ЛАБОРАТОРИЯ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ

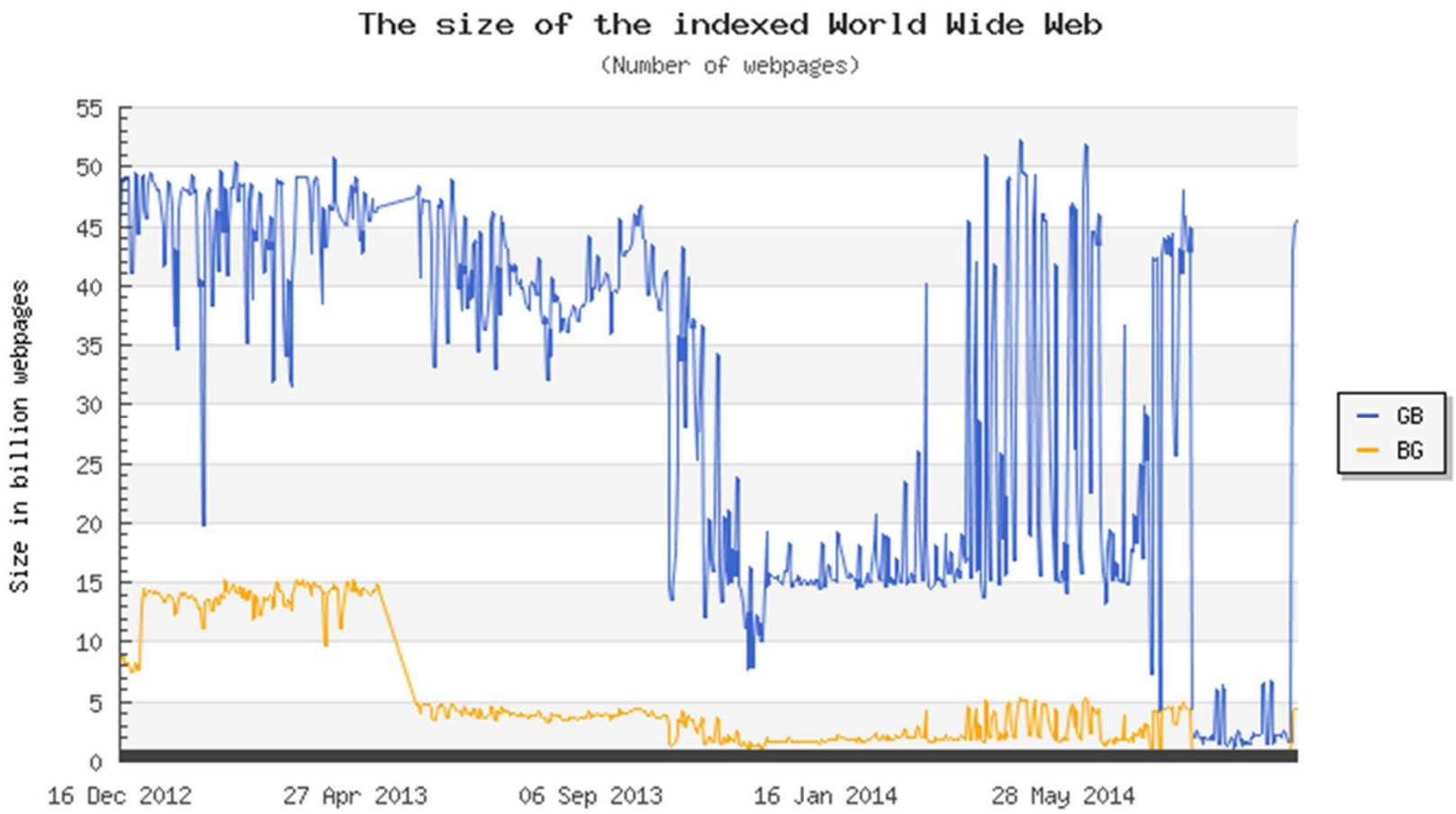
МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени М.В. ЛОМОНОСОВА

Термодинамика в Глобальной Сети: текстовый поиск и базы данных

Александр Дзубан

Научный семинар лаборатории химической термодинамики, 17 дек 2014

Видимый интернет



http://www.worldwidewebsize.com/

Невидимый интернет

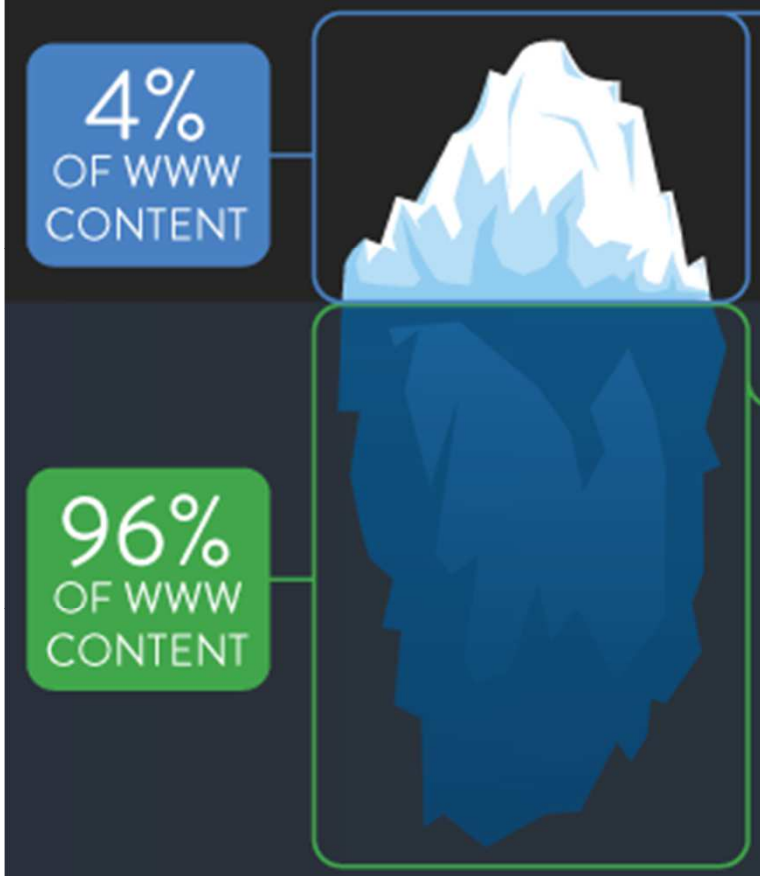
(в широком смысле)

множество веб-страниц Всемирной паутины, не индексируемых поисковыми системами

- Информация в базах данных
- Защищенная паролями и т.п.
- Запрещенная к индексированию владельцами
- Страницы, формируемые динамически
- Информация в нетекстовых файлах
- (Свежая, поэтому еще не проиндексированная)

WHAT IS THE DEEP WEB?

Put simply, it is the part of the Internet that is hidden from view.



