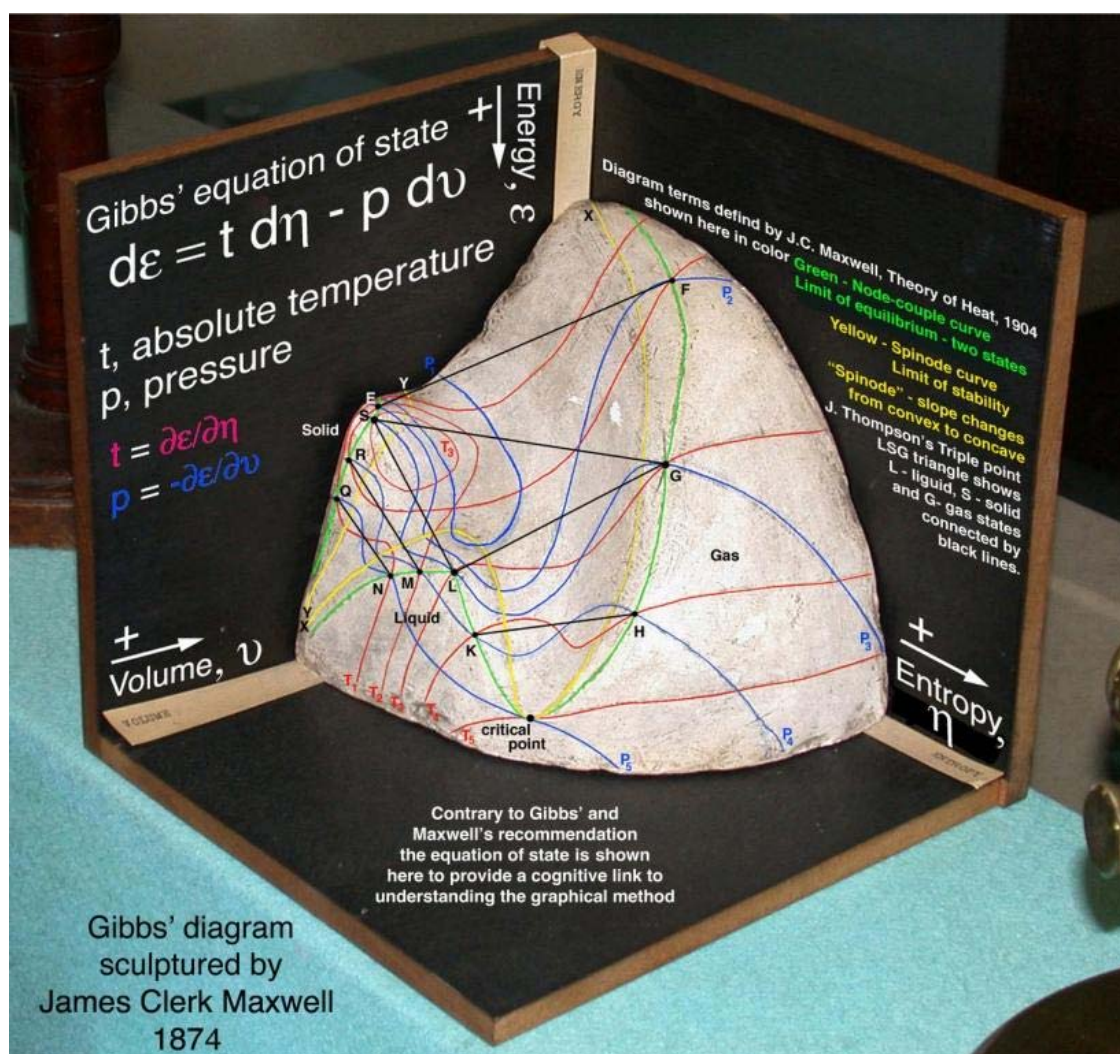


Термодинамические свойства веществ: базы данных и справочники

Для прогноза возможности и полноты протекания химических реакций в разных условиях необходимо знать величины термодинамических функций и констант, которые являются исходными данными для расчетов. Наиболее часто требуются стандартные энтальпии образования $\Delta H_f^\circ(298)$, стандартные энтропии $S^\circ(298)$, а также зависимости стандартных изобарных теплоемкостей от температуры $C_p^\circ(T)$. Эти величины приводятся в специальных справочниках и базах данных.

В данной статье перечислены некоторые справочники и базы данных по термодинамике, которые могут быть полезны как химику-исследователю, так и химику-технологу.



