

О НОВОМ ИЗДАНИИ "СПРАВОЧНИКА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН"

И.Л. Ходаковский, О.А. Девина, Э.И. Сергеева, И.В. Чернышева, М.Н. Приемышева *

Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, г. Москва

* Университет "Дубна", г. Дубна, Московская обл.

Вестник ОГТГН РАН № 5 (15) 2000 т.1

URL: http://www.scgis.ru/russian/cp1251/h_dggms/5-2000/term20

Первое издание "Справочника термодинамических величин" было выпущено Г.Б. Наумовым, Б.Н. Рыженко и И.Л. Ходаковским [1] в Советском Союзе в 1971 г. и переведено на английский язык в США в 1974 г. [2]. Этот справочник был предназначен для использования специалистами наук о Земле. Величины термодинамических свойств минералов и многих других кристаллических веществ, а также значения свободных энергий образования Гиббса для ионов и недиссоциированных молекул ряда кислот и растворенных газов в водных растворах при температурах до 350°C позволяли проводить термодинамические расчеты констант равновесия для большого числа реакций в гидротермальных системах.

Новое издание справочника подводит итог систематической работы ряда сотрудников ГЕОХИ РАН в кооперации с сотрудниками других институтов РАН, МГУ, а в последние годы университета "Дубна", по сбору и анализу литературных данных по термодинамике многих химических систем. Параллельно проводились экспериментальные определения термодинамических свойств ряда минералов и частиц в водных растворах (простые ионы, а также комплексные ионы и молекулы), главным образом, методами калориметрии и растворимости. Результаты этих исследований опубликованы в статьях, а часть из них вошла, в качестве принятых величин, в фундаментальный справочник АН СССР "Термические константы веществ"[3] и другие справочные издания [4, 5].

Предполагается, что справочник будет состоять из трех томов, каждый из которых будет содержать несколько частей.

Первый том будет содержать *основные результаты экспериментальных исследований* термодинамики химических систем, включая термодинамические свойства : (1) неорганических и простейших органических индивидуальных веществ, а также химических реакций с их участием; (2) частиц в водных растворах (простые ионы, а также комплексные ионы и молекулы); (3) бинарных водных растворов; (4) газовых смесей; (5) твердых растворов.

В качестве главных источников информации для этого тома использованы:

1. Рукописная картотека термодинамических свойств соединений, составленная И.Л.Ходаковским (систематически велась до 1985 г., ~12 тысяч карточек);
2. Картотека рефератов ВИНТИ (с 1985 по 1994 г., ~ 10 тысяч карточек);

3. Коллекция оттисков опубликованных статей;

4. Компьютерная база библиографических и экспериментальных данных "ДиаНИК-win".

В справочнике впервые будут систематизированы экспериментально изученные химические системы и химические реакции, что позволит не только проводить локальное и глобальное согласование термодинамической информации, но и использовать принцип обратной связи между алгоритмами согласования и расчета равновесного состава многокомпонентных систем любого фазового состава.

Второй том будет содержать *принятые значения и обоснование их выбора* для некоторых химических систем. Выбор рассмотренных химических систем определялся текущими задачами, которые решались авторами в рамках приложения методов химической термодинамики к изучению условий образования минералов в различных природных и техногенных системах. Будут рассмотрены термодинамические свойства неорганических и простейших органических индивидуальных веществ, химических реакций, частиц водных растворов (простые ионы, а также комплексные ионы и молекулы) и бинарных водных растворов. Первая часть второго тома справочника будет содержать результаты анализа опубликованных данных экспериментальных исследований однокомпонентных и двухкомпонентных химических систем.

Все принятые термодинамические величины согласованы с международными рекомендациями КОДАТА, ИЮПАК, МАГАТЭ, ЕС а также сопоставлены с рекомендациями фундаментальных справочных изданий.

Третий том будет содержать *таблицы термодинамических свойств* минералов и важнейших минералообразующих веществ, включая частицы в водных растворах, в широких интервалах температур и давлений, табулированные в компьютерной системе "ДиаНИК-win".

В 2001 году планируется опубликование первых частей указанных томов, содержащих термодинамическую информацию по одно- и двухкомпонентным системам. Параллельно готовятся к публикации части, содержащие данные для трех-, четырех-, пятикомпонентных и более сложных систем.

1. Наумов Г.Б., Рыженко Б.Н., Ходаковский И.Л. Справочник термодинамических величин. М.: Атомиздат. 1971. 240 с.
2. Naumov, G.B.; Ryzhenko, B.N.; Khodakovskiy, I.L. Handbook of Thermodynamic Data (PB-226

- 722/7GA) (NTIS: Springfield, Va.), 1974. 373 pp.
3. Термические константы веществ. Под ред. В.П. Глушко. Выпуски III-X, М.: АН СССР, 1968-1981 гг.
 4. Fuger J., Khodakovsky I.L., Sergeyeva E.I., Medvedev V.A., Navratil J.D. The Chemical Thermodynamics of Actinide Elements and Compounds: Part 12. The Actinide Aqueous Inorganic Complexes; Vienna: International Atomic Energy Agency, 1992, 224 p.
 5. CODATA International Geothermodynamic Tables. Editors: I.L.Khodakovsky, E. F. Westrum, Jr. and B.S. Hemingway. 1995. 276 p.