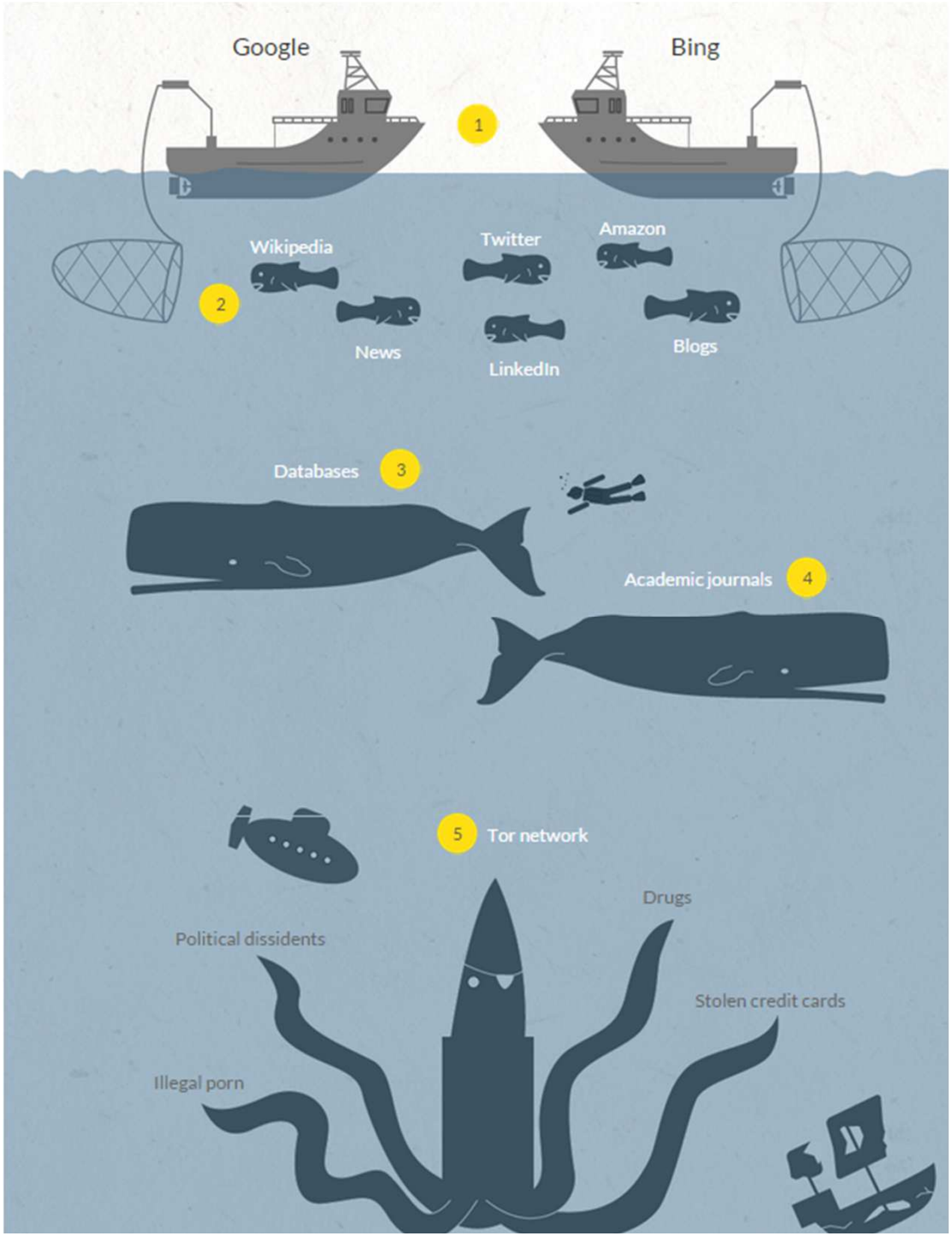
SURFACE WEB

Also known as the 'Visible Web', it is content that can be found using search engines such as Google or Yahoo. It is under constant surveillance by the government.

DEEP WEB

Also known as the 'Invisible Web', it is the content that cannot be indexed by search engines. And it is hard to keep track of.

The Deep Web is estimated to be **500X** the size of the Surface Web.


Google
Bing
1
Wikipedia
Twitter
Amazon
2
News
LinkedIn
Blogs
Databases
3
Academic journals
4
5
Tor network
Drugs
Political dissidents
Stolen credit cards
Illegal porn

Поиск научной информации

- Универсальные поисковые средства
  и вспомогательные инструменты
- Научные журналы
  (издательства, агрегаторы; списки журналов)
- Нежурнальные рецензируемые публикации
  (конференции, диссертации, книги)
- Репозитории электронных публикаций
- Вторичные источники научной информации
- Патентные базы данных
- Нормативные документы
  (MSDS, ГОСТ, СанПиН)
- Справочные базы данных

Универсальные поисковые средства

- Google
- Yandex
- Yahoo!
- Bing
- Wikipedia

Весьма подробный (но не оперативно обновляемый) **список национальных и специализированных поисковых средств:** Search Engine Colossus

Метапоиск

- Search
- 1Banana Metasearch
- Mamma Metasearch - The Mother of All Search Engines
- AllOneSearch
- Nigma
- MetaCrawler
- www.iboogie.tv

полезны тогда, когда необходимо быстро извлечь хоть какую-нибудь информацию по достаточно широкой тематике,- эти средства позволяют проводить одновременный поиск сразу в нескольких базах данных

Научные поисковые системы

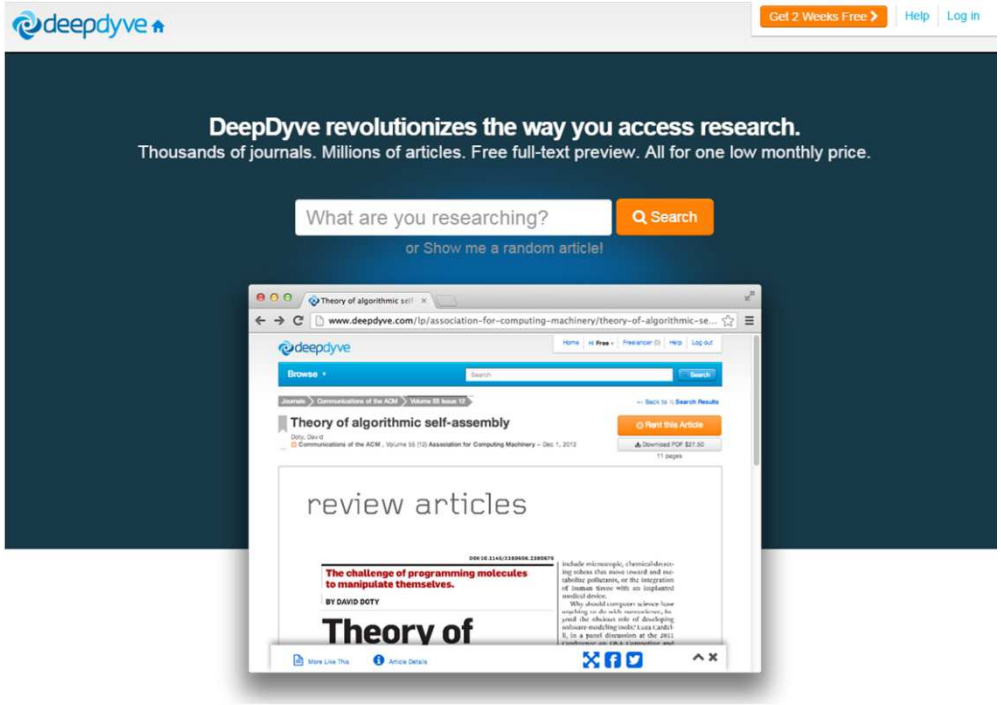
- *BASE (Bielefeld Academic Search Engine)* — научный интернет-поисковик международного проекта Open Archives Initiative, сотрудничает с европейским научно-информационным проектом DRIVER
- *Google Scholar* — поисковая система статей, патентов, журналов, рецензий, отзывов и т.д.
- *Microsoft Academic Search* — поисковик по научным публикациям в «глубоком вебе» с набором дополнительных сервисов от Microsoft. На сегодняшний день вы можете найти при его помощи около 40 млн. публикаций по всем основным направлениям науки, исследований и инженерно-технологических разработок. Еженедельно база пополняется примерно на 2000 публикаций.
- *RefSeek* — поисковая система для студентов и ученых.
- *Scholar* – отличный российский поисковик научных публикаций, авторефератов и диссертаций по всем областям науки.

