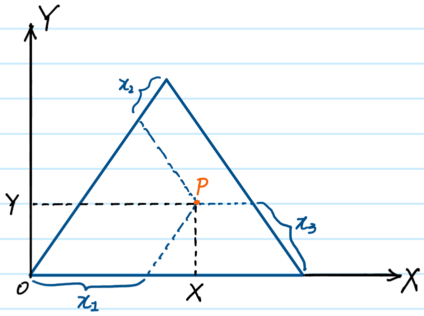
等温三元相图的坐标

2022年3月13日 星期日 下午1:31

- 三组份混合物的组份坐标常画在二维平面上的三角形区域。这种坐标体系是重心坐标(barycentric coordinate system)的一种。三元相图中，三个组份的质量、摩尔或体积分数之和为1因此，关于组成的函数 $f(x_1, x_2, x_3)$ 其实是二元函数 $F(x_1,x_2) \equiv f(x_1, x_2, 1-x_1-x_2)$

- 设等边三角形在直角坐标系中如下图放置，某组成表示为三角形区域内一点P，它代表的组成为(x_1, x_2, x_3)，在直角坐标系中的坐标是(X,Y)。根据几何关系可得，



$$\begin{cases} X = \frac{1}{2}(1+x_1-x_2) \\ Y = \frac{\sqrt{3}}{2}(1-x_1-x_2) \end{cases},$$

$0 \leq x_1 \leq 1,\ 0 \leq x_2 \leq 1,$

$$\begin{cases} x_1 = X - \frac{\sqrt{3}}{3}Y \\ x_2 = 1 - X - \frac{\sqrt{3}}{3}Y \end{cases},$$

$\frac{\sqrt{3}}{3}Y \leq X \leq 1-\frac{\sqrt{3}}{3}Y,\ 0 \leq Y \leq \frac{\sqrt{3}}{2}$

- 在三元坐标系中的两点、$P(x_{1p}, x_{2p}, x_{3p})$，$Q(x_{1q}, x_{2q}, x_{3q})$ 所确定的直线在直角坐标系下的方程

由 $X_p = \frac{1}{2}(1+x_{1p}-x_{2p})$，$X_q = \frac{1}{2}(1+x_{1q}-x_{2q})$

$Y_p = \frac{\sqrt{3}}{2}(1-x_{1p}-x_{2p})$ $\quad Y_q = \frac{\sqrt{3}}{2}(1-x_{1q}-x_{2q})$

"两点式"：$Y = \frac{Y_p-Y_q}{X_p-X_q}(X-X_q)+Y_q$

代入上面的关系式：

$$\frac{\sqrt{3}}{2}(1-x_1-x_2) = \sqrt{3}\,\frac{x_{1q}-x_{1p}+x_{2q}-x_{2p}}{x_{1p}-x_{1q}+x_{2q}-x_{2p}} \cdot \frac{1}{2}(x_1-x_{1q}+x_{2q}-x_2) + \frac{\sqrt{3}}{2}(1-x_{1q}-x_{2q})$$

$$\Rightarrow x_2 = \frac{x_{2p}-x_{2q}}{x_{1p}-x_{1q}}x_1 + \frac{x_{1p}x_{2q}-x_{1q}x_{2p}}{x_{1p}-x_{1q}}$$

- 直线上有意义的点不能超出等边三角形区域