

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ БАЗЫ
ДААННЫХ И ПРОГРАММНЫЕ
КОМПЛЕКСЫ ДЛЯ
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ

Базы данных и банки данных

- **База данных** — структурированный организованный набор данных, описывающих характеристики каких-либо физических или виртуальных систем.
- **База данных** – упорядоченная совокупность данных, предназначенных для хранения, накопления и обработки с помощью ЭВМ
- «Базой данных» часто упрощённо или ошибочно называют Системы Управления Базами Данных ([СУБД](#)). Нужно различать набор данных (собственно БД) и [программное обеспечение](#), предназначенное для организации и ведения базы данных ([СУБД](#)).
- A Computer Database is a structured collection of records or data that is stored in a computer system.
- **БАНК ДАННЫХ** — совокупность одной или нескольких [баз данных](#) со средствами управления данными. ГОСТ 7.73—96 определяет банк данных как автоматизированную информационно-поисковую систему, состоящую из одной или нескольких баз данных и системы хранения, обработки и поиска информации в них.

Моделирование

- **Модель** – это объект-заместитель объекта оригинала, обеспечивающий изучение некоторых свойств оригинала.
- **Модель** – любой оператор A , позволяющий по соответствующим значениям входных параметров X устанавливать выходные значения параметров Y объекта моделирования:

$$A: X \rightarrow Y, X \in \Omega_X, Y \in \Omega_Y$$

Ω_X, Ω_Y - множества допустимых значений входных и выходных параметров.

- **Математическое моделирование** – замена исходного объекта его «образом» (математической моделью) и изучение модели с помощью реализуемых на компьютере вычислительно-логических алгоритмах.

Термодинамическое моделирование

Термодинамическое моделирование является разновидностью математического моделирования, имеющее, однако, свои особенности. Компонентами модели являются:

- совокупность допущений о физико-химическом характере системы (степень достижение равновесия, перечень молекулярных форм, присутствующих в равновесной системе, возможность образования растворов и т.д.);
- условия равновесия (сведения об элементном составе и термодинамических параметрах, которые характеризуют равновесное состояние);
- информация о термодинамических свойствах веществ, которые образуют равновесную систему;
- физико-химические модели фаз системы (уравнения состояния фаз или функциональные зависимости характеристических функций фаз от состава и термодинамических параметров системы).

Требования к справочным данным о термодинамических свойствах веществ:

- рекомендуемые данные должны быть получены в результате критического анализа всех опубликованных данных с использованием адекватных методов обработки первичной информации и вычисления термодинамических свойств;
- рекомендуемые значения термодинамических свойств должны образовывать систему взаимосогласованных величин;
- рекомендуемые данные должны быть получены с использованием наиболее современной информации о фундаментальных константах, ключевых термодинамических величинах и атомных массах;
- для каждой рекомендуемой величины должна приводиться оценка ее надежности;
- информация о способах получения рекомендуемых величин и их погрешностей должна быть доступной;
- необходимо указывать источники первичной информации, которые были использованы при получении рекомендуемых данных;
- рекомендуемые данные следует приводить для широкого, логически обоснованного набора веществ.

Научные центры, занимающиеся созданием баз данных и средствами термодинамического моделирования

- Термоцентр им. В.П. Глушко
- NIST <http://www.nist.gov>
- NASA
- CRCT www.crct.polymtl.ca/fact/fact.htm
- MALT Group www.kagaku.com/malt
- Thermo-Calc software www.thermocalc.com
- NPL www.npl.co.uk/mtdata/
- CompuTherm LLC www.computherm.com
- THERMODATA thermodata.online.fr

Термоцентр им. В.П. Глушко

Отдел химической термодинамики был образован в 1966 г. в составе Института высоких температур АН СССР, а в 1995 г. был переведен в нынешний Институт теплофизики экстремальных состояний Объединенного института высоких температур РАН. Фактически история Отдела восходит к началу 50-х гг. прошлого века. В это время группа молодых сотрудников Института горючих ископаемых АН СССР приступила к осуществлению программы, предложенной малоизвестным тогда инженером-конструктором ракетной техники [В.П.Глушко](#). Эта программа была направлена на теоретическое и экспериментальное исследование термодинамических свойств компонентов продуктов сгорания жидких ракетных топлив. Среди тех, кто начинал эту работу, были те, которые впоследствии составили ядро Отдела химической термодинамики. Много лет отдел химической термодинамики возглавлял Л.В. Гурвич.

Информационно-справочная система «Термические Константы Веществ»

<http://www.chem.msu.su/rus/tkv/welcome.html>

Электронная версия справочника "Термические константы веществ" разработана на базе хорошо известного справочного издания (Термические константы веществ: Вып. 1-10 / Отв. ред. В.П. Глушко.- М.: ВИНТИ, 1965-1982.; Thermal Constants of Substances: Vol. 1-8 / Ed. V.S. Yungman. – NY: Wiley, 1999), которое было создано под научным руководством академика В.П.Глушко. Подготовка этого издания проводилась группой из более чем восьмидесяти экспертов в области химической термодинамики. Работа продолжалась около двадцати лет и привела к публикации в 1965-1982 годах справочного здания, включающего 10 томов, содержащих сведения о 26976 веществ, образованных практически всеми химическими элементами. Библиография включает больше 51500 ссылок

Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Т.5

<http://www.chem.msu.su/rus/tsiv/>

История справочного издания "Термодинамические свойства индивидуальных веществ" ("ТСИВ") насчитывает более пяти десятков лет. Работа над этим изданием началась в середине прошлого века в связи потребностями бурно развивающейся ракетной техники. В последующие годы работа над справочником вышла далеко за рамки этих первоначальных задач, поскольку различные направления развития науки и техники требовали данных о свойствах разнообразных веществ. Последнее 3-е издание "ТСИВ" на русском языке было опубликовано в 1979 – 1982 гг. в четырех томах. Планируемый том V этого издания так и не был опубликован. Материалы этого тома готовились в период 1985 – 2004 гг. на русском и английском языках. В настоящее время эти материалы являются основой предлагаемого электронного издания.