WorldWideScience

Второе рождение самого популярного мультипортала по «Глубокому научно-техническому вебу». Теперь поиск по всем ведущим мировым научно-техническим базам ведется на основе *федеративного поиска от компании DeepWeb*. Кроме того, поиск по всем базам сразу же переводится на 10 основных языков интернета, включая русский.

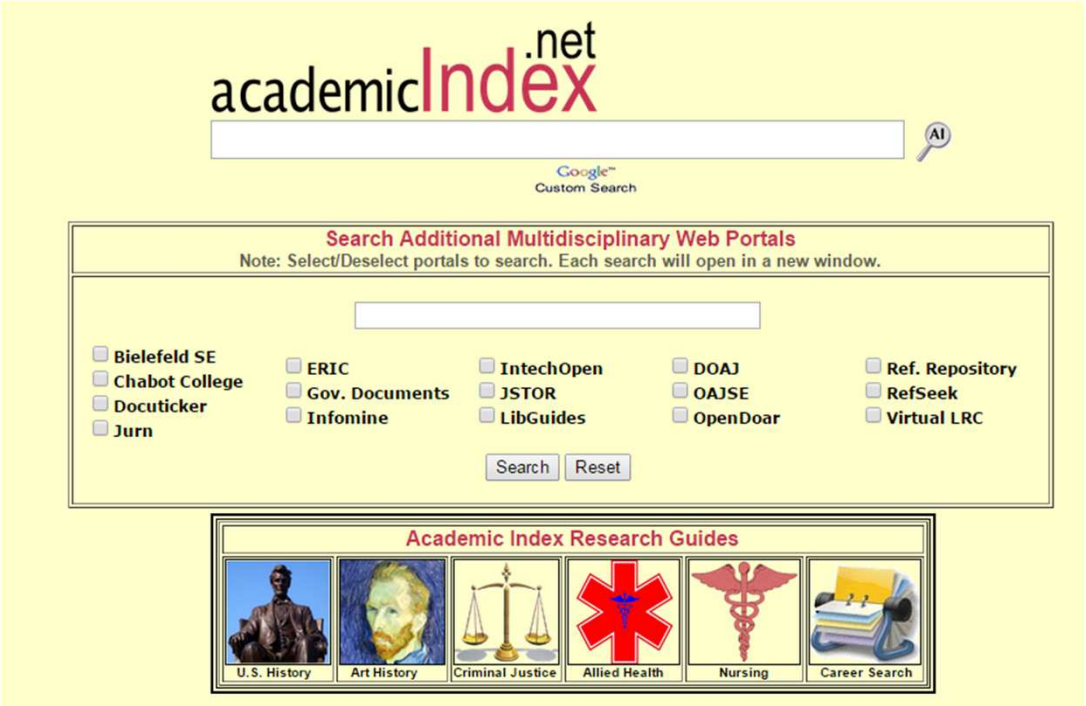
DeepDyve

Не имеющая аналогов по применяемой технологии (базируется на распознавании образов), охвату (включает большинство наиболее качественных и ведущих издательств) и предметным областям (от бизнеса до биотехнологий) система крайне дешевой аренды статей по всем ведущим направлениям исследований и разработок по ключевым секторам бизнеса. По оценкам является принципиально новым словом в интернет поиске, deep web.



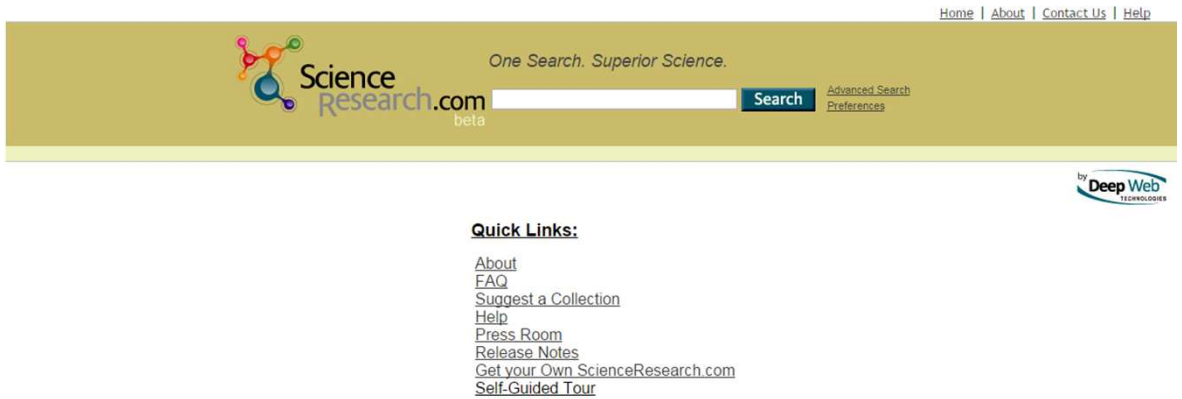
Academic Reference and Research Index

Научный мета интернет-поисковик, поддерживаемый доктором Майклом Бэллом и предоставляющий доступ к 137000 научных источников



ScienceResearch

Поисковик по научной и технологической информации, базирующийся на технологии «глубокого веба». Оперирует в отличие от большинства поисковиков не с индексированными страницами, а с базами данных и коллекциями. Ищет по 300 самым авторитетным и обширным научно-техническим и технологическим коллекциям, которые включают в себя архивы, сервера, базы данных, не доступные для популярных поисковых систем: Elsevier, Highwire, IEEE, Nature, Taylor and Francis и др., а также в открытых базах данных: Directory of Open Access Journals, Library of Congress Online Catalog, Science.gov и Scientific News. Полные тексты статей из журналов доступны только для подписчиков.



