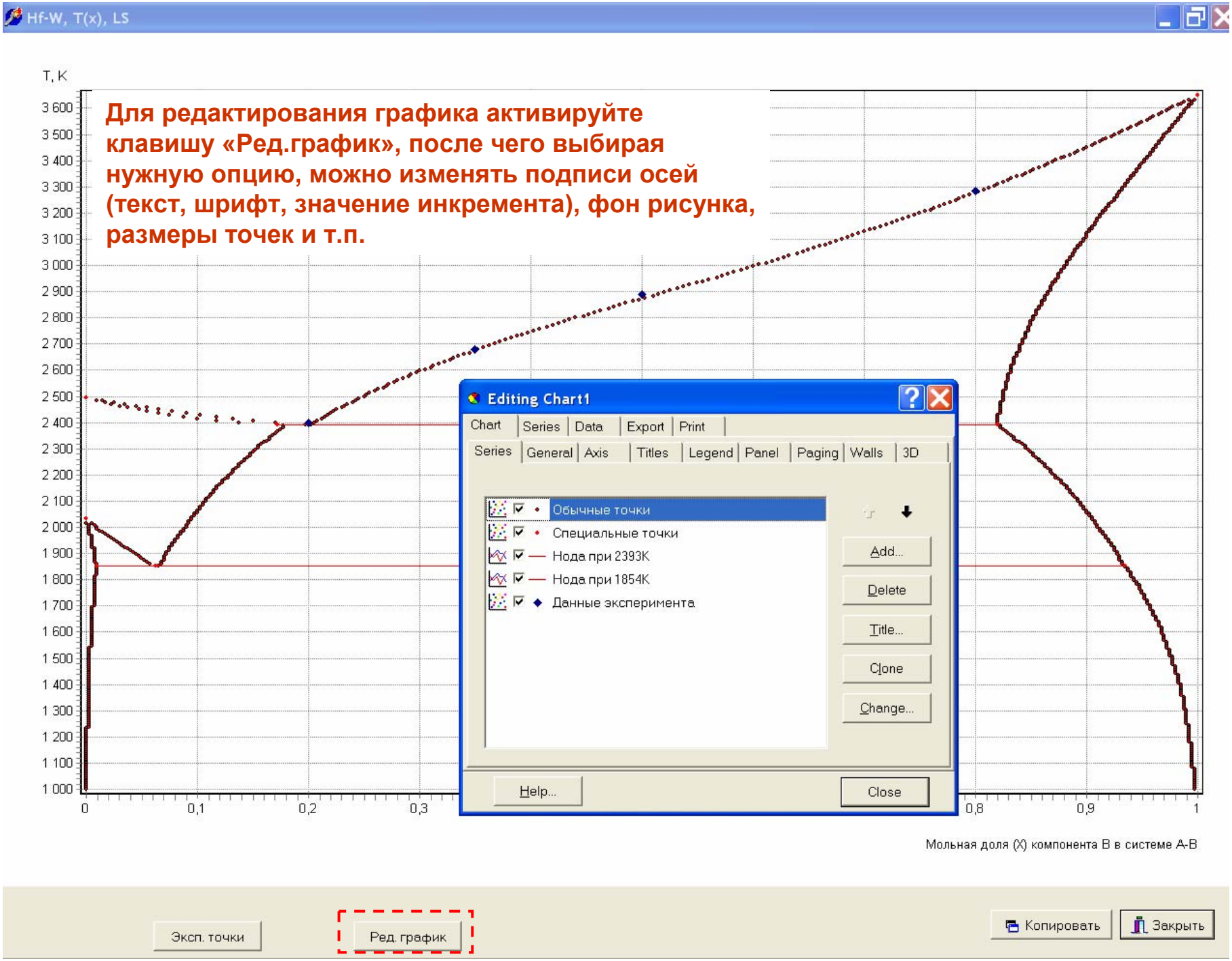
Работа с рассчитанной фазовой диаграммой