Термодинамические базы данных и справочники

1. NIST Chemistry WebBook.

Одна из крупнейших термодинамических баз данных. Содержит данные по свободным энергиям Гиббса и энтальпиям образования, значение стандартных энтропий, а так же зависимости теплоемкости от температуры. В базе имеются параметры фазовых переходов. В свободном доступе находится лишь часть данных.

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

2. Prof. Burcat's Thermodynamic Data.

Большая база по термодинамическим характеристикам свободных веществ. Содержит огромное количество органики в т.ч. экзотической, однако зависимость теплоемкости от температуры не приводится

<http://garfield.chem.elte.hu/Burcat/burcat.html>

База называется **Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with Updates from Active Thermochemical Tables** и дается в удобном формате .doc:

<http://garfield.chem.elte.hu/burcat/hf.doc>

3. NASA Thermo Build.

База данных термодинамических констант чистых веществ. Термодинамические характеристики (энтропия, энтальпия образования, приведенная энергия Гиббса, теплоемкость) вычисляются в широкой области температур. База полностью бесплатна

<http://cea.grc.nasa.gov/>

4. Organic compounds hydration properties database.

Он-лайновая бесплатная база данных термодинамических параметров гидратации органических соединений

<http://webdocs.asu.edu/>

5. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание / В.П. Глушко (ответственный редактор). 1978.

Один из самых больших русскоязычных термодинамических справочников. Издание состоит из четырех томов, каждый том - из двух книг: в первой описаны методы расчета, во второй книге помещены таблицы термодинамических свойств.

Для некоторых соединений информация доступна он-лайн:

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

6. NIST Online Databases.

<http://srdata.nist.gov/gateway/gateway?dblist=0>

7. FactSage Databases.

Сайт, содержит несколько баз данных фазовых диаграмм.

<http://www.crct.polymtl.ca/fact/documentation/>

8. База данных "Термические константы веществ".

Предлагаемое электронное издание основано на Справочнике "Термические константы веществ", создание которого было инициировано выдающимся советским конструктором ракетных двигателей Валентином Петровичем Глушко в начале 60-х годов в Академии Наук СССР.

<http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html/welcome.html>

9. Автоматизированная система термодинамических данных ИНВАНТЕРМО.

Термоцентр РАН в течение 30 лет проводит исследования в различных областях химической термодинамики. На их основе созданы фундаментальные справочные таблицы термодинамических свойств индивидуальных веществ в твердом, жидком и газообразном состояниях в широком интервале температур.

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

Ограниченная выборка (около 300) соединений из базы данных Ивтантермо:

<http://www.chem.msu.su/rus/handbook/ivtan/>

10. Journal of Physical and Chemical Reference Data (JPCRD) Monographs or Supplements.

<http://www.nist.gov/ts/msd/srd/monogr.cfm>

11. JANAF Thermochemical Tables. Third Edition. J. Phys. Chem. Ref. Data, Vol. 14, Suppl. 1, 1985.

12. The NBS Tables of Chemical Thermodynamic properties selected values for inorganic and C₁ C₂ organic substance.

Источники под номерами 8 и 9 являются международно-признанными базовыми термодинамическими справочниками

13. Ihsan Barin Thermochemical Data of Pure Substances, 3rd Edition, 2 Volume Set. 1997.

В книге содержатся данные по стандартным энтальпиям образования, стандартным энтропиям и зависимости теплоемкости от температуры в функциональной форме

14. **CRC Handbook of Chemistry and Physics, 90th Edition** / Editor: David R. Lide. Содержит таблицу термодинамических свойств индивидуальных веществ в качестве одного из разделов

15. **Lange's Handbook of Chemistry** / Editor: J.A. Dean. (15th Edition), online version, McGraw-Hill. 1999.

Справочник содержит огромную таблицу термодинамических данных. Очень много информации по органическим веществам, в т.ч. редким

16. **Диаграммы состояния двойных металлических систем, Справочник: в 3т./** Под общей редакцией Н.П. Лякишева. Москва. Машиностроение, 1996.

17. **Диаграммы плавкости солевых систем, Справочник: в 2т./** Под общей редакцией В.И. Посыпайко. Москва. Металлургия, 1977.

18. F.R. Bichowsky, F.D. Rossini **The thermochemistry of the chemical substances**. 2 ed. Reinhold Publishing Corporation. 1948.

19. M. L. Frenkel **Thermodynamics of Organic Compounds in the Gas State**. 2 volumes + computer disk Thermodynamics Research Center: College Station, 1994. Numerical data on heat capacity, entropy, enthalpy, Gibbs free energy for elements, inorganic compounds and C1 to C36 organics and organic radicals. Formula, name and CAS registry number indexes available.