Science.gov

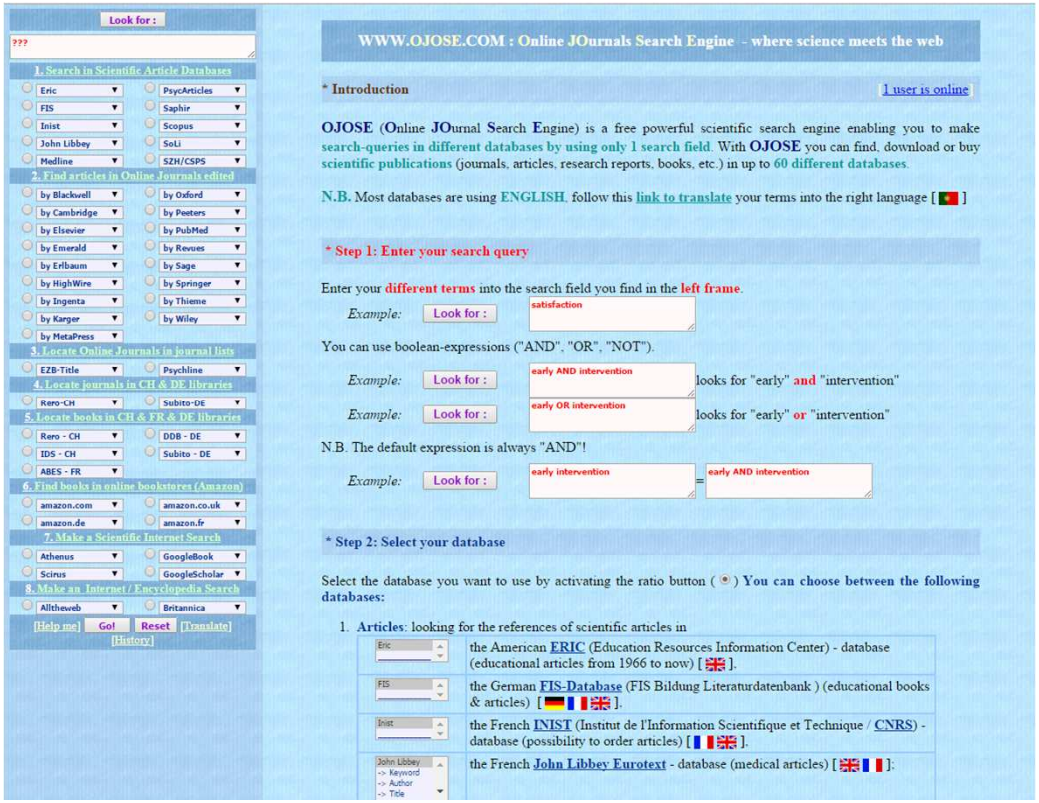
Поиск по 40 крупнейшим базам данных и 2000 сайтов, содержащим свыше 200 млн документов, статей и отчетов о научно-исследовательских и опытно-конструкторских работах правительственных учреждений США. Поисковик работает на основе технологий глубокого веба.

Wolfram Alpha

Комплексная поисковая система, осуществляющая лингвистический анализ, математические рассчеты любого уровня и вывод информации во всех современных форматах

OJOSE: Online JOurnal Search Engine

Мощная поисковая машина научной литературы, позволяющая делать одновременный поиск в различных базах данных крупных издательств



Каталоги и метасайты

- Open Directory

  самый большой в мире тематический каталог. Авторами и рецензентами каталога являются энтузиасты - знатоки Интернета.
- Chemistry: A Guide to Web Resources

  Компактный тематический каталог, содержащий ссылки только на самые важные информационные ресурсы.

- Data and Property Calculation Websites

  Термодинамические ресурсы WWW (поддерживается Prof. G. Ali Mansoori, Depts. of Bioengineering, Chemical Engineering and Physics, UIC)

Открытый доступ

- OAIster — Портал, предлагающий известные инициативы открытого доступа к различным материалам.
- OALib — Open Access Library
- Open Access Journals Search Engine (OAJSE)
- Open-Access-Netzwerk-Repositorien — Поиск в сети репозиториев открытого доступа с помощью поисковой платформы, разработанной в рамках проекта Немецкого научно-исследовательского объединения "Сеть открытого доступа" для поиска документов в репозиториях, сертифицированных объединением "Немецкая инициатива по созданию информационных сетей".
- ROAR (Registry of Open Access Repositories) — цель проекта - поддерживать доступ к научным публикациям, предоставляя информацию о состоянии репозиториев по всему миру.
- Science-advisor.net — поиск по статьям в свободном доступе и онлайн-форум для научных дискуссий.

Агрегаторы

информационные центры, содержащие периодические издания нескольких издательств

- Национальные и международные многодисциплинарные:
  - J-STAGE (Япония)
  - SciELO (Латинская Америка)
- Тематические
  - PubMed Central (био-, медицина, США)
- Коммерческие многодисциплинарные
  - EBSCOhost
  - eLIBRARY.RU

Агрегаторы

- EBSCOhost - базы данных компании ЭБСКО. На платформе расположены 14 полнотекстовых многопрофильных баз данных различной тематики. Поиск может проводиться как по каждой базе в отдельности так и по всем сразу. Интерфейс поисковой системы на русском языке.
- *J-STAGE* — мультидисциплинарный национальный японский архив научной периодики, содержит практически все современные научные журналы Японии (публикации на английском и японском языках). К очень многим журналам предоставляется бесплатный доступ.
- *Airiti* — китайский научный контент в цифровом формате:
  - *Airiti Scholar* (400 журналов на английском языке, изданных в Тайване и в других странах);
  - *Taiwan Electronic Periodical Services (TEPS)* (900 периодических изданий, изданных в Тайване, по различным темам);
  - *CEPS* (полные тексты журналов, изданных в Китае и в Тайване, по естественным, общественным, прикладным наукам и медицине);
  - *Airiti Books (ABC)* (более чем 30000 китайских книг).

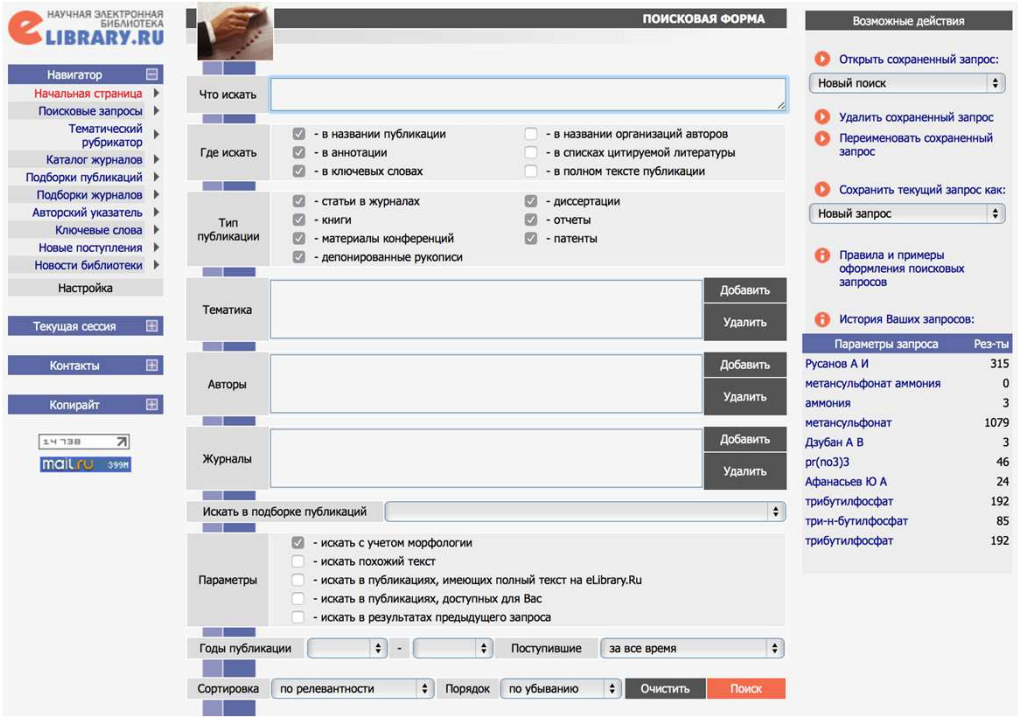
Агрегаторы

- *SciELO* — Scientific Electronic Library Online - научная электронная библиотека полных текстов научных журналов Аргентины, Бразилии, Чили, Колумбии, Коста Рики, Кубы, Испании. Мексики, Венесуэлы.
- *Journals Online* - доступ к журналам развивающихся стран (Африка, Филиппины, Вьетнам, Шри Ланка, Бангладеш, латинская Америка, Монголия, Непал
- *REDALYC* — научные журналы стран Латинской Америки, Карибского бассейна, Испании и Португалии.