ИВТАНТЕРМО

Информационно-справочная система ИВТАНТЕРМО содержит численные данные о термодинамических свойствах индивидуальных веществ в широком диапазоне температур (для газов - до 6000 К, 10000 К или 20000 К). Все данные являются взаимосогласованными в рамках основных законов термодинамики. Приведены сведения о погрешностях всех рекомендуемых величин. В настоящее время база данных содержит сведения о свойствах около 3200 веществ, образованных из 96 химических элементов.

Основные возможности программного комплекса:

- работа с данными (поиск, редактирование данных, построение таблиц и графиков термодинамических свойств),
- расчет равновесного состава многокомпонентных гетерогенных систем,
- анализ результатов вычислений.

NIST <http://webbook.nist.gov>

- Данный сайт предоставляет сведения о термодинамических и теплофизических свойствах веществ, собранных в NIST в рамках программы Standard Reference Data (SRD). В NIST существуют давние традиции получения надежных термохимических данных, заложенные в 20-е годы XX века при выпуске International Critical Tables. Эти традиции продолжаются и в новых базах SRD по термохимическим свойствам органических и неорганических веществ.
- **Термохимические сведения о свойствах более 6000 органических и неорганических веществ:**
 - энтальпия образования,
 - теплота сгорания,
 - теплоемкость
 - энтропия
 - энтальпии и температуры фазовых переходов,
 - давления паров.
- **Термохимические сведения для более 9000 реакций:**
 - тепловой эффект реакции,
 - изменение энергии Гиббса реакции.

TRC <http://www.trc.nist.gov>

TRC (Thermodynamics Research Center)

специализируется на сборе информации, расчетах и определении погрешностей сведений о термодинамических, теплофизических и транспортных свойствах органических веществ. TRC является подразделением [Physical and Chemical Properties Division](#) в [National Institute of Standards and Technology](#) и расположен в Boulder, Colorado. В базе данных TRC хранится информация четырех типов:

- Сведения, идентифицирующие вещество
- Описания образцов
- Литературные источники
- Числовые значения

База данных NIMS Materials database

http://mits.nims.go.jp/db_top_eng.htm

The screenshot shows the NIMS Materials Database website in a Mozilla Firefox browser window. The browser's address bar displays the URL https://mits.nims.go.jp/db_top_eng.htm. The website header includes the NIMS logo, the text "National Institute for Materials Science / Materials Database Station", and navigation links for "NIMS", "DMI", "MDBS", "NIMS Materials Database", "NEWS", and "LINK".

The main content area is organized into several sections:

- Keyword Search:** A search box with a "search" button and options for "AND", "OR", and "Contain".
- Tree Search:** A hierarchical tree structure for searching by "Material" (Element, Alloy, Ceramic, Polymer) and "Property" (Crystal Structure, Micrograph, Phase Transition, Mechanical Properties, Physical Properties, Physicochemical Properties, Chemical Properties).
- Basic Properties Database:** A list of databases including Polymer [PoLyInfo], Basic Crystal Structures, Electronic Structures, Nuclear Reaction Database for Materials, Diffusion, 3D Demo System for Ternary Phase Diagrams, and Superconducting Materials, each with a "Login" link.
- NIMS Structural Materials Datasheet Online:** A list of materials-related topics such as Creep, Microstructure for Crept Materials, Fatigue, Corrosion, Space Use Materials, and Strength, each with a "Login" link.
- Metals & Alloys Database:** A list of materials including Nuclear Materials, Tensile, Creep, Pressure Vessel Materials (Cr-Mo Steels), and CCT Diagrams for Welding, each with a "Login" link.
- Application system:** A list of systems including Thermophysical Property, Prediction System for Composites, Polymer Properties Estimation, Material Risk Information Platform (Japanese only), Weld Thermal History Simulator, Joint Performance Simulator, and Unit Conversion, each with a "Login" link.
- Materials information from NIMS:** A list of resources including National Institute for Materials Science, Materials Science Outlook, Research Activity Information System, SANZEN, High Magnetic Field Engineering and Cryogenics Database, and NIMS Thermodynamic Database.
- Cooperation organization (MOU):** A list of partner organizations including Matdata.net(Granta Design), MatWeb(Automation Creations Inc.), Springer Link(Landolt Bornstein), LB Substance / Property Index, Metals Bank(KIMS), Ceramics Bank(KICET), and RIO-DB(AIST).

At the bottom of the page, there are sections for "Event" (MITS meeting, 4th International Workshop on Risk Based Engineering), "Notes on Use" (System Requirement), "What's New!" (Sep. 29, 2008), and "Registration" (Free of Charge).