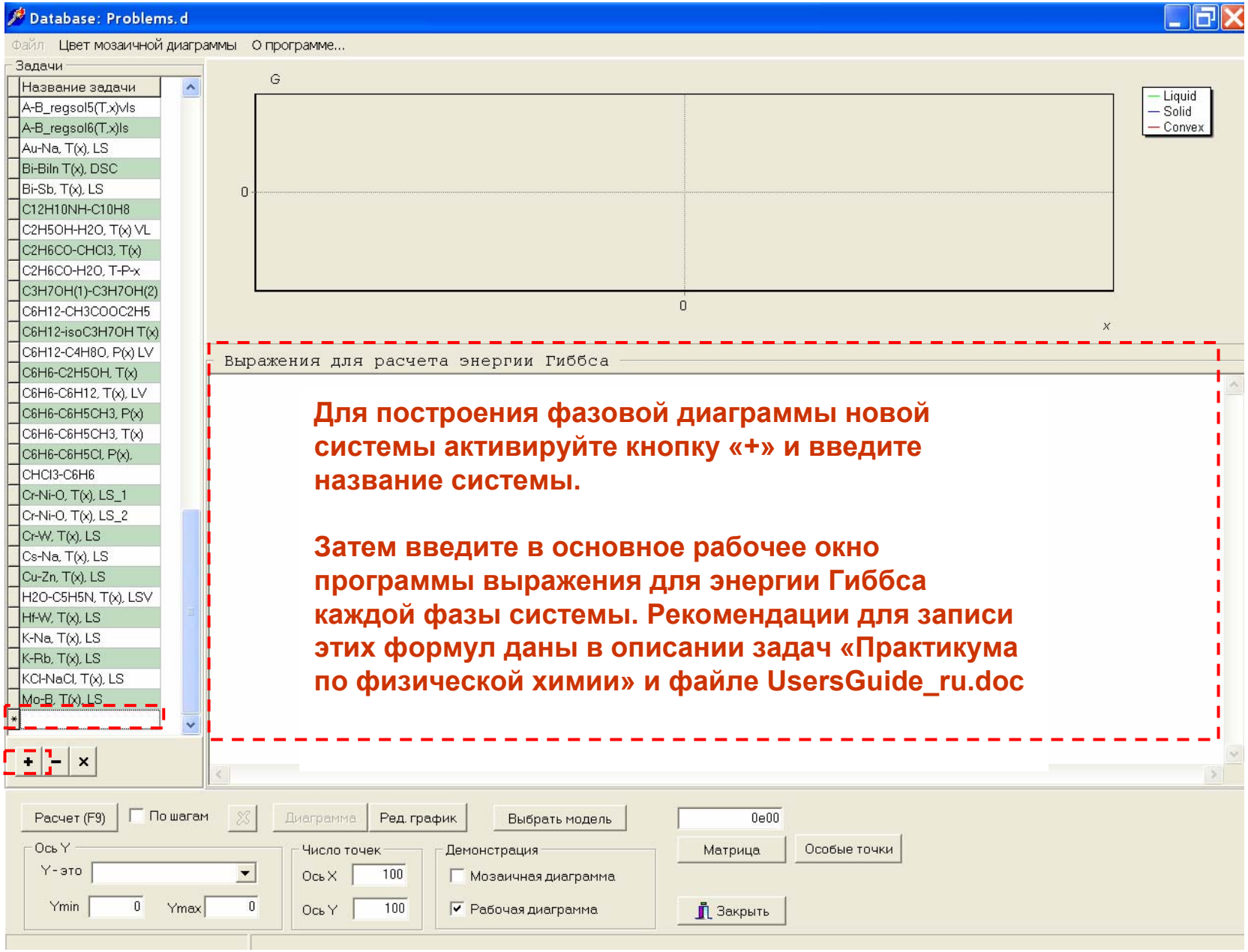
Для маркировки фазовых полей надо нажать левую клавишу мыши, для редактирования введенной надписи – правую клавишу



