

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

эффективных атомов их участие в образовании циклической системы молекулы и геометрической стереоизомерии.

Проведена параметризация аддитивной схемы.

По совокупности экспериментальных значений энтальпийных характеристик 63 веществ и реакций методом наименьших квадратов определены численные значения постоянных для расчета энтальпий образования (жидкость и газ) и испарения соединений при 298.15 К.

Выполнены массовые расчеты энтальпий образования жидких и газообразных углеводородов циклогексанового ряда и энтальпий их испарения с целью определения их прогнозных значений для соединений, не изученных экспериментально, выявления аномальных значений и согласования экспериментальных данных.

На основании аддитивных правил для ряда соединений из нескольких известных измерений величины свойства отобраны значения, наиболее полно удовлетворяющие общей закономерности его изменения в ряду углеводородов циклогексанового ряда.

Величины средних отклонений рассчитанных энтальпий образования и испарения от экспериментальных и средней погрешности экспериментальных данных являются величинами одного порядка; соответственно (298.15 К; кДж·моль⁻¹):

Энтальпии образования (жидкость): ± 1.12 и ± 1.45

Энтальпии испарения : ± 1.67 и ± 1.46

Энтальпии образования (газ): ± 0.70 и ± 0.75

Полученная база термодинамических данных может быть использована для научных и технологических расчетов.

УДК 536.7:547.314

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АЦЕТИЛЕНОВЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ

Э.С. Волкова, Г.Н. Роганов, А.Я. Гузиков

Могилевский технологический институт

Современные исследования молекулярных и спектральных характеристик ацетиленовых углеводородов дают возможность существенно повысить точность и достоверность значений термодинамических свойств ряда алкинов, а для некоторых соединений оценить их впервые.

Совокупности фундаментальных частот пентина-2 (1), гексина-2 (2), гептина-2(4), 4,4-диметилпентина-2 (5) и циклопропилацетилена (6) определены на основе изучения их экспериментальных ИК и КР спектров и расчета частот нормальных колебаний. При интерпретации колебательных спектров четырех конформеров гексина-3 (3) частоты валентных колебаний С-Н приняты по аналогии с гексином-2. Для соединений (1) - (5) взяты усредненные геометрические параметры на основе сопоставления структурных параметров родственных соединений, а для соединения