20. D. D. Wagman, W.H. Evans, V. B. Parker, R. H. Schumm, R. L. Nutall, **Selected Values of Chemical Thermodynamic Properties**, U. S. Dept. Commerce National Bureau of Standards: Washington, D.C., 1982; also, Wagman, D. D.

21. D.R. Stull, E. F. Westrum, Jr. and G. C. Sinke, ***The Chemical Thermodynamics of Organic Compounds***, Wiley, New York, 1969.

22. R. A. Robie, B. S. Hemingway, J. R. Fisher, **Thermodynamic Properties of Minerals and Related Substances at 298.15 K and 1 Bar (105 Pascals) Pressure and at Higher Temperatures**, Geological Survey Bulletin 1452, U. S. Government Printing Office: Washington, D.C., 1978.

23. **Landolt-Bornstein Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology**. New Series, Group IV: Physical Chemistry, Springer: New York.

Данное издание состоит из многих томов, в частности:

- *Mechanical Properties*
 - *Densities of liquid systems : IV/1,8*
- *Electrical Properties*
 - *Static dielectric constants of pure liquids and binary liquid mixtures : IV/6*
- *Thermodynamic Properties*
 - *Heats of mixing and solution : IV/2*
 - *Thermodynamic equilibria of boiling mixtures : IV/3*
 - *Phase equilibria, crystallographic and thermodynamic data of binary alloys : IV/5*
 - *Thermodynamic properties of organic compounds and their mixtures : IV/8*
 - *High pressure properties of matter : IV/4*
 - *Liquid crystals : IV/7*

Некоторые из томов приведены ниже отдельными пунктами.

24. J. D'Ans, H. Surawski, C. Synowietz. Landolt-Börnstein **Densities of Binary Aqueous Systems and Heat Capacities of Liquid Systems**. **Densities of Liquid Systems** / Editor: K.N. Marsh, Vol. 1B. Springer. 1977.

25. G. Beggerow. Landolt-Börnstein **Heats of Mixing and Solution Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology** / Editor: K. Schafer, Vol. 2. Springer, 1976.

26. Landolt-Börnstein **Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. *Thermodynamic Properties of Organic Compounds and their Mixtures***, New Series, Group IV/8, Springer: New York, from 1995.

26/1. Z.-Y. Zhang, M. Frenkel, K.N. Marsh, R.C. Wilhoit **Thermodynamic Properties of Organic Compounds and their Mixtures** Volume IV/8, Subvolume a: **Enthalpies of Fusion and Transition of Organic Compounds** / Editor: K.N. Marsh. 1995.

26/2. R.C. Wilhoit, K.N. Marsh, X. Hong, N. Gadalla, M. Frenkel **Thermodynamic Properties of Organic Compounds and their Mixtures** Volume IV/8, Subvolume b: **Densities of Aliphatic Hydrocarbons: Alkanes** / Editor: K.N. Marsh. 1995.

26/3. R.C. Wilhoit, K.N. Marsh, X. Hong, N. Gadalla, M. Frenkel **Thermodynamic Properties of Organic Compounds and their Mixtures** Volume IV/8, Subvolume c: **Densities of Aliphatic Hydrocarbons: Alkenes, Alkadienes, Alkynes, and Miscellaneous Compounds** / Editor: K.N. Marsh. 1996.

26/4. R.C. Wilhoit, X. Hong, M. Frenkel, K.R. Hall **Thermodynamic Properties of Organic Compounds and their Mixtures** Volume IV/8, Subvolume d: **Densities of Monocyclic Hydrocarbons** / Editors: K.R. Hall, K.N. Marsh. 1997.

26/5. R.C. Wilhoit, X. Hong, M. Frenkel, K.R. Hall **Thermodynamic Properties of Organic Compounds and their Mixtures** Volume IV/8, Subvolume e: **Densities of Aromatic Hydrocarbons** / Editors: K.R. Hall, K.N. Marsh. 1998.

26/6. R.C. Wilhoit, X. Hong, M. Frenkel, K.R. Hall **Thermodynamic Properties of Organic Compounds and their Mixtures** Volume IV/8, Subvolume f: **Densities of Polycyclic Hydrocarbons** / Editors: K.R. Hall, K.N. Marsh. 1999.

27. Landolt-Börnstein **Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. *Thermodynamic Properties of Inorganic Materials***, New Series, Group IV/19, Springer. New York, from 1999.

27/1. **Thermodynamic Properties of Inorganic Materials compiled by SGTE. Part 1: Elements and Compounds from AgBr to Ba₃N₂** / Scientific Group Thermodata Europe, 1999. Springer.