Для нанесения на диаграмму экспериментальных данных ♦ надо активировать кнопку «Эксп. точки», после чего ввести в новом окне значения X и Y. Точки появятся на диаграмме после закрытия рабочего окна

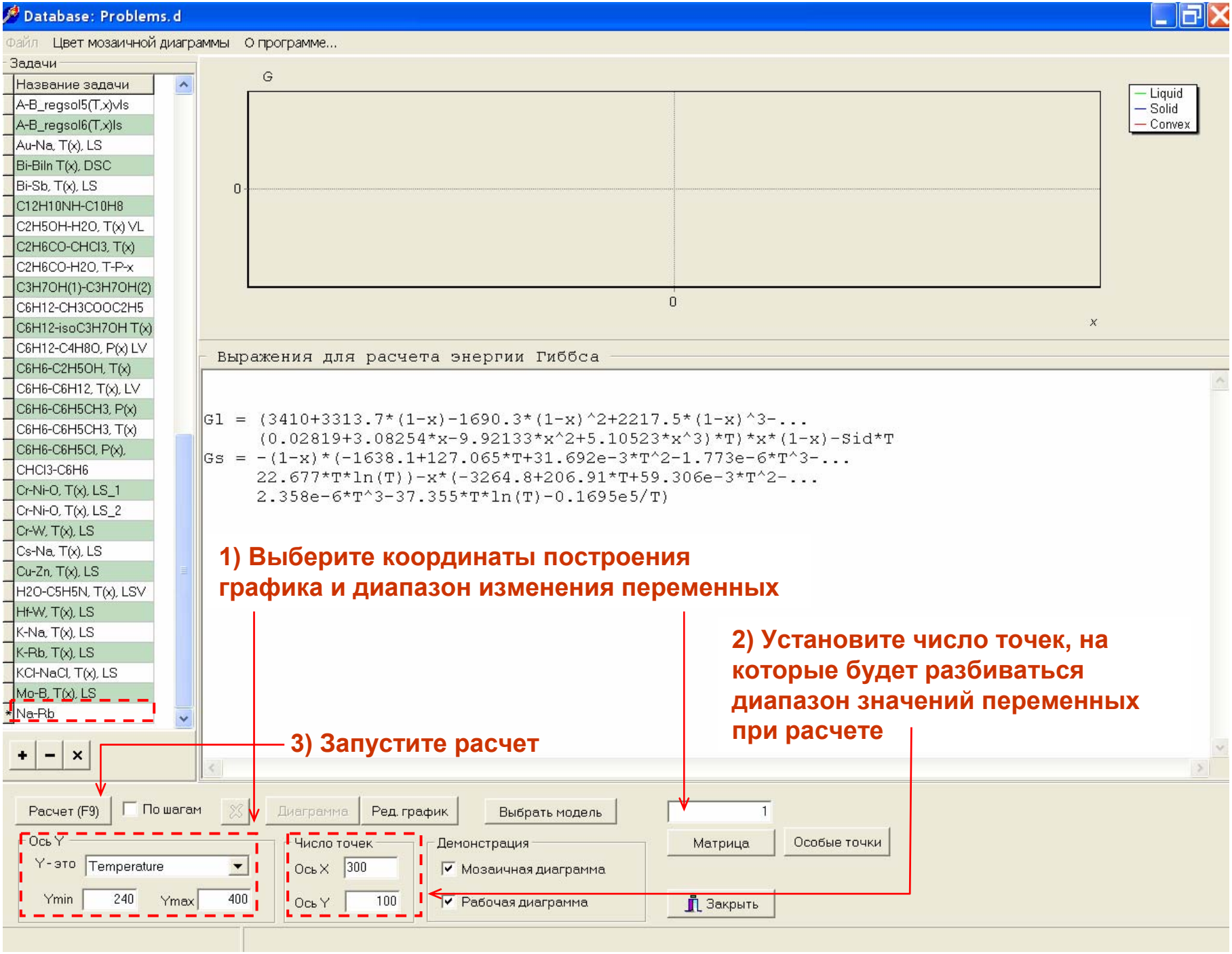

Hf-W, T(x), LS
T, K
Для редактирования графика активируйте клавишу «Ред.график», после чего выбирая нужную опцию, можно изменять подписи осей (текст, шрифт, значение инкремента), фон рисунка, размеры точек и т.п.
Editing Chart1
Chart
Series
Data
Export
Print
Series
General
Axis
Titles
Legend
Panel
Paging
Walls
3D
Обычные точки
Специальные точки
Нода при 2393K
Нода при 1854K
Данные эксперимента
Add...
Delete
Title...
Clone
Change...
Help...
Close
Мольная доля (X) компонента B в системе A-B
Эксп. точки
Ред. график
Копировать
Закрыть

Ввод новых данных
(на примере системы Na-Rb)

