**The database of Gurvich *et al*. with thermodynamic properties**

**of individual species**

Каждый файл с расширением IVT (\*.ivt) представляет собой базу данных калорических уравнений состояния индивидуальных веществ при стандартном давлении *p*0 = 1 atm, т.е. зависимостей мольных изобарной теплоемкости *Cp0*, энтальпии *H0* и энтропии *S0* веществ от температуры *T*.

В файлах \*.ivt используются зависимости *Cp0(T)*, *S0(T)* и *H0(T)*, вычисляемые по формулам

*X* = *T* \* 10–4,

*Cp0(T)* = *f*2 + 2*f*3*X*–2 + 2*f*5*X* + 6*f*6*X*2 + 12*f*7*X*3,

*S0(T)* = *f*1 + *f*2 + *f*2ln*X* – *f*3*X*–2 + 2*f*5*X* + 3*f*6*X*2 + 4*f*7*X*3,

*H0(T)* = *H0*(0) + 104 { *f*2*X* – 2*f*3*X*–1 – *f*4 + *f*5*X*2 + 2*f*6*X*3 + 3*f*7*X*4 },

*H0*(0) = D*H0f, 298.15K* – { *H0*(298.15) – *H0*(0) }, (1)

где *X* - приведенная температура, *H0*(0) - мольная энтальпия вещества при 0 K и стандартном давлении *p*0 = 1 atm, D*H0f, 298.15K* - мольная энтальпия образования (heat of formation) вещества при стандартных условиях *p*0 = 1 atm и *T*0 = 298.15 K, { *H0*(298.15) – *H0*(0) } - изменение мольной энтальпии вещества при изменении температуры от 0 до 298.15 K (тепловая составляющая энтальпии при 298.15 K), *f*1,...,*f*7 - коэффициенты.

Для вычислений по формулам (1) температура *T* должна задаваться в [K], энтальпии D*H0f, 298.15K* и { *H0*(298.15) – *H0*(0) } - в [J/mol]. Вычисленные значения *Cp0(T)*, *S0(T)* и *H0(T)* будут иметь размерности [J/(mol\*K)], [J/(mol\*K)] и [J/mol], соответственно.

Формулы (1) часто применяются для аппроксимации табличных термоданных [1].

Для многих веществ область аппроксимации термоданных разбита на несколько температурных диапазонов (до шести). Для таких веществ в базе данных указывается несколько наборов значений коэффициентов *f*1,...,*f*7.

Для каждого вещества в файлах \*.ivt используется следующий формат.

Данные о каждом веществе представляют собой несколько строк, формат которых описан ниже. Строки данных одного вещества отделяются от строк данных другого вещества любым количеством пустых строк.

Каждая строка с данными не должна быть длиннее 120 символов. Любая строка файла может содержать комментарий, начинающийся с символа ‘;’. Символ ‘;’ и все, что находится в строке правее этого символа, игнорируются кодом TDS.

В первой строке данных, относящихся к очередному веществу, указывается химическая формула вещества так, как это принято в TDS. Длина химической формулы не может превышать 31 символа.

Вторая строка должна содержать любой текст (не более 50 символов), внутри которого допустимы пробелы. Этот текст не используется кодом TDS, но он обязательно должен быть указан. В качестве текста рекомендуется указывать название вещества.

Третья строка должна содержать три поля, отделенных друг от друга любым количеством пробелов и (или) символов табуляции. Первое поле является текстовым (не более 4 символов) и содержит информацию о точности термоданных данного вещества. Второе поле - целое число, указывающее номер таблицы термоданных данного вещества по каталогу базы данных. Третье поле - текстовое (не более 9 символов), оно содержит дату расчета таблицы термоданных данного вещества. Ни одно из этих трех полей не используется кодом TDS, но все они обязательно должны быть указаны в файле, например, с произвольными значениями.

В четвертой строке указывается агрегатное состояние вещества. Это одна строчная буква ‘g’, ‘l’ или ‘s’ (g - газообразное вещество, l - жидкое вещество, s - твердое вещество).

В пятой строке указывается химический состав молекулы вещества. В первом поле этой строки указывается целое число *nChels* от 1 до 10, равное количеству химических элементов, из которых состоит молекула вещества. Например, для H2 это 1 (хим.элемент H), для H2O это 2 (хим.элементы H и O), для C2H5OH это 3 (хим.элементы C, H и O). Далее для каждого химического элемента в строке следуют по два поля, первое из которых является строкой, задающей обозначение химического элемента (1 или 2 символа), а второе - число (обычно целое, но может быть и с плавающей точкой), указывающее количество атомов этого химического элемента в молекуле вещества. Если обозначение химического элемента состоит из двух символов, то первый символ должен быть прописной буквой, а второй - строчной, например, ‘Mg’. Если обозначение химического элемента состоит из одного символа, то этот символ должен быть прописной буквой, например, ‘H’. Из последнего правила есть единственное исключение: «химический элемент» электрон, условно входящий в состав ионизированных молекул, следует обозначать строчной буквой ‘e’.