- *Полнотекстовый архив западных научных журналов*
  Консорциум НЭИКОН реализовал в рамках государственного контракта с Министерством образования и науки проект по размещению полнотекстовых архивов (начиная с первого номера) ведущих западных научных журналов на Российской платформе НЭИКОН.

eLibrary – Научная электронная библиотека

Крупнейший информационный портал с текущей отечественной библиографией. Содержит оглавления 6500 российских журналов, для 2050 есть полнотекстовые копии (и более 1000 журналов в открытом доступе). Глубина ретроспекции – с 1995–1997 гг., но для многих журналов – только за последние несколько лет. Возможен поиск по тематическому рубрикатору, авторскому и предметному указателям



Патенты

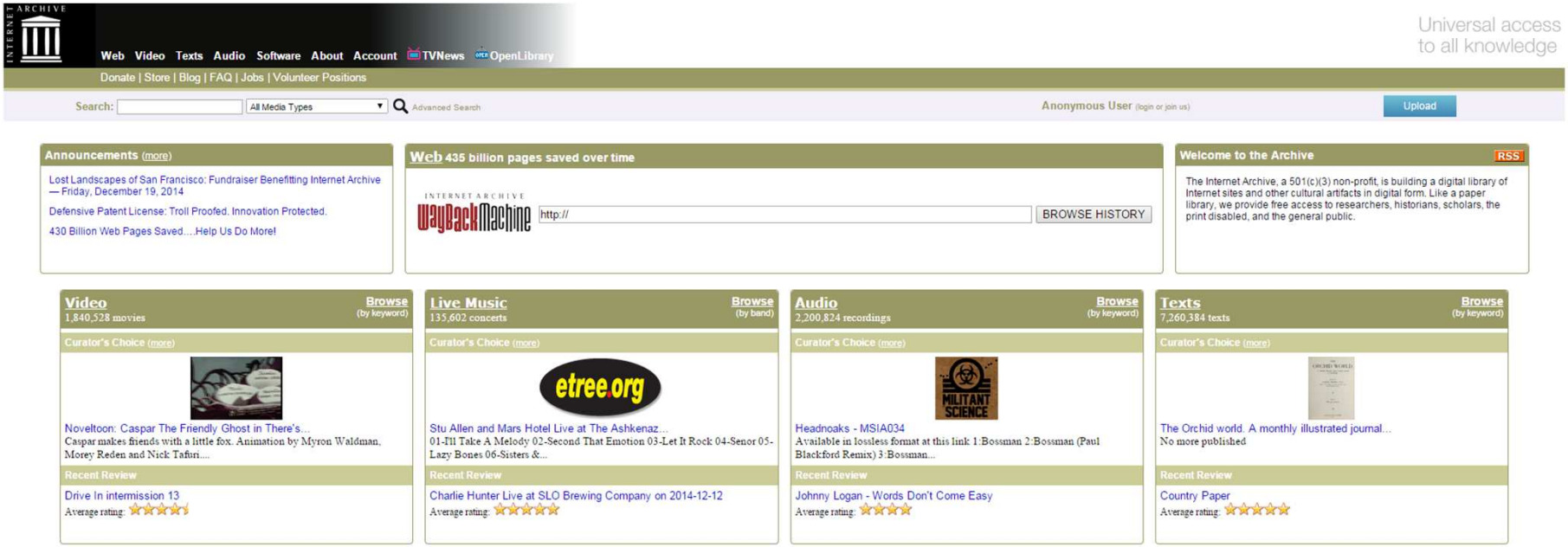
- *Espacenet* — европейский ресурс, обеспечивающий доступ к патентным базам данных мира, включая Евразийское патентное ведомство и Роспатент.
- *Patent Searching and Inventing Resources* — одна из самых мощных, быстрых и легких в использовании патентных поисковых систем.
- *PRIORSMART* — Ресурс, обеспечивающий доступ к более 60 патентным базам данных. Позволяет проводить поиск по названию, реферату, формуле изобретения, имени владельца патента, имени изобретателя, описанию и МПК. Интерфейс на испанском, английском, французском, немецком, русском, японском, китайском и корейском языках.
- *Патентная база компании QuestelL* — Крупнейший в мире патентный фонд, содержащий свыше 50 миллионов документов 80 стран и международных патентных ведомств; максимально полная информация о родственных патентах (patent family), включая их юридический статус; система поиска и визуализации патентной информации.

Архивы и библиотеки

- *The Free Library* - самая большая общедоступная база книг и статей по всем направлениям науки, техники и бизнеса с 1995 года до сегодняшнего дня.
- *JSTOR* — Журнальные архивные коллекции, включающие в себя научные материалы, опубликованные в более чем в 700 самых высококачественных академических журналах по гуманитарным, общественным и естественным дисциплинам, а также монографии и другие материалы
- *World eBook Library* — электронная книжная платформа, включающая более 3 млн полнотекстовых источников (монографий, научных отчетов, официальных документов и др.) и 23 000 аудиокниг 219 000 издателей во всех областях знаний.
- *Научно-информационный портал twirpx* — большое собрание различного научного материала, которое может быть востребовано студентами различных стран СНГ.

Internet Archive

Собирает копии веб-страниц, графические материалы, видео-, аудиозаписи и программное обеспечение. Архив обеспечивает долгосрочное архивирование собранного материала и бесплатный доступ к своим базам данных для широкой публики. Декларируемой целью Архива является сохранение культурно-исторических ценностей цивилизации в эпоху интернет-технологий, создание и поддержка электронной библиотеки



Library Genesis

Крупнейшая научно-техническая библиотека рунета, интегрировавшая библиотеки Колхоза, Мехмата, gigapedia.org, infanata.com и десятки библиотек поменьше. Основная миссия - систематизировать поток научно-технической обучающей литературы, доступной в электронном виде.

Реферативные БД

- *IngentaConnect* — Библиографическая база данных универсального профиля, включающая описания статей из англоязычных журналов и сборников, а также главы из книг. На настоящее время информационный массив объединяет более 4,5 миллионов записей.
- *Refdoc* — Крупнейшая в мире БД статей из научной периодики (прежде — ArticleSciences). Включаются сведения о статьях, трудах конференций и книгах в области естественных, гуманитарных и общественных наук, техники и медицины. Декларируемый объем более 35 млн записей, самые старые из которых относятся к 1847 году. Пополнение ежедневное.
- *SCOPUS* — Одна из крупнейших мировых реферативных БД (без полных текстов). Включает в себя рефераты более 41 млн статей из более чем 15000 журналов (52% из них европейские) 4000 издательств, более 300 российских журналов на английском языке.
- *Web of Science* — доступ к ведущим мировым БД научного цитирования с авторитетным политематическим охватом почти 10000 самых влиятельных научных журналов в мире.