Basic Database for Crystal Structures **PaulingFile**



- Login**
- [Advanced Search \(For Binary\)](#)
- [Maintenance](#)
- [Quick Search \(For Binary\)](#)
- [Quick Search \(For Multinary\)](#)

- [Registration](#)
- [Change\(Modification\)](#)
- [Forgot Your Password?](#)
- [Withdraw\(Seession\)](#)

- [Outline](#)
- [Database Editors](#)
- [System Requirement](#)
- [Notes on Use](#)

- [Privacy Policy](#)
- [Inquire](#)

- [TopPage](#)

Outline

The PAULING FILE project is a collaboration between Japan Science and Technology Corporation (JST) and Material Phases Data System (MPDS). The project started in 1995. The Pauling File aims at a comprehensive materials database which covers all non-organic solid state materials and consists of structure, diffraction, constitution, and physical property data. It is named by the name of the famous chemist Linus C. Pauling, who gave his permission to use his name in 1993.

The source of Pauling File data are around 150,000 original publications taken from more than 1,000 scientific journals since 1900. The data are processed by an international, highly-experienced group of scientists a sophisticated data evaluation, standardization and derivation procedures. The as-published data are accompanied by value-added information, such as calculated powder patterns (LAZY PULVERIX) and fully standardized structure data (STRUCTURE TIDY).

Online Pauling File The present Pauling File includes about 80,000 structure entries, 34,000 diffraction entries, about 52,000 property data counts, about 6,000 constitution entries and 6,000 images of phase diagram. The data of binary composition is accomplished, while of multinary is at an underdeveloped stage.

This web-based system disseminates these four groups of data with the dynamic link between them. It also provides a design platform as a tool for data mining and materials design.

	Multinary	Binary
Structure entries	80,000	28,000
Diffraction entries	34,000	28,000
Property data counts	52,000	42,000
Constitution entries	6,000	6,000
Images of phase diagram	6,000	6,000

Note: "Multinary" is inclusive of "Binary".

Main features of online Pauling File Data Search

- From element - element map
- From criteria (chemical system, some properties)
- From constitution (phase diagram)
- From simple conditions

Database Editors

Editor-in-chief

P. Villars, Switzerland

Editors

K. Cenxual, Switzerland
 J. L. C. Daams, Netherlands
 F. Hulliger, Switzerland
 H. Okamoto, Japan



Menu

Search

Element-Element Map

Restrains

Constitution

Simple Condition

Design Tools

Introduction

About This System

How to Use

Exemplars

How to Pre-install

Exit

SEARCH from Element Map, Restrains, Phase Diagram

Search from Element-Element Map

Scale: 100% Attribute: Structure/Extraction

Chemical System: Structure/Extraction(0) Property(0) Contribution(0)

Search from Restrains

Chemical System: Property

Property

- Density D (kg/m³)
- Cell parameter ratio c/a
- melting temperature T_m (K)
- peritectic temperature T_p (K)
- microhardness wh (GPa)
- Vickers hardness number Hv (GPa)
- Young's modulus E (GPa)
- linear thermal expansion coefficient alpha (1/K)
- molar enthalpy of formation Delta_fH (kJ/mol)
- molar heat capacity at constant pressure C_p (J/K mol)
- thermoelectric power S (micro V/K)
- thermal conductivity lambda_{th} (W/m K)
- energy gap E_g (eV)
- optical absorption co
- Neel temperature T_N
- Curie temperature T_C
- saturation magnetic
- critical temperature T_c
- electron-phonon inter
- superconducting tran

Phase Diagrams of Al binary system

Search from Constitution - Windows Internet Explorer

https://crystdb.nims.go.jp/cgi-bin/lpf/WI Live Search

File Edit View Favorites Tools Help

Search from Constitution

PaulingFile

● Search from Constitution [?HELP](#) [>>>SVG VIEWER](#)

