

СЕКЦИЯ ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

УДК 541.1: 541.66

БАЗА ДАННЫХ ПО ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИМ СВОЙСТВАМ КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ.

Г.Н. Роганов, С.В. Петрова-Куманская, З.А. Филиппенко,
Л.Г. Столярова, И.В. Гарист, В.Н. Емельяненко

Могилевский технологический институт

База термодинамических данных содержит сведения об энтальпиях образования, энтропиях и теплоемкостях в конденсированной и газовой фазах, энтальпиях парообразования при 298,15K и термодинамических функциях в идеально-газовом состоянии (298,15-1000K), полученных расчетом по молекулярным и спектральным данным, более 1200 кислородсодержащих органических соединений. Для каждого соединения приводятся все известные значения свойств с указанием их погрешностей и первоисточников информации, рекомендуемые значения, а также особенности методики получения указанных величин свойств.

Проблема достоверности и взаимной согласованности термодинамических характеристик, помещенных в справочную базу, решалась совместным использованием различных источников экспериментального и расчетного характера и проводилась на основе сопоставления значений, полученных различными методами, экспертных оценок и аддитивных расчетов.

С точки зрения пользователя следует отметить простой доступ к данным. Поиск интересующих пользователя соединений, определение наличия термодинамической информации о них и вызов информации о соединении на экран монитора или печать может производиться через алфавитный и формульный указатели или указатель по классам соединений.

База данных предназначена для проведения научных исследований, учебного процесса, технических и технологических расчетов и позволяет проводить термодинамический анализ физико-химических процессов.

УДК 541.1:547.3:547.5

ЭНТАЛЬПИЙНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ УГЛЕВОДОРОДОВ ЦИКЛОГЕКСАНОВОГО РЯДА.

В.Н. Емельяненко, Г.Н. Роганов

Могилевский технологический институт

Разработана методика аддитивного расчета свойств алициклических углеводородов с шестичленным циклом, учитывающая при классификации