27/2. **Thermodynamic Properties of Inorganic Materials compiled by SGTE. Part 2: Elements and Compounds from BeBr₂ to ZrCl₂** / Scientific Group Thermodata Europe, 1999. Springer.

27/3. **Thermodynamic Properties of Inorganic Materials compiled by SGTE. Part 3: Elements and Compounds from CoCl₃ to Ge₃N₄** / Scientific Group Thermodata Europe, 2000. Springer.

27/4. **Thermodynamic Properties of Inorganic Materials compiled by SGTE. Part 4: Elements and Compounds from HgH to ZnTe** / Scientific Group Thermodata Europe, 2001. Springer.

28. J. Dykyj, J. Svoboda, R.C. Wilhoit, M. Frenkel, K.R. Hall. Landolt-Börnstein **Vapor Pressure of Chemicals. Vapor Pressure and Antoine Constants for Hydrocarbon, and Sulfur, Selenium, Tellurium, and Halogen Containing Organic Compounds** / Editor: K.R. Hall, Vol. A. 1999.

29. J. Dykyj, J. Svoboda, R.C. Wilhoit, M. Frenkel, K.R. Hall. Landolt-Börnstein **Vapor Pressure of Chemicals. Vapor Pressure and Antoine Constants for Nitrogen Containing Organic Compound** / Editor: K.R. Hall, Vol. C. 2001.

30. J. Dykyj, J. Svoboda, R.C. Wilhoit, M. Frenkel, K.R. Hall. Landolt-Börnstein **Vapor Pressure of Chemicals. Vapor Pressure and Antoine Constants for Oxygen Containing Organic Compounds** / Editor: K.R. Hall, Vol. B. 2000.

31. M. Kh. Karapet'yants, M. L. Karapet'yants **Thermodynamic Constants of Inorganic and Organic Compounds**, (J. Schmorak, transl.), Ann Arbor – Humphrey Science Publishers, Ann Arbor, London, 1970.

А также русское издание:

М. Х. Карапетьянц, М. Л. Карапетьянц **Основные термодинамические константы неорганических и органических соединений**. Москва. Химия. 1968.

32. K. K. Kelly, E. G. King, *Contribution to the Data on Theoretical Metallurgy*.XIV.

Entropies of the Elements and Inorganic Compounds, Bur. Mines. Bull., 592, Washington, 1959.

33. J. D. Cox, G. Pilcher **Thermochemistry of Organic and Organometallic Compounds**, Academic Press: London, 1970.

34. J. D. Cox, D. D. Wagman, V. A. Medvedev **CODATA Key Values for Thermodynamics**, Hemisphere Pbl. Corp.: New York, 1989.

35. J. B. Pedley, R. D. Naylor, S. P. Kirby **Thermochemical Data of Organic Compounds**, 2nd ed., Chapman & Hall: London, 1986.

36. J. B. Pedley **Thermochemical Data and Structures of Organic Compounds**, Thermodynamic Research Center, Texas A & M Univ., College Station, TX, 1994.

37. D. R. Lide, H. V. Kehiaian **CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data**, CRC Press. Boca Raton, FL, 1994.

38. O. Knacke, O. Kubaschewski and K. Hesselmann, eds., **Thermochemical Properties of Inorganic Substances**, 2nd ed., Springer. Berlin, 1991.

39. G. J. Janz, **Thermodynamic Properties of Organic Compounds**, Revised Ed., Academic Press. New York, 1967.

40. I. Barin **Thermochemical Data of Pure Substances**, 2nd, VCH, Weinheim, 1992.

41. O. Kubaschewski, C. B. Alcock and P. J. Spencer **Metallurgical Thermochemistry**, Pergamon Press. Oxford, 1993.
42. C.L. Yaws, **Yaws' Handbook of Thermodynamic and Physical Properties of Chemical Compounds**. Knovel, 2003.
43. **International Critical Tables of Numerical Data, Physics, Chemistry and Technology (1st Electronic Edition)** / Editor: E.W. Washburn, Vol. 6. Knovel, 2003.
- International Critical Tables of Numerical Data, Physics, Chemistry and Technology (1st Electronic Edition)** / Editor: E.W. Washburn, Vol. 5. Knovel, 2003.
- International Critical Tables of Numerical Data, Physics, Chemistry and Technology (1st Electronic Edition)** / Editor: E.W. Washburn, Vol. 4. Knovel, 2003.
- International Critical Tables of Numerical Data, Physics, Chemistry and Technology (1st Electronic Edition)** / Editor: E.W. Washburn, Vol. 3. Knovel, 2003.
44. C.L. Yaws **Chemical Properties Handbook: Physical, Thermodynamic, Environmental, Transport, Safety, and Health Related Properties for Organic and Inorganic Chemicals**. 1 ed. McGraw-Hill. 1998.
45. C.L. Yaws **Handbook of Chemical Compound Data for Process Safety**. Library of Physico-Chemical Property Data. Elsevier. 1997.
46. **Краткий справочник физико-химических величин** / Под ред. А.А. Равделя и А.М. Пономаревой. Санкт-Петербург. Иван Федоров. 2003.
47. И.Д. Зайцев, Г.Г. Асеев **Физико-химические свойства бинарных и многокомпонентных растворов неорганических веществ** / Под. ред. К.П. Мищенко, А.А. Равделя. Москва. Химия. 1988.
48. **Свойства органических соединений. Справочник** / Под. ред. А.А. Потехина. Химия 1984.