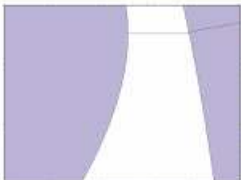
A or A-B Search Clear

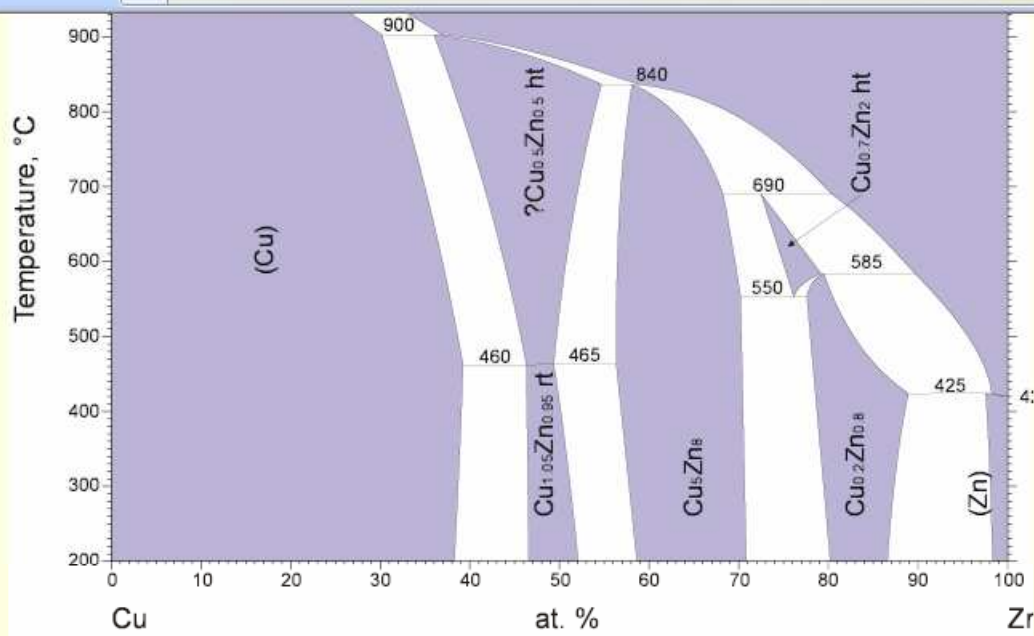
The Periodic Table of the Elements

1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57 -71 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	89 -103 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Uun	111 Uuu	112 Uub	114 Uuq	116 Uuh	118 Uuo			
Lantanoide (Ln)		57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	
Actinoide (An)		89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr	

Internet 100%

with links to the detailed data (structure, property, etc.) of relevant phases.

No.	Graphic	Diagrams
1		>>Large Image T[0-500 °C] vs. Zn conc.[25-55 at.%] ZEITSCHRIFT FUER METALLKUNDE 60 ,312-315 (1969) <i>Figure 2</i>
2		>>Large Image T[200-1100 °C] vs. Zn conc.[0-100 wt.%] COMPTES RENDUS HEBDOMADAIRES DES SEANCES DE L'ACADEMIE DES SCIENCES 202 ,411-413 (1936) <i>Figure 0</i>
3		>>Large Image T[350-1100 °C] vs. Zn conc.[0-100 at.%] GAZZETTA CHIMICA ITALIANA 44 ,475-502 (1914) <i>Figure 1</i>
4		>>Large Image T[200-500 °C] vs. Zn conc.[25-50 at.%] METALLURGICAL TRANSACTIONS, SECTION A: PHYSICAL METALLURGY AND MATERIALS SCIENCE 25 ,2621-2629 (1994) <i>Figure 7</i>
5		>>Large Image T[200-800 °C] vs. Zn conc.[34-60 wt.%] TRANSACTIONS OF THE AMERICAN INSTITUTE OF MINING, METALLURGICAL AND PETROLEUM ENGINEERS (TRANSACTIONS AIME) 194 ,1079-1083 (1952) <i>Figure 6</i>



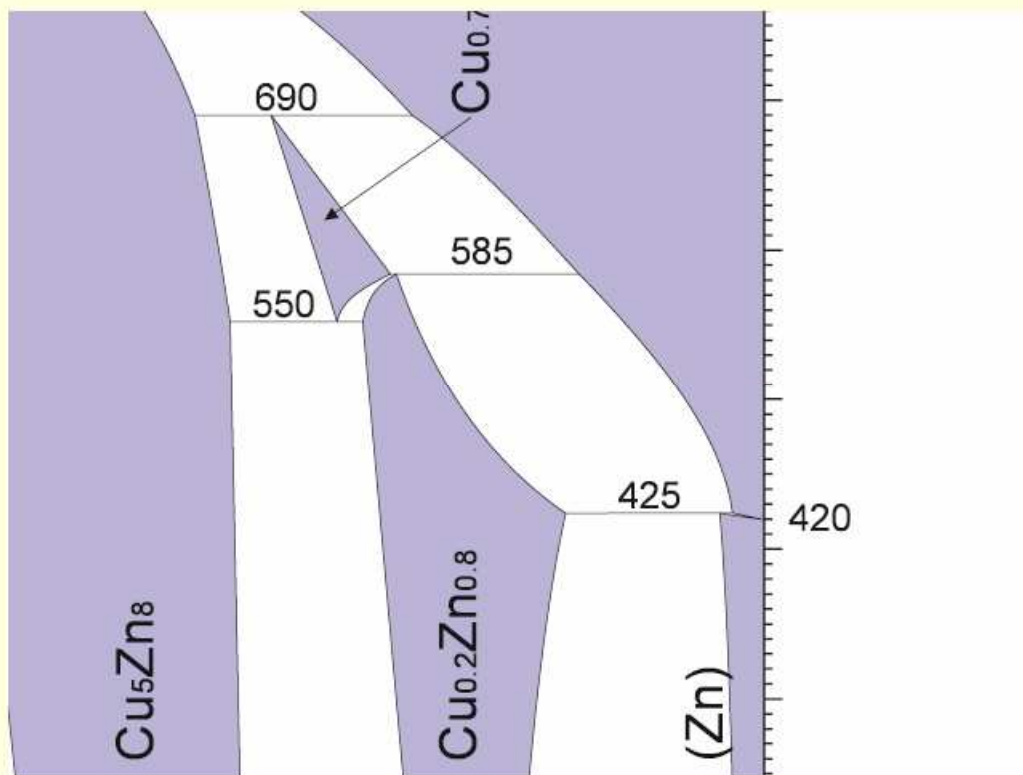
Phase	Modification	Structure Type	Pearson Symbol	Space Group No.
Cu_5Zn_8		Cu_5Zn_8	cI52	217
$\text{Cu}_{1.05}\text{Zn}_{0.95}$	rt	CsCl	cP2	221
(Cu)		Cu	cF4	225
(Zn)		Mg	hP2	194
$\text{Cu}_{0.2}\text{Zn}_{0.8}$		Mg	hP2	194
$\text{Cu}_{0.7}\text{Zn}_2$	ht	$\text{Cu}_{0.7}\text{Zn}_2$	hP3	187
$\text{Cu}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}$	ht	W	cI2	229

