

МОДЕЛЬ ДЛЯ ОЦЕНКИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СОЕДИНЕНИЙ

Шульц О.В.

РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск, Россия

o.v.shults@vniitf.ru

В настоящее время существует большое количество баз данных и справочников по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ, однако остается также и большое количество химических соединений, термодинамические свойства которых не описаны или описаны недостаточно.

Решение проблемы недостающих данных по свойствам соединений может быть получено посредством обобщения уже имеющихся данных и построения на их основе моделей количественных соотношений структура–свойство. В настоящей работе предлагается такая модель, использующая подход фрагментарных дескрипторов и обобщающая данные по теплоёмкостям, энтальпиям образования и энтропиям соединений. Модель позволяет получать оценки значений термодинамических функций для произвольных соединений, составленных из фрагментов, полученных при анализе базы данных термодинамических свойств индивидуальных веществ.

Расчёты, выполненные по модели, показали хорошее согласие расчётных значений со справочными. Относительная ошибка при оценке энтальпии находится на уровне 5%, при оценке энтропии на уровне 2%, а изобарной теплоёмкости на уровне 1%.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 17-01-00873.