Таким образом, в пятой строке всего должно быть указано (1 + *nChels*\*2) полей, которые отделяются друг от друга любым количеством пробелов и (или) символов табуляции.

Примеры правильно указанных пятых строк:

для H2:

1 H 2

для Al2O3/s/:

2 Al 2 O 3

для C2H5OH/l/:

3 C 2 H 6 O 1

для H- (отрицательный ион водорода):

2 H 1 e 1

для H+ (положительный ион водорода):

2 H 1 e -1

В шестой строке указываются три числовых поля, которые отделяются друг от друга любым количеством пробелов и (или) символов табуляции. Первое поле должно содержать молярную массу вещества в [g/mol]. Второе поле - это D*H0f, 298.15K* в [kJ/mol]. Третье поле содержит значение разности { *H0*(298.15) – *H0*(0) } в [kJ/mol].

В седьмой строке указывается одно целое число *nTints* (1 <= *nTints* <= 6), равное количеству температурных диапазонов, для которых известны коэффициенты полиномов *f*1,...,*f*7.

Далее для каждого из *nTints* диапазонов следуют по четыре строки данных. В первой из этих четырех строк указываются два числовых поля: *Tmin* и*Tmax*, где *Tmin* и*Tmax* - нижняя и верхняя границы данного температурного диапазона в [K]. Вторая строка содержит три числовых поля: значения коэффициентов *f*1, *f*2 и *f*3 в формулах (1) для данного температурного диапазона. Третья строка содержит три числовых поля: значения коэффициентов *f*4, *f*5 и *f*6 в формулах (1) для данного температурного диапазона. Последняя четвертая строка содержит одно числовое поле: значение коэффициента *f*7 в формулах (1) для данного температурного диапазона.

Таким образом, после строки, содержащей значение *nTints*, в файле должно следовать *nTints*\*4 строк с данными.

Пример правильно указанных данных для газообразного CO2:

CO2

carbon dioxide

2-C 250 10.10.80

g

2 C 1 O 2

44.00980000 -393.5100 9.3650

3

298.15 1500.00

2.64536132813e+02 2.62021980286e+01 -8.48860014230e-04

1.04696765542e-01 2.55807922363e+02 -4.84302795410e+02

5.16703857422e+02

1500.00 6000.00

3.36422607422e+02 5.68131942749e+01 -3.08805406094e-02

2.19535255432e+00 2.10947608948e+01 -1.74400253296e+01

8.67713546753e+00

6000.00 10000.00

4.08307495117e+02 1.18672576904e+02 -4.41445291042e-01

1.48980865479e+01 -1.15297592163e+02 5.39243316650e+01

-1.06376552582e+01

Молярная масса этого вещества 44.0098 g/mol, стандартная энтальпия образования D*H0f, 298.15K* = –393.51 kJ/mol, разность { *H0*(298.15) – *H0*(0) } = 9.365 kJ/mol.

Термоданные известны в трех температурных диапазонах:

1. от 298.15 K до 1500 K:

*f*1 = 2.64536132813e+02

*f*2 = 2.62021980286e+01

*f*3 = -8.48860014230e-04

*f*4 = 1.04696765542e-01

*f*5 = 2.55807922363e+02

*f*6 = -4.84302795410e+02

*f*7 = 5.16703857422e+02

1. от 1500 K до 6000 K:

*f*1 = 3.36422607422e+02

*f*2 = 5.68131942749e+01

*f*3 = -3.08805406094e-02

*f*4 = 2.19535255432e+00

*f*5 = 2.10947608948e+01

*f*6 = -1.74400253296e+01

*f*7 = 8.67713546753e+00

3) от 6000 K до 10000 K:

*f*1 = 4.08307495117e+02

*f*2 = 1.18672576904e+02

*f*3 = -4.41445291042e-01

*f*4 = 1.48980865479e+01

*f*5 = -1.15297592163e+02

*f*6 = 5.39243316650e+01

*f*7 = -1.06376552582e+01

Файл Gurvich.ivt содержит термоданные веществ, полученные путем аппроксимации таблиц [1].

**REFERENCES**

1. Гурвич Л.В., Вейнц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справ. изд. в 4-х т. Изд. 3-е, перераб. и расшир. М.: Наука, 1978-1982.