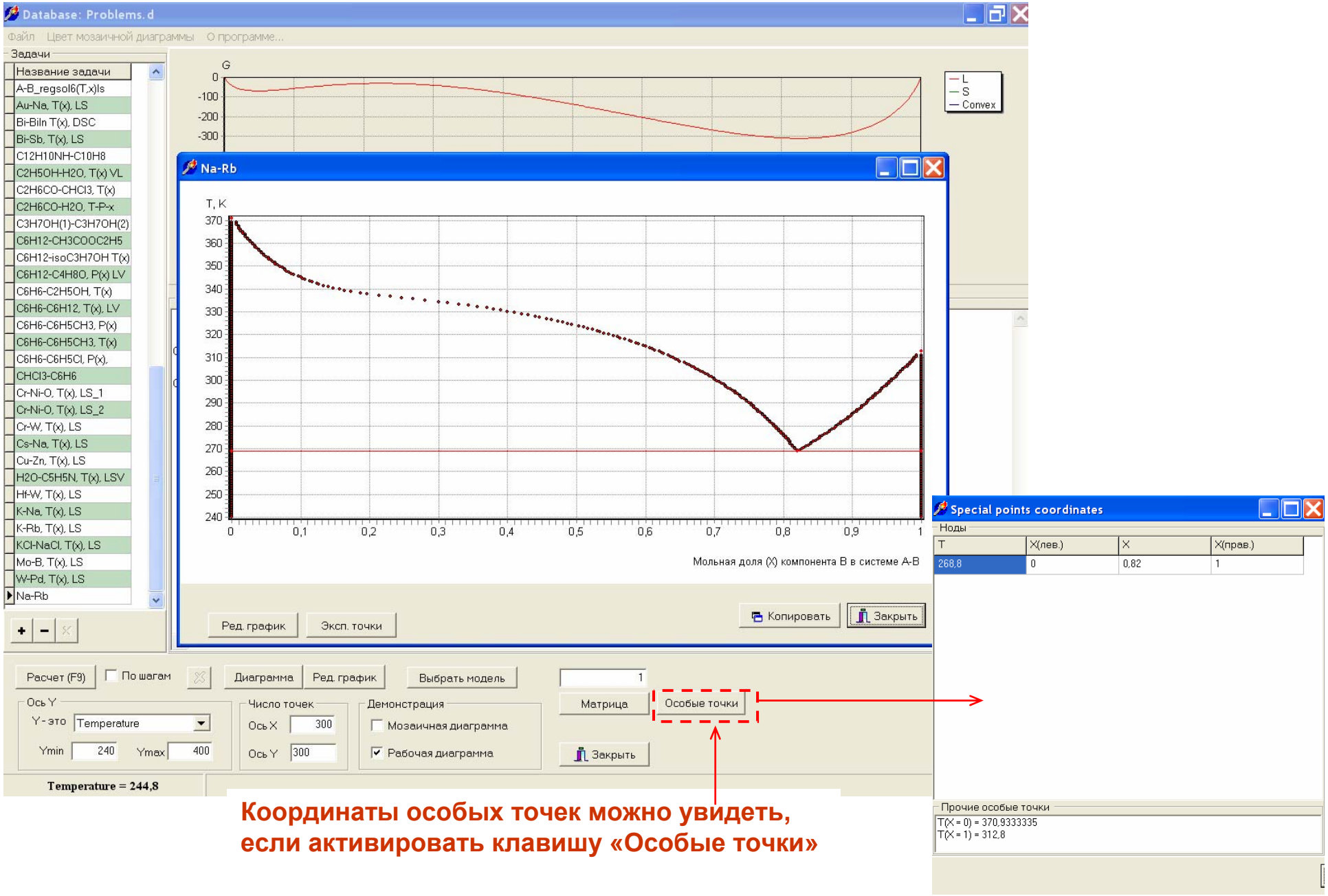


Для построения фазовой диаграммы новой системы активируйте кнопку «+» и введите название системы.

Затем введите в основное рабочее окно программы выражения для энергии Гиббса каждой фазы системы. Рекомендации для записи этих формул даны в описании задач «Практикума по физической химии» и файле UsersGuide_ru.doc