Source Reference

Spencer P.J. "A THERMODYNAMIC EVALUATION OF THE Cu-Zn SYSTEM"
 CALPHAD: COMPUTER COUPLING OF PHASE DIAGRAMS AND
 THERMOCHEMISTRY **10**,175-185 (1986)

ingFile

● Phase Diagram of Cu-Zn ?HELP



Phase	Modification	Structure Type	Pearson Symbol	Space Group No.
Cu_5Zn_8		Cu_5Zn_8	cI52	217
$\text{Cu}_{1.05}\text{Zn}_{0.95}$	rt	CsCl	cP2	221
(Cu)		Cu	cF4	225
(Zn)		Mg	hP2	194
$\text{Cu}_{0.2}\text{Zn}_{0.8}$		Mg	hP2	194

Cu_{0.2}Zn_{0.8}	Structure Type	Pearson Symbol	Space Group	No.
	Mg	hP2	P6 ₃ /mmc	194

Journal = ACTA METALLURGICA Year = 1962 Volume = 10 Page = 1171-1181

References

[METAR,1962,10,71,1181](#)

● Detail Information

Standardized Data

Pearson symbol	hP2
Space group	P6 ₃ /mmc
Space group No.	194
Z	2

Published Data

Space group	P6 ₃ /mmc
Space group No.	194

Cell Parameters

a	0.27383 nm
b	0.27383 nm
c	0.42939 nm
α	90 °
β	90 °
γ	120 °
a/b	1.000
b/c	0.638
c/a	1.568
Cell volume	0.02788 nm ³
Density	7.74 Mg m ⁻³

Cell Parameters

a	0.27383 nm
b	0.27383 nm
c	0.42939 nm
α	90 °
β	90 °
γ	120 °
a/b	1.
b/c	0.638
c/a	1.568
Cell volume	0.02788 nm ³

Термодинамическая база данных для решения задач горения

- Предметно-ориентированную базу данных (авторы Alexander Burcat и Branko Ruscic), созданную для решения задач горения, которую можно найти в сети Интернет по адресу <http://garfield.chem.elte.hu/Burcat/burcat.html>

NASA

<http://www.lerc.nasa.gov/WWW/CEAWeb/>

Известная программа NASA CEA (Chemical Equilibrium with Applications) предназначена для расчета равновесного состава и свойств сложных термодинамических систем. Область применения программы позволяет использовать ее для расчета характеристик ракетных двигателей, исследования процессов в ударных волнах, определения параметров точки Чепмена-Жуге, а также для анализа других равновесных состояний термодинамических систем.

CEA является наиболее современной разработкой в ряду программ расчета равновесного состава и свойств, созданных в NASA за последние 50 лет. Для удобства эксплуатации программы предоставлена возможность использования независимых баз данных по свойствам переноса и термодинамическим свойствам индивидуальных веществ. Прилагаемая база данных содержит сведения о термодинамических свойствах более 1900 веществ. Программа написана Bonnie J. McBride и Sanford Gordon на стандартном ANSI ФОРТРАНе. Она широко используется для решения задач аэродинамики и термодинамики.

SGTE

- www.sgte.org
- SGTE - это консорциум научных центров, вовлеченных в деятельность, связанную с разработкой термодинамических баз данных для неорганических и металлургических систем ([thermodynamic databanks for inorganic and metallurgical systems](#)) и их использованием для решения прикладных задач. Целями организации являются:
- Создание, развитие и распространение высококачественных баз данных, позволяющих надежно и эффективно проводить анализ равновесных состояний сложных термодинамических систем.
- Международное сотрудничество, обеспечивающее унификацию термодинамических данных и методов их получения.
- В состав SGTE входят организации Франции, Англии, США, Германии, Канады, Швеции.

Базы данных SGTE

PURE - база данных о свойствах химических элементов. Содержит сведения о термохимических свойствах для всех стабильных и многих метастабильных модификаций от 298.15 К для газообразного состояния.

SSUB - эта база данных содержит данные о термодинамических свойствах более 4000 газообразных и конденсированных веществ.

SSOL - база данных о термодинамических свойствах растворов. Содержит данные для 400 конденсированных бинарных и тройных систем, а также о свойствах некоторых систем более высокого порядка.

SALTS - база данных, содержащая сведения о термодинамических свойствах более 90 двойных, тройных и многокомпонентных солевых растворов

SLAG – база данных для термодинамических расчетов равновесий в шлаках в железосодержащих системах

SGTE Nuclear Database – база данных о термодинамических свойствах материалов атомной энергетики и т.д.

FACTSAGE

- <http://www.crct.polymtl.ca/fact/fact.htm>
- Программный комплекс F*A*C*T (Facility for the Analysis of Chemical Thermodynamics) создан в результате выполнения проекта, который был начат начавшийся в 1976 году и предполагал создание программных средств для работы с термодинамическими данными и решения задач проблем металлургии. В 1984 году в École Polytechnique (the engineering faculty of the Université de Montréal) был основан исследовательский центр CRCT - *Centre de Recherche en Calcul Thermochimique / Centre for Research in Computational Thermochemistry* для того чтобы поддержать развитие и использование программного комплекса F*A*C*T при решении научных задач и в учебном процессе. F*A*C*T-Web-предоставляет свободный доступ к информации о термодинамических свойствах индивидуальных веществ, химических реакций и возможностям расчета равновесного состава термодинамических систем. Содержит хорошо подобранный список ссылок на сайты, имеющие отношение к вопросам неорганической химической термодинамики. Сравнительно недавно создан объединенный продукт FactSage = FACT + ChemSage. Входит в SGTE.

