

ПРОГРАММА ДЛЯ СОВМЕСТНОЙ ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ ПО ИНКРЕМЕНТАМ ЭНТАЛЬПИИ И ПРЯМЫМ ИЗМЕРЕНИЯМ ТЕПЛОЁМКОСТИ

*Синева М.А.,^{*1} Аристова Н.М.,¹ Белов Г.В.,^{1,2}
Морозов И.В.¹*

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МГУ, Москва, Россия
**maria.a.sineva@gmail.com*

Экспериментальные данные по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ в конденсированной фазе зачастую представлены в табличном виде, и их необходимо аппроксимировать некоторыми функциями, которые позволяют восстановить данные с приемлемой точностью. Эти функции могут быть затем использованы в термодинамическом моделировании и других областях исследований. Существуют различные программы для обработки данных по термодинамическим свойствам веществ: для обработки низкотемпературной теплоёмкости [1], для высокотемпературных данных, измеренных, например, методом лазерной вспышки, а также существует ряд отдельных методов обработки данных по приращениям энтальпии, полученных классической калориметрией. Наполнение баз данных (ИВТАНТЕРМО, NASA и т.д.) новой информацией о различных веществах требует использования функций, соответствующих формату конкретной базы данных [2].

Разработана компьютерная программа, в основе которой лежит комбинирование алгоритмов аппроксимации для анализа экспериментально полученных данных по теплоёмкости и приращениям энтальпии веществ в конденсированной фазе. Объединение всех этапов обработки предоставляет возможность более полного анализа доступной информации разных типов. Программа имеет понятный пользовательский интерфейс и существует как в виде отдельного приложения, так и веб-приложения (с ограниченным функционалом). Приращения энтальпии аппроксимируются полиномом выбранной степени, который может быть использован для исследования зависимости теплоёмкости от температуры. В случае, если пользователь располагает данными по высокотемпературной теплоёмкости, они могут быть приближены комбинацией выбранных пользователем элементарных функций. Результаты могут быть экспортированы в форматы баз данных.

-
1. I. Roslyakova, B. Sundman, H. Dette, et al // Calphad 55 (2016) 165
 2. G.V. Belov, N.M. Aristova, I.V. Morozov, M.A. Sineva. // J. Math. Chem. 55 (2017) 1683