

ОПЫТ СОЗДАНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ КОЛЛЕКЦИИ ТЕРМИЧЕСКИХ КОНСТАНТ ВЕЩЕСТВ

Белов Г.В.* , Бергман Г.А.* , Иориш В.С.* , Левашов П.Р.* ,

Покровский Б.И.** , Табунов М.М.** , Юнгман В.С.*

* - ИТЭС ОИВТ РАН, Термоцентр им. В.П. Глушко РАН, г. Москва

** - Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва

Электронная коллекция "Термические константы веществ" разработана на основе хорошо известного справочного издания (Термические константы веществ: Вып. 1-10 / Отв. ред. В.П.Глушко. - М.: ВИНТИ, 1965-1982.), которое было создано под научным руководством выдающегося конструктора ракетных двигателей академика В.П. Глушко. Подготовка этого издания проводилась группой из восьмидесяти экспертов в области химической термодинамики. Работа продолжалась около двадцати лет и привела к публикации справочного издания, содержащего сведения о 26976 веществах, образованных практически всеми химическими элементами.

Создание электронной коллекции должно обеспечить:

- 1) доступность важной химической информации широкому кругу исследователей независимо от места их пребывания;
- 2) возможность включения новых данных и автоматизированного согласования новых данных с принятыми;
- 3) возможность оперативного устранения опечаток и неточностей;
- 4) эффективный поиск данных с использованием современной поисковой системы, предусматриваемой в структуре электронного издания;
- 5) возможность автоматического использования справочных данных в различных программных системах обработки экспериментальных данных и термодинамического моделирования;
- 6) практически неограниченные возможности использования уникального массива фундаментальных характеристик молекул и химических соединений в различных формах дистанционного обучения.

В состав электронной коллекции входит следующая информация о термических константах.

- энтальпия образования при 0 К из элементов в стандартных состояниях ($\Delta H^{\circ}f_0$),
- энтальпия образования при 298,15 К из элементов в стандартных состояниях ($\Delta H^{\circ}f_{298,15}$),
- изобарный потенциал образования при 298,15 К из элементов в стандартных состояниях ($\Delta G^{\circ}f_{298,15}$),
- энергия диссоциации газообразных веществ на атомы или энергия атомизации кристаллических веществ при 0 К (D_0),
- изменение энтальпии между 0 К и 298,15 К ($H^{\circ}_{298,15} - H^{\circ}_0$),
- энтропия при 298,15 К ($S^{\circ}_{298,15}$),
- теплоемкость при постоянном давлении при 298,15 К ($C_p^{\circ}_{298,15}$), в том числе параметры тройных точек,
- температура и изменение энтальпии при полиморфных превращениях,

- температура и изменение энтальпии при плавлении кристаллических веществ,
- температура кипения и изменение энтальпии при испарении в точке кипения,
- изменение энтальпии при испарении или сублимации при 298,15 К, 0 К или при других температурах,
- давление пара при температурах фазовых переходов (P), или давление для тройной точки,
- изменение энтропии при фазовых переходах (ΔS),
- критические давление и температура.

В тех случаях, когда это позволили имеющиеся в литературе данные, для принятых в констант были оценены погрешности, которые также включены в состав электронной коллекции.

Кроме того, в Справочнике содержатся таблицы литературных ссылок и список литературы. Эти сведения также содержатся в базе данных. В таблицах литературных ссылок приведены номера ссылок на работы, в которых измерялись значения рассматриваемой термической константы или величин, необходимых для ее вычисления, а также важнейшие работы, в которых эти данные анализируются. В таблицах литературных ссылок отдельно указаны источники информации о значениях

- энтальпии образования (ΔH_f°),
- изобарного потенциала образования (ΔG_f°),
- энергии диссоциации (D_0),
- термодинамических функций (S , C_p , $H - H^\circ$),
- температуры фазовых переходов,
- изменений энтальпии при фазовых переходах.

Наконец, в состав электронной коллекции включены три приложения Справочника, в которых приводятся дополнительные сведения для некоторых веществ:

1. симметрия и структурные типы кристаллических веществ;
2. потенциалы ионизации веществ;
3. критические постоянные веществ.

Приложение 1 (симметрия и структурные типы кристаллических веществ) содержит следующие сведения

- формула вещества;
- сингония;
- класс симметрии;
- пространственная группа;
- структурный тип;
- ссылки на литературу.