SciFinder (CAS)

- Пионеры поиска в научных работах по химии - существует с 1907 года
- Ведётся учёт всех известных химических соединений
- Тысячи людей в течение десятков лет вручную составляют библиографические справки и заполняют базу данных SciFinder, отдельного продукта CAS для поиска публикаций.

- References from more than 10,000 currently published journals and patents from more than 63 patent authorities
- Important scientific discoveries from the present to the mid-1800s
- The latest scientific breakthroughs almost as soon as they are published with references added daily and some patent information as recent as 2 days ago
- The world's largest collection of organic and inorganic substance information

A division of the American Chemical Society

SciFinder®
The choice for chemistry research.™

SciFinder (CAS): CAS REGISTRY

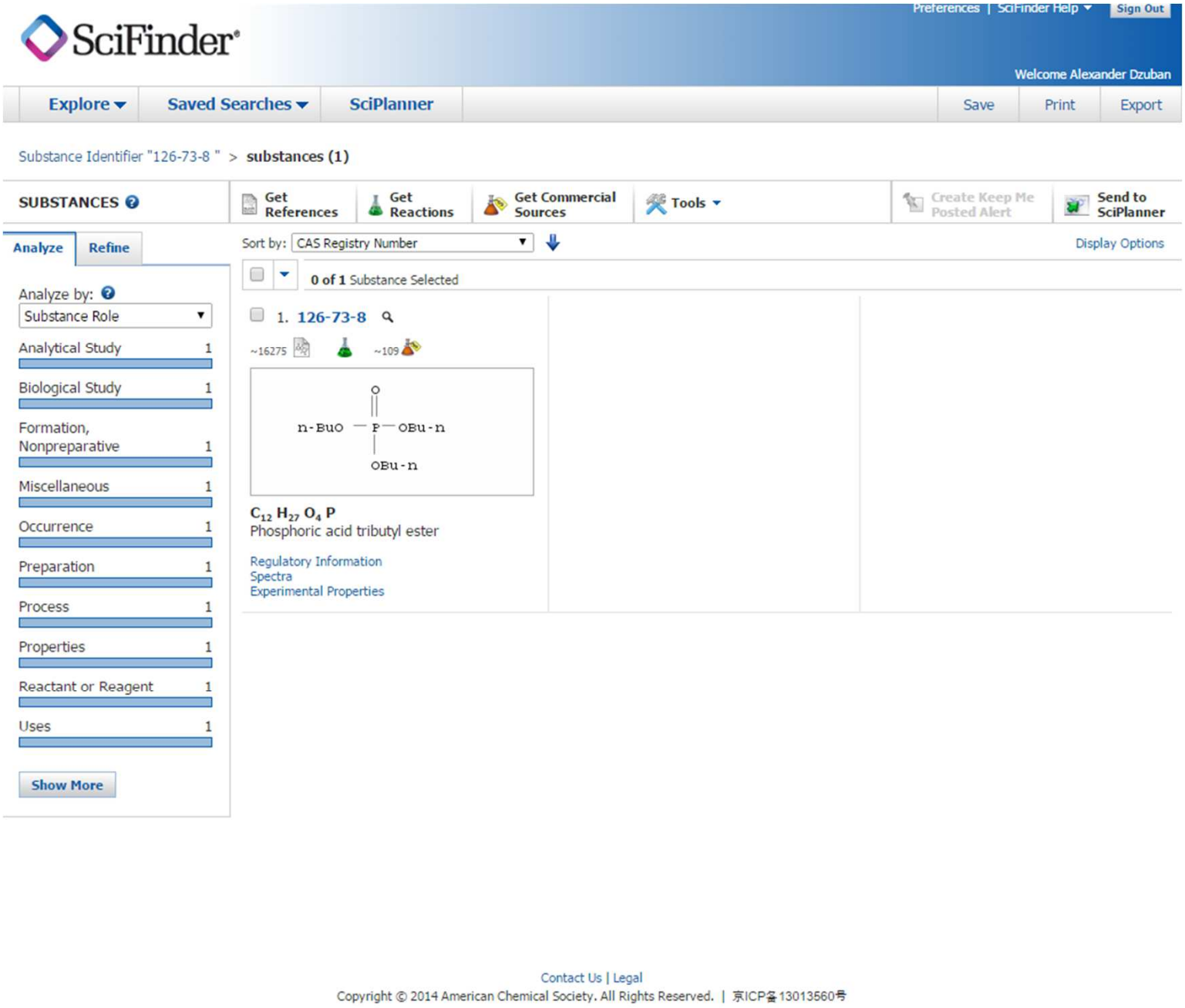
> 90 million organic and inorganic substances and

> 65 million sequences

Updated daily !

Different types of substances : Alloys, Coordination compounds, Minerals, Mixtures, Polymers, Salts, Sequences, Organometallics, Proteins, Inorganic substances

	Experimental	Predicted
Properties	4.5 million (for 3.0 million subst.)	5.1 billion (for 77.3 million subst.)
Spectra	1.3 million (for 929,000 subst.)	76.2 million ^{13}C-NMR and 76.2 million ^{1}H-NMR (available in SciFinder)
Data Tags	12 million (for 3.7 million subst.)	N/A


SciFinder
Preferences | SciFinder Help
Sign Out
Welcome Alexander Dzuban
Explore
Saved Searches
SciPlanner
Save
Print
Export
Substance Identifier "126-73-8 " > substances (1)
SUBSTANCES
Get References
Get Reactions
Get Commercial Sources
Tools
Create Keep Me Posted Alert
Send to SciPlanner
Analyze
Refine
Sort by: CAS Registry Number
Display Options
0 of 1 Substance Selected
Analyze by:
Substance Role
Analytical Study 1
Biological Study 1
Formation, Nonpreparative 1
Miscellaneous 1
Occurrence 1
Preparation 1
Process 1
Properties 1
Reactant or Reagent 1
Uses 1
Show More
1. 126-73-8
~16275
~109
n-BuO
P
OBu-n
OBu-n
O
C12 H27 O4 P
Phosphoric acid tributyl ester
Regulatory Information
Spectra
Experimental Properties
Contact Us | Legal
Copyright © 2014 American Chemical Society. All Rights Reserved. | 京ICP备13013560号

SciFinder

Preferences | SciFinder Help | Sign Out

Welcome Alexander Dzuban

Explore | Saved Searches | SciPlanner | Link | Save | Print | Export

Substance Identifier "126-73-8 " > substances (1) > **126-73-8**

SUBSTANCE DETAIL | Get References | Get Reactions | Get Commercial Sources | Send to SciPlanner

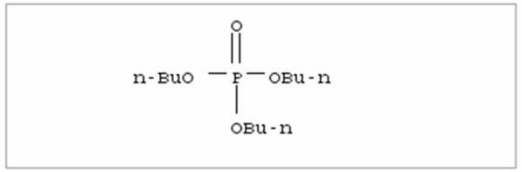
Return

CAS Registry Number 126-73-8

~16,275 ~109

$C_{12}H_{27}O_4P$

Phosphoric acid tributyl ester



Molecular Weight
266.31

Melting Point (Experimental)
Value: <-80 °C

Boiling Point (Experimental)
Value: 177-178 °C | Condition: Press: 27 Torr

Density (Experimental)
Value: 0.976 g/cm3 | Condition: Temp: 25 °C

Other Names
Butyl phosphate ($(BuO)_3PO$) (6CI,7CI)
Calloway 6814
Celluphos 4
Degressal SD 40
Disflamoll TB
View more...