THERMOCALC

- <http://www.thermocalc.com>
- Thermo-Calc –программный комплекс, предназначенный для выполнения термодинамических расчетов и построения фазовых диаграмм. Thermo-Calc развивается начиная с 1981 профессором Королевского Технологического института Бо Сундманом (Bo Sundman, Prof., Head of Division of Computational Thermodynamics in the [Royal Institute of Technology](#), Stockholm, Sweden). Программу можно использовать для анализа термодинамических систем в таких областях, как химия, металлургия, материаловедение, геохимия и т.д. в зависимости от той базы данных, которая подключена к комплексу. Thermo-Calc содержит несколько модулей, при помощи которых исследователь может решать интересующие его задачи. Наиболее важный модуль, предназначенный для расчета равновесного состава, предоставляет возможность проводить вычисления и строить различные диаграммы. Очень полезным является модуль, предназначенный для оценки параметров термодинамических моделей на основании экспериментальной информации. Входит в SGTE.

MTDATA

- <http://www.npl.co.uk/mtdata/>
- MTDATA – программный комплекс для расчета фазовых равновесий в многофазный многокомпонентных системах, в состав которого входит банк данных, содержащий критически отобранные термодинамические свойства. Программный комплекс ориентирован на решение задач металлургии, химии, материаловедения и геохимии. Входит в SGTE.

PANDAT

- www.computherm.com
- CompuTherm LLC - компания, создана в 1996 году для разработки программных комплексов, предназначенных для расчета фазовых диаграмм. Научным руководителем компании является профессор Y. Austin Chang (Wisconsin Distinguished Professor and member of the National Academy of Engineering), который занимается вопросами расчетов фазовых диаграмм в University of Wisconsin-Madison начиная с 80-х годов прошлого века.
- В число разработок компании входят - [Pandata](#) – программный комплекс для расчетов фазовых диаграмм и термодинамических характеристик многокомпонентных сплавов
- [PanEngine](#) – вычислительное ядро Pandata, доступно в виде динамически компоуемой библиотеки (DLL), которое может быть использовано в других приложениях. Кроме того, в CompuTherm разработано несколько коммерческих баз данных по сплавам.

MALT

- www.kagaku.com/malt
- MALT2 (Materials-oriented Little Thermodynamic Database for Personal Computers)- довольно полная база данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ с программами расчета равновесного состава и решения задач материаловедения. База данных была создана специальной группой, организованной японским обществом калориметрии и термического анализа (Japan Society of Calorimetry and Thermal Analysis). MALT2 содержит такие сведения, как стандартная энтальпия образования, $D_fH(298.15\text{ K})$, стандартная энергия Гиббса образования, $D_fG(298.15\text{ K})$, стандартная энтропия, $S(298.15\text{ K})$, теплоемкость, C_p , сведения о теплотах фазовых переходов и изменениях энтальпии фазовых переходов для примерно 5000 веществ; база данных ориентирована на анализ процессов производства керамики, полупроводников, ядерных топлив, материалов для производства ядерных реакторов, анализа плазмохимических процессов и т.д.

HSC

- www.outotec.com/pages/Page.aspx?id=21783&epslanguage=EN
- Программный комплекс HSC Chemistry создан в Финляндии, в Outokumpu Research Oy. При его создании были использованы тексты программ и идеи из других источников. Программный комплекс предназначен для моделирования равновесных термодинамических состояний и процессов на персональном компьютере. База данных по термодинамическим свойствам веществ, входящая в состав программного комплекса, является компилятивной. Число веществ, информация о которых содержится в базе данных, превышает 20000.
- Программное обеспечение комплекса HSC позволяет решать следующие задачи:
 - осуществлять термодинамический анализ заданной химической реакции;
 - рассчитывать равновесный состав термодинамической системы при заданных значениях температуры и давления;
 - строить на экране монитора диаграммы фазовой стабильности и диаграммы Пурбэ;
 - моделировать процессы.

OLI Systems

- www.olisystems.com
- Фирма OLI разрабатывает программное обеспечение для моделирования многокомпонентных гетерогенных водных растворов. Основой программного обеспечения OLI является OLI Engine, который включает в себя решатели (Solvers), а также анализаторы – Stream Analyser, OLI Express, Water Analyser.
- Термодинамический программный комплекс OLI позволяет анализировать многокомпонентные водные растворы, включая жидкую и газовую фазы, растворы органических веществ, в диапазоне температур от -50 до 300 °C при давлении до 1500 бар.
- Программа моделирования окружающей среды (Environmental Simulation Program) предназначена для анализа стационарных процессов. Анализ нестационарных процессов можно выполнить при помощи другой программы – DynaChem.
- База данных OLI содержит термодинамические, транспортные и физические свойства веществ, образованных из 79 химических элементов, их свойства в водных растворах, а также свойства более 3000 органических соединений.