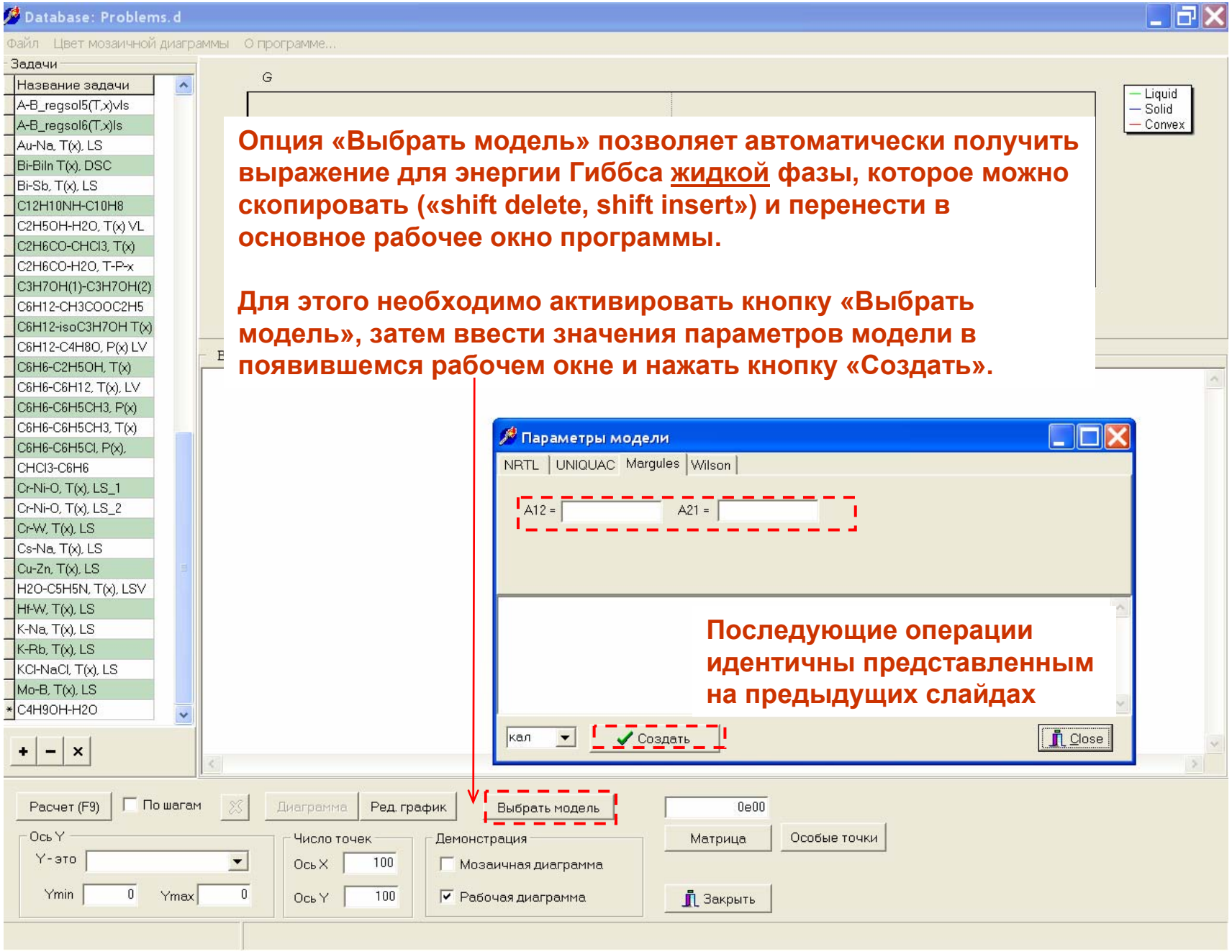

Database: Problems.d
Файл
Цвет мозаичной диаграммы
О программе...
Задачи
Название задачи
A-B_regsol5(T,x)vls
A-B_regsol6(T,x)ls
Au-Na, T(x), LS
Bi-Biln T(x), DSC
Bi-Sb, T(x), LS
C12H10NH-C10H8
C2H5OH-H2O, T(x) VL
C2H6CO-CHCl3, T(x)
C2H6CO-H2O, T-P-x
C3H7OH(1)-C3H7OH(2)
C6H12-CH3COOC2H5
C6H12-isoC3H7OH T(x)
C6H12-C4H8O, P(x) LV
C6H6-C2H5OH, T(x)
C6H6-C6H12, T(x), LV
C6H6-C6H5CH3, P(x)
C6H6-C6H5CH3, T(x)
C6H6-C6H5Cl, P(x),
CHCl3-C6H6
Cr-Ni-O, T(x), LS_1
Cr-Ni-O, T(x), LS_2
Cr-W, T(x), LS
Cs-Na, T(x), LS
Cu-Zn, T(x), LS
H2O-C5H5N, T(x), LSV
Hf-W, T(x), LS
K-Na, T(x), LS
K-Rb, T(x), LS
KCl-NaCl, T(x), LS
Mo-B, T(x), LS
* Na-Rb
G
0
0
x
Liquid
Solid
Convex
Выражения для расчета энергии Гиббса
Gl = (3410+3313.7*(1-x)-1690.3*(1-x)^2+2217.5*(1-x)^3-...
(0.02819+3.08254*x-9.92133*x^2+5.10523*x^3)*T)*x*(1-x)-Sid*T
Gs = -(1-x)*(-1638.1+127.065*T+31.692e-3*T^2-1.773e-6*T^3-...
22.677*T*ln(T))-x*(-3264.8+206.91*T+59.306e-3*T^2-...
2.358e-6*T^3-37.355*T*ln(T)-0.1695e5/T)
1) Выберите координаты построения графика и диапазон изменения переменных