Expand All | Collapse All

EXPERIMENTAL PROPERTIES

Acoustic | Biological | Chemical | Density | Flow and Diffusion | Interface | Lipinski | Nuclear | Optical and Scattering | Thermal

Acoustic Properties	Value	Condition	Note
Sound Velocity	See full text		(35)CAS

Notes

(35) Basu, M.; Journal of Chemical Thermodynamics 2014, V70, P1-12 CAPLUS

EXPERIMENTAL SPECTRA

^{1}H NMR | ^{13}C NMR | Hetero NMR | IR | Mass | Raman | UV and Visible | Additional Spectra

UV and Visible Properties	Value	Condition	Note
UV and Visible Absorption Spectrum	See full text		(59)CAS
UV and Visible Emission/Luminescence Spectrum	See full text		(60)CAS

Notes

(59) Lembrikov, V. M.; Khimicheskaya Tekhnologiya (Moscow, Russian Federation) 2004, (9), P2-4 CAPLUS
(60) Jarikov, Viktor V.; Journal of Applied Physics 2006, V100(1), P014901/1-014901/7 CAPLUS

PREDICTED PROPERTIES

Biological | Chemical | Density | Lipinski | Structure Related | Thermal

Density Properties	Value	Condition	Note
Density	0.986±0.06 g/cm3	Temp: 20 °C Press: 760 Torr	(62)
Molar Volume	269.8±3.0 cm3/mol	Temp: 20 °C Press: 760 Torr	(62)

Notes

(62) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V11.02 (© 1994-2014 ACD/Labs)

PREDICTED SPECTRA

^{1}H NMR | ^{13}C NMR

^{13}C NMR Properties	Value	Condition	Note
Carbon-13 NMR Spectrum	See spectrum		(63)

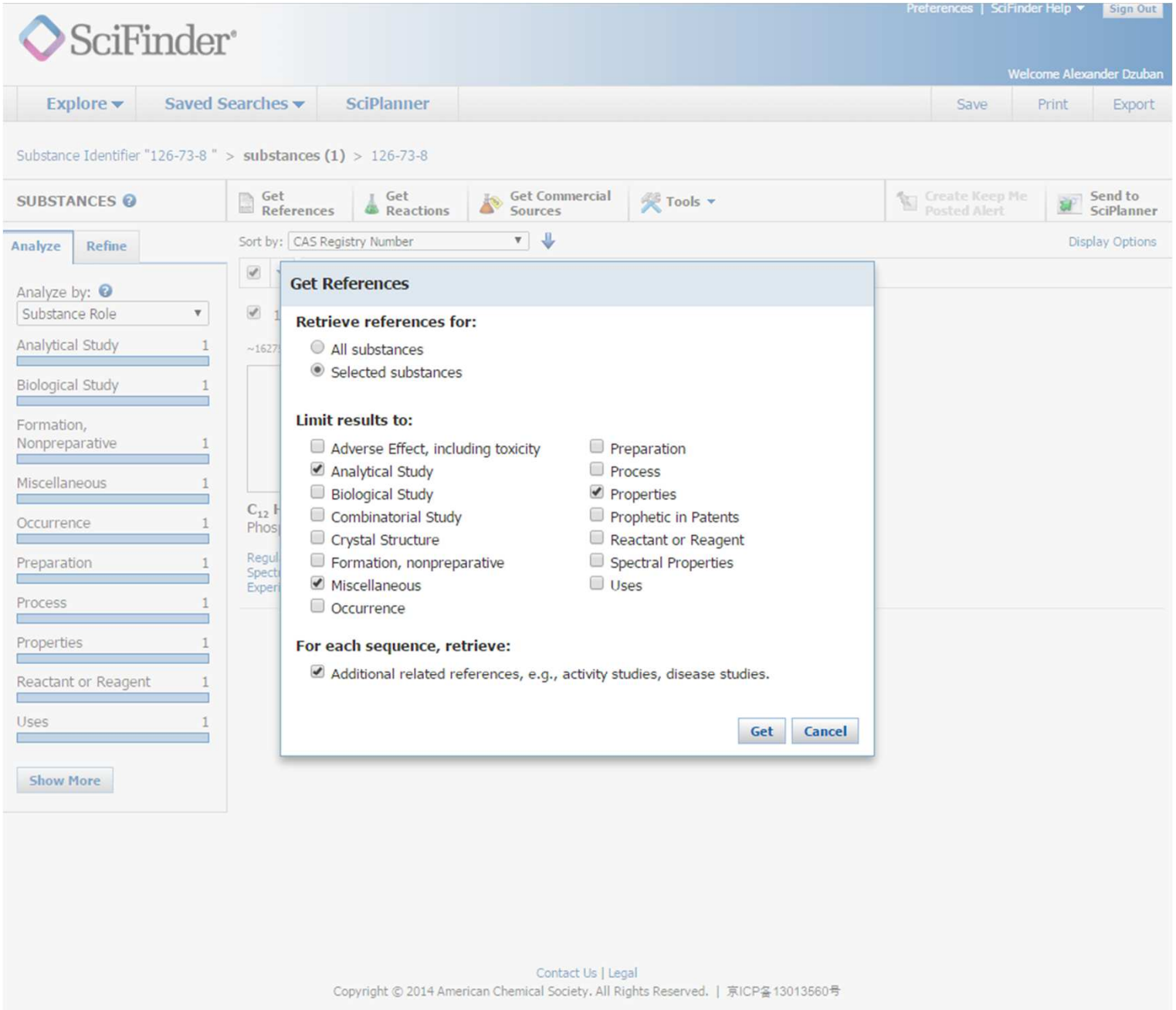
Notes

(63) Predicted NMR data calculated using Advanced Chemistry Development, Inc. (ACD/Labs) Software V11.01 (© 1994-2014 ACD/Labs)

REGULATORY INFORMATION

CAS REFERENCE ROLES

ADDITIONAL DETAILS


SciFinder
Preferences | SciFinder Help
Sign Out
Welcome Alexander Dzuban
Explore
Saved Searches
SciPlanner
Save
Print
Export
Substance Identifier "126-73-8 " > substances (1) > 126-73-8
SUBSTANCES
Get References
Get Reactions
Get Commercial Sources
Tools
Create Keep Me Posted Alert
Send to SciPlanner
Analyze
Refine
Sort by: CAS Registry Number
Display Options
Analyze by:
Substance Role
Analytical Study 1
Biological Study 1
Formation, Nonpreparative 1
Miscellaneous 1
Occurrence 1
Preparation 1
Process 1
Properties 1
Reactant or Reagent 1
Uses 1
Show More
Get References
Retrieve references for:
All substances
Selected substances
Limit results to:
Adverse Effect, including toxicity
Analytical Study
Biological Study
Combinatorial Study
Crystal Structure
Formation, nonpreparative
Miscellaneous
Occurrence
Preparation
Process
Properties
Prophetic in Patents
Reactant or Reagent
Spectral Properties
Uses
For each sequence, retrieve:
Additional related references, e.g., activity studies, disease studies.
Get
Cancel
Contact Us | Legal
Copyright © 2014 American Chemical Society. All Rights Reserved. | 京ICP备13013560号

SciFinder

Preferences | SciFinder Help | Sign Out

Welcome Alexander Dzuban

Explore | Saved Searches | SciPlanner | Save | Print | Export

Substance Identifier "126-73-8 " > substances (1) > get references (4080) > **keep analysis "CAS Registry Number" (530)**