49. А.Н. Киргинцев, Л.Н. Трушникова, В.Г. Лаврентьева **Растворимость неорганических веществ в воде. Справочник.** Ленинград. Химия. 1972.

50. В.Б. Коган, В.М. Фридман, В.В. Кафаров, **Равновесие между жидкостью и паром** (ч. 1). Наука. 1966.

51. В.Б. Коган, В.М. Фридман, В.В. Кафаров **Равновесие между жидкостью и паром** (ч. 2). Наука. 1966.

52. Д.Р. Стэлл **Таблицы давления паров индивидуальных веществ.** Иностранная литература. 1949.

53. **The Phase Equilibria Diagrams CD-ROM Database Version 3.1. 2005.**

База данных фазовых диаграмм двух- и многокомпонентным смесям с поиском по элементам

54. **ASM - International's Materials Society Binary Alloy Phase Diagrams System diagram and crystal structure.**

База данных бинарных фазовых диаграмм. Содержится информация о типах кристаллических структур отдельных фаз (группа симметрии и тип упаковки).

55. **О.А. Банных, П.Б. Будберг, С.П. Алисова и др.** Диаграммы состояния двойных и многокомпонентных систем на основе железа. Металлургия. 1986.

56. **Двойные и многокомпонентные системы на основе меди** / Под. ред. С.В. Шухардина. Наука. 1979.

57. А.Б. Здановский, Е.И. Ляховская, Р.Э. Шлеймович и др. **Справочник экспериментальных данных по растворимости многокомпонентных водно-солевых систем.** ГНТИ Химической литературы. 1954.
58. В.Б. Коган, В.М. Фридман, В.В. Кафаров **Справочник по растворимости.** Изд-во АН СССР.1962.
59. А.Н. Киргинцев, Л.Н. Трушникова, В.Г. Лаврентьева **Растворимость неорганических веществ в воде.** Химия.1972.
60. **Физико-химические свойства окислов. Справочник.** / Под. ред. В.Г. Самсонова. Металлургия. 1978.
61. **Термодинамические свойства неорганических веществ. Справочник.** / Под. ред. А.П. Зефирова. Атомиздат. 1965.
62. D. Mackay, W.Y. Shiu, K-Ch. Ma, S.Ch. Lee **Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. vol. 1-4.** 2009.
63. **Thermophysical Properties of Matter. Purdue University. Thermophysical Properties Research Center.** 14 volumes IFI/Plenum: New York, 1970-1979.
64. **TRC Thermodynamics Tables. Hydrocarbons. Thermodynamics Research Center.** Multi-volume Texas A&M University.

65. L. V. Gurvich, I. V. Veyts and C. B. Alcock. **Thermodynamic Properties of Individual Substances**. 4th edition. 5 volumes (each in 2 pts) Hemisphere Publishing Co. New York, 1989.

66. Н.Б. Варгафтик **Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей**. Москва. Наука. 1972.

по материалам [Xumuk.ru](http://xumuk.ru) и [Chemistry-chemists.com](http://chemistry-chemists.com)

Приведенный список ни в коем случае не претендует на полноту. Если вы хотите поделиться информацией об источниках термодинамических данных, не вошедших в данную статью, ссылку или информацию можно оставить в темах:

Он-лайн справочники <http://forum.xumuk.ru/index.php?showtopic=6793&st=0>

на форуме *Xumuk.ru*,

а также

Диаграммы плавкости (состояния), растворимость и др. свойства

<http://chemistry-chemists.com/forum/viewtopic.php?f=15&t=33&start=0>

на форуме журнала.

Дополнения и исправления к данному списку будут доступны в упомянутых выше темах.