2) Установите число точек, на которые будет разбиваться диапазон значений переменных при расчете
3) Запустите расчет
Расчет (F9)
По шагам
Диаграмма
Ред. график
Выбрать модель
1
Матрица
Особые точки
Ось Y
Y - это
Temperature
Ymin
240
Ymax
400
Число точек
Ось X
300
Ось Y
100
Демонстрация
Мозаичная диаграмма
Рабочая диаграмма
Закрыть

Результаты расчета фазовой диаграммы системы Na-Rb



Координаты особых точек можно увидеть, если активировать клавишу «Особые точки»

Расчеты с использованием моделей Маргулеса, NRTL, UNIQUAC



Опция «Выбрать модель» позволяет автоматически получить выражение для энергии Гиббса <u>жидкой</u> фазы, которое можно скопировать («shift delete, shift insert») и перенести в основное рабочее окно программы.

Для этого необходимо активировать кнопку «Выбрать модель», затем ввести значения параметров модели в появившемся рабочем окне и нажать кнопку «Создать».

Последующие операции идентичны представленным на предыдущих слайдах

Будем признательны за вопросы, замечания, комментарии
по работе программы, руководству пользователя
и текстам задач расчетного практикума

Ваши пожелания присылайте по адресу
ira@td.chem.msu.ru