Приложение 2 содержит информацию о потенциалах ионизации некоторых веществ, рассматриваемых в соответствующем выпуске, с указанием литературных источников.

В приложении 3 приведены сведения, относящиеся к критической точке (T_{cr} , P_{cr} , V_{cr}) для некоторых веществ, рассматриваемых в соответствующем выпуске. Сведения об источниках литературы также приводятся.

Для хранения, редактирования и ввода информации из печатной версии была спроектирована и создана реляционная база данных и разработан пользовательский интерфейс.

В процессе создания электронной коллекции были решены специфические проблемы, связанные с некоторыми особенностями представления данных в его печатной версии.

Так, например, в таблицах принятых значений Справочника наряду с величинами, непосредственно принятыми на основании анализа литературных данных, приводится также ряд величин, вычисленных на основании этих принятых значений. С целью выделения вычисленных величин они набраны курсивом. В электронной коллекции для хранения этих сведений в базе данных предусмотрены соответствующие поля. Номер ссылки на работу, определившую выбор принятого значения, в таблицах литературных ссылок выделен полужирным шрифтом. Если выбор основывался на нескольких работах, то полужирным шрифтом выделены номера ссылок на все эти работы. Для того чтобы учесть эту особенность, в состав соответствующих таблиц базы данных также были включены дополнительные поля.

Еще одна проблема связана с необходимостью отображения на экране сведений о структурном типе вещества из Приложения 1. Сложность заключается в том, что информация такого рода включает в себя некоторые символы, не входящие в состав наиболее употребительных шрифтов: верхние и нижние индексы, символ “надчеркивания” для обозначения отрицательного индекса. Для решения этой задачи было предложено хранить информацию о пространственных группах в формате HTML. Чтобы упростить процедуру переноса сведений из печатной версии справочника в базу данных, подготовлена реляционная таблица GRSYM, в которой для 230 различных пространственных групп содержатся данные о сингонии, классе симметрии, структурном типе. Таким образом, для переноса информации из Приложения 1 печатной версии справочника в базу данных достаточно указать формулу вещества и его состояние, а затем выбрать соответствующую строку в таблице GRSYM.

Для того чтобы иметь возможность быстро выполнять самые разнообразные выборки информации из электронной коллекции, химическая формула вещества должна быть представлена не только в традиционном виде, но и в форме, обеспечивающей эффективное выполнение SQL-запроса. С целью обеспечения надлежащего способа представления информации был разработан анализатор химических формул. Анализатор преобразует химическую формулу в упорядоченную структуру, которая содержит сведения о химических элементах, образующих молекулу, и количество атомов каждого из этих элементов в молекуле. Побочным фактором применения анализатора оказалась возможность проверки формул веществ в базе данных.

Internet-версия электронной коллекции доступна по адресу www.chem.msu.ru/rus/termo.

Работа выполняется при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, гранты 98-07-91022э, 01-07-90094.

Development of Electronic Collection on Thermal Constants of Substances

Belov G.V. *, Bergman G.A. *, Iorish V.S. *, Levashov P.R. *,

Pokrovsky B.I. **, Tabunov M.M. **, Yungman V.S. *

* - Glushko Thermocenter RAS, ITES, Moscow;

** - Chemical Department of Moscow State University.

An information system “Thermal Constants of Substances” based on the printed version of the corresponding reference book (Thermal Constants of Substances: Vol. 1-10 / Chief Ed. V.P. Glushko.- M.: VINITI, 1965-1982) has been developed. The work over the printed version of the reference book was accomplished by a group of more than 80 experts in field of chemical

thermodynamics. Recently a new edition of the reference book appeared (Thermal Constants of Substances: Vol. 1-8 / Ed. V.S. Yungman. - NY: Wiley, 1999). The reference book presents values of the thermal constants for 26976 substances. The list of references contains more than 51500 entries.

Development of the information system is aimed to solve the following problems

- to make the important chemical information available for a wide number of researchers all over the world;
- to make it possible data editing in the reference book or enter the new data;
- to provide possibility of a quick search of a substance or a group of substances according to some criteria;
- to provide easy access to the data in the reference book for various specialized programs and ensure the data exchange among chemistry-oriented databases;
- to enhance the quality of distant education by providing a unique data on thermal constants of substances.