База данных по свойствам водных растворов органических веществ

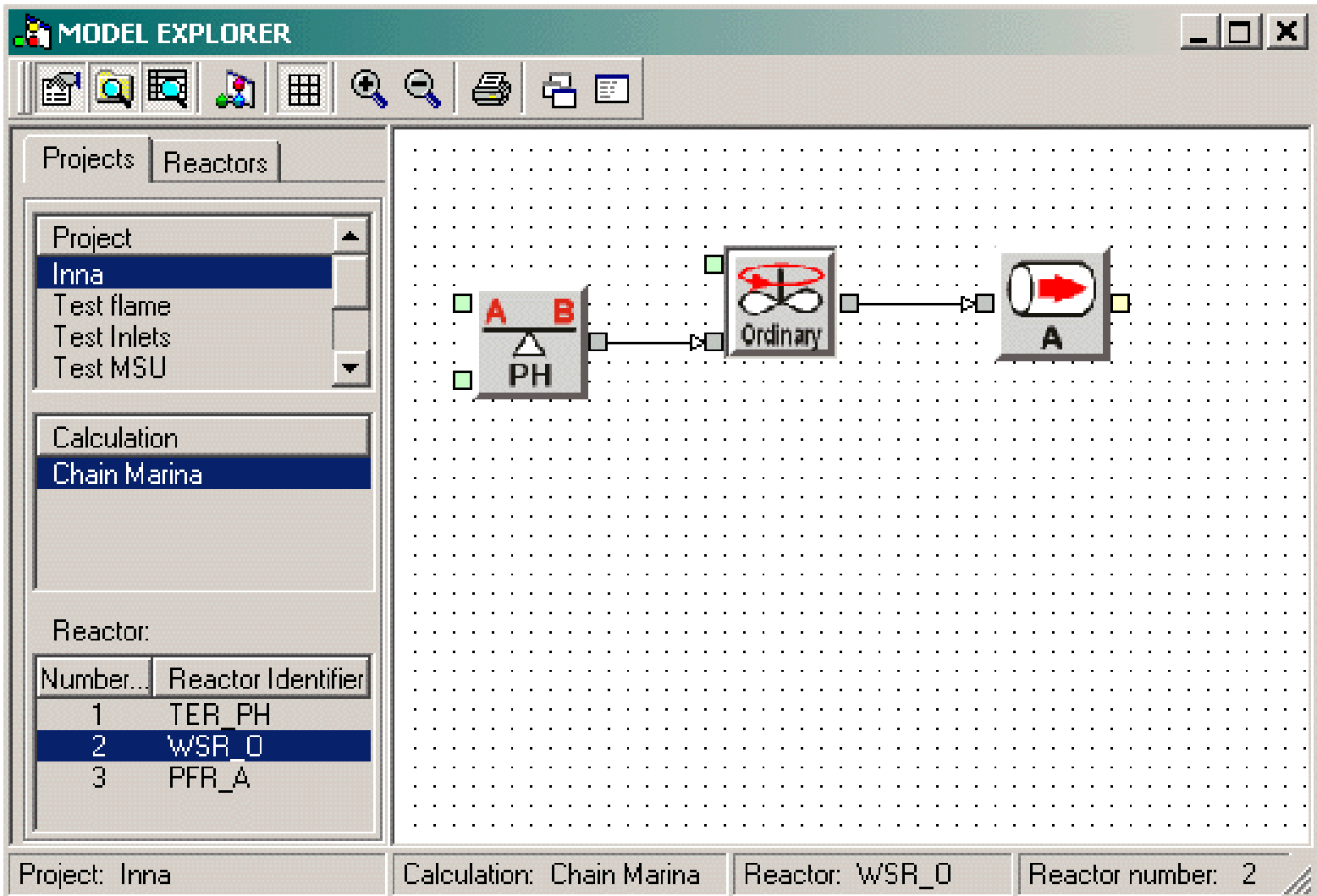
- georig.asu.edu/people/A_Plyasunov/Database_of_aqueous_organic_compounds.htm
- База данных была разработана в результате выполнения проекта по расчету термодинамических свойств водных растворов неэлектролитов в широком диапазоне температур и давлений. Доступ к информации из базы данных свободный.

Термодинамико-кинетические программные комплексы

- «Химический верстак» (Chemical workbench) www.kintech.ru/
- CHEMKIN www.ReactionDesign.com
- KINTECUS www.kintecus.com

ХИМИЧЕСКИЙ ВЕРСТАК

Химический верстак – программный комплекс для моделирования, оптимизации и проектирования широкого класса процессов, реакторов и технологий, обусловленных возможностью протекания химических реакций. Программа дает возможность представить реальный процесс в виде цепочки реакторов, каждая из которых моделирует отдельную часть процесса (горение, охлаждение, плазменная обработка и т.д.). В состав программного комплекса включен банк данных, содержащий сведения о термодинамических и термохимических свойствах веществ, а также информацию о константах скоростей химических реакций. Отличительной особенностью программы является возможность моделирования сложных многоступенчатых процессов с химическими превращениями, используя не только равновесные, но и кинетические модели. Структурной единицей модели процесса является реактор – модель некоторой части процесса. Программный комплекс позволяет представить реальный процесс в виде цепочки реакторов (термодинамически равновесного, реактора идеального смешения, реактора идеального вытеснения и т.д.). Исследователь имеет возможность задать параметры для каждого реактора, при этом между реакторами можно установить связь, т.е. передавать продукты реакции из одного реактора в другой.



Кинетические реакторы комплекса «Химический верстак»

- **WSR (Well Stirred Reactor)** – реактор идеального смешивания (скорость перемешивания принимается бесконечно быстрой в этой модели) – позволяет предсказывать устоявшийся температурный и химический состав на выходе из реактора при заданном времени нахождения или при заданном объёме реактора, учитывая при этом потери энергии через стенку реактора.
- **PFR (Plug Flow Reactor)** – реактор идеального вытеснения – описывает эволюцию параметров потока вдоль его оси в квазиодномерном приближении, учитывая при этом изменение поперечного сечения и тепловые потери на границе потока. Имеются также модели с постоянной температурой и с постоянным давлением.

- **CBR (Calorimetric Bomb Reactor)** – реактор теплового взрыва – моделирует временную эволюцию характеристик системы в замкнутом объёме при постоянном давлении или температуре, учитывая при этом тепловые потери через стенку реактора.
- **CRD (Calorimetric Reactor with Deviation – Sensitivity analysis)** – реактор теплового взрыва с анализом чувствительности – используется для глобального кинетического анализа чувствительности механизма реакции к определённой реакции для гомогенных реагирующих газовых смесей в закрытом объёме при постоянном давлении или температуре.

- **FLAME_PM** – пламя – одномерная модель горения, рассчитывающая скорость фронта горения смеси.
- **CJD (Chapman-Jouguet Detonation Reactor)** предназначен для вычисления стационарных параметров детонации для заданных начальных термохимических параметров реагирующей смеси.
- **MSU_PF** – мембранный реактор – предназначен для разделения газовой смеси через газоразделительную мембрану.

CHEMKIN

CHEMKIN представляет собой пакет программного обеспечения, содержащий множество процедур и функций, облегчающих постановку задач, связанных с исследованием химической кинетики газофазных и гетерогенных процессов, их решение и анализ. Программы и библиотеки процедур могут быть использованы при разработке программных комплексов для моделирования кинетики химических процессов в реагирующих потоках. Средства CHEMKIN можно использовать для анализа процессов горения, катализа, осаждения из газовой фазы и т.д.

В состав CHEMKIN входят

- процедуры для анализа газофазной химической кинетики и кинетики плазмы;
- процедуры для анализа гетерогенной химической кинетики на границе газ – твердое тело;
- база данных по термодинамическим свойствам веществ;
- процедуры для расчета свойств переноса газов и газовых смесей (коэффициенты диффузии, вязкости, теплопроводности);
- база данных для расчета свойств переноса газов.

KINTECUS

- Kintecus – программное обеспечение для моделирования процессов в ядерных установках, в биологических системах, в атмосфере, процессов горения и многих других процессов, сопровождающихся химическими превращениями. Отличительной чертой программного обеспечения является возможность использования моделей CHEMKIN, не требующая суперкомпьютера и перекомпиляции программы. В расчетах могут быть использованы термодинамические базы данных различных форматов. Kintecus позволяет исследовать изотермические и неизотермические процессы, а также адиабатические процессы при постоянном давлении или объеме. В расчетах можно использовать программируемые законы изменения объема (движение поршня в цилиндре), температуры, концентрации веществ, при этом не требуется вносить изменения в текст программы.

Collaboratory for Multi-Scale Chemical Science

Username: Password:

- Home
- Announcements
- Getting Started
- Public Data
- Community
- Privacy
- News Set
- Change
- FAQs
- Library
- Policy
- Links
- Support
- Generate Link
- for this Page
- CMCS
- Project

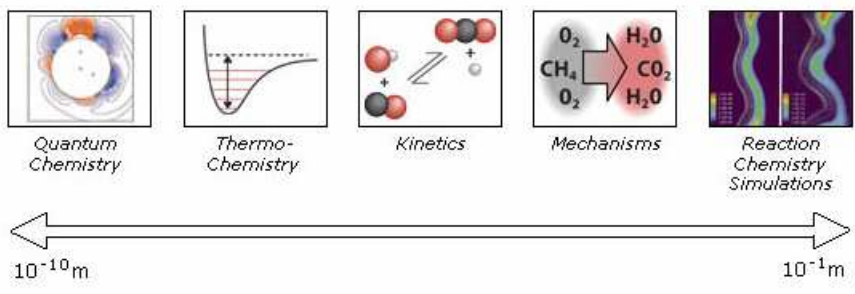
Welcome

Welcome to the CMCS Portal!

This is the community portal for users of the Collaboratory for Multi-scale Chemical Science (CMCS). For information on using the CMCS Portal, click on "Getting Started".

The CMCS project brings together leaders in scientific research and technological development across multiple DOE laboratories, other government laboratories and academic institutions to develop an open "knowledge grid" for multi-scale informatics-based chemistry research. CMCS is using advanced collaboration and metadata-based data management technologies to develop this grid and the CMCS community portal. For more information, click on "The CMCS Project".

Multi-scale Chemical Science



Active Thermochemical Tables

- http://wiki.cogkit.org/index.php/Active_Thermochemical_Tables
- A team of researchers led by Dr. Branko Ruscic, have developed a new paradigm for providing accurate, reliable, and internally consistent thermochemical values for a comprehensive range of chemical species - Active Tables. ATcT implements a Thermochemical Network (TN) concept that explicitly exposes the manifold of inherent interdependencies ignored in traditional approaches. The TN is designed to incorporate all available experimental and computational data, which, through the collaborative environment of CMCS, can be subjected to critical evaluation by recognized experts in the thermo-chemical field. The ATcT analysis, also accessible from the CMCS portal, produces a self-consistent TN from which it can generate, on demand, user tailored and thoroughly documented thermochemical tables that optimally exploit all the available knowledge.