REFERENCES | Get Substances | Get Reactions | Get Related Citations | Get Full Text | Tools | Create Keep Me Posted Alert | Send to SciPlanner

Analyze | Refine | Categorize

Analyze by: CAS Registry Number

126-73-8	530
7697-37-2	530
7440-61-1	104
112-40-3	103
10102-06-4	79
7440-07-5	75
7647-01-0	40
107-66-4	38
7440-67-7	38
7664-93-9	34

Show More

Sort by: Publication Year | Display Options

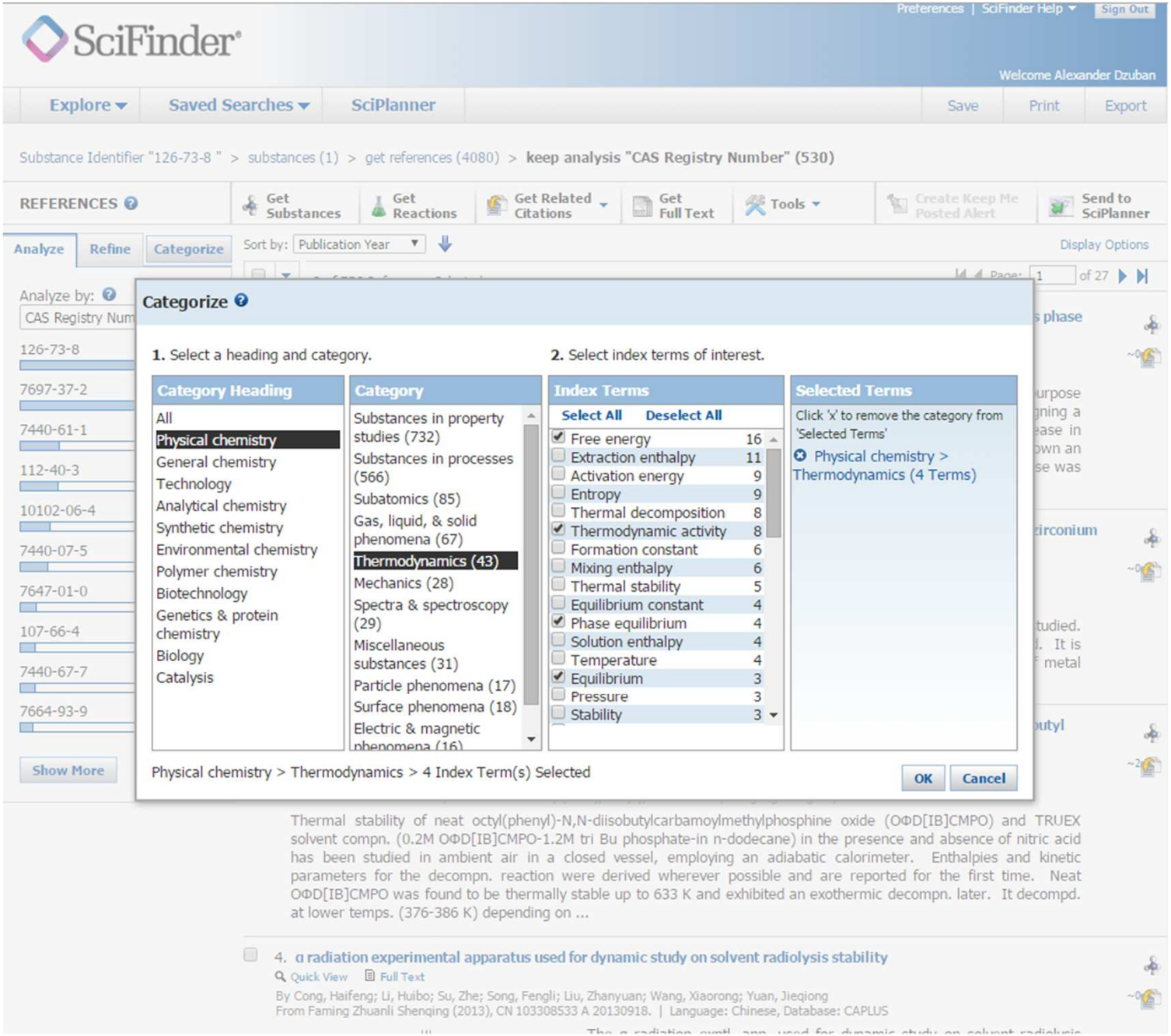
0 of 530 References Selected | Page: 1 of 27

1. **Effects of temperature, concentration of acid and metal ions on the solubility of tri-n-butyl phosphate in aqueous phase**
   Quick View | Full Text
   By Mishra, Satyabrata; Ganesh, S.; Velavendan, P.; Pandey, N. K.; Mallika, C.; Kamachi Mudali, U.; Natarajan, R.
   From Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry (2014), Ahead of Print. | Language: English, Database: CAPLUS
   The soly. of Tri-Bu phosphate (TBP) in nitric acid (0-14 M) was measured in the temp. range 25-60 °C for the purpose of understanding the distribution equil. of TBP between aq. and org. phases as well as to provide input for designing a suitable contactor in order to remove the dissolved TBP from aq. streams in the PUREX process. With increase in temp., soly. of TBP was obsd. to increase and with increase in acid concn., the soly. exhibited a min. and had shown an increasing trend above 10 M acid. The effect of zirconium, ruthenium and uranium on the soly. of TBP in aq. phase was also estd.

2. **Study of dependency of equilibrium in Zr(NO3)4-HNO3-TBP-decane extraction system on initial composition of zirconium compound**
   Quick View | Full Text
   By Shavkunova, M. Yu.; Sinegribova, O. A.
   From Khimicheskaya Tekhnologiya (Moscow, Russian Federation) (2014), 15(1), 47-51. | Language: Russian, Database: CAPLUS
   The state of $Zr(NO_3)_4$-HNO_3 tri-Bu phosphate (TBP) decane extn. system at direct and reverse mass transfer is studied. The reasons for the possible mismatch of extn. and re-extn. isotherms at an equal aq. phase acidity are found. It is found that the nature of hydroxide used for prepg. nitric-acid soln. Zr significantly affects the distribution of metal between the phases.

3. **Thermal decomposition characteristics of octyl(phenyl)-N,N-diisobutylcarbamoylmethylphosphine oxide-tri n-butyl phosphate-nitric acid systems**
   Quick View | Full Text
   By Venkatesan, K. A.; Chandran, K.; Ramanathan, N.; Anthonysamy, S.; Ganesan, V.; Srinivasan, T. G.
   From Journal of Thermal Analysis and Calorimetry (2014), 115(2), 1979-1988. | Language: English, Database: CAPLUS
   Thermal stability of neat octyl(phenyl)-N,N-diisobutylcarbamoylmethylphosphine oxide (ΟΦD[IB]CMPO) and TRUEX solvent compn. (0.2M ΟΦD[IB]CMPO-1.2M tri Bu phosphate-in n-dodecane) in the presence and absence of nitric acid has been studied in ambient air in a closed vessel, employing an adiabatic calorimeter. Enthalpies and kinetic parameters for the decompn. reaction were derived wherever possible and are reported for the first time. Neat ΟΦD[IB]CMPO was found to be thermally stable up to 633 K and exhibited an exothermic decompn. later. It decompd. at lower temps. (376-386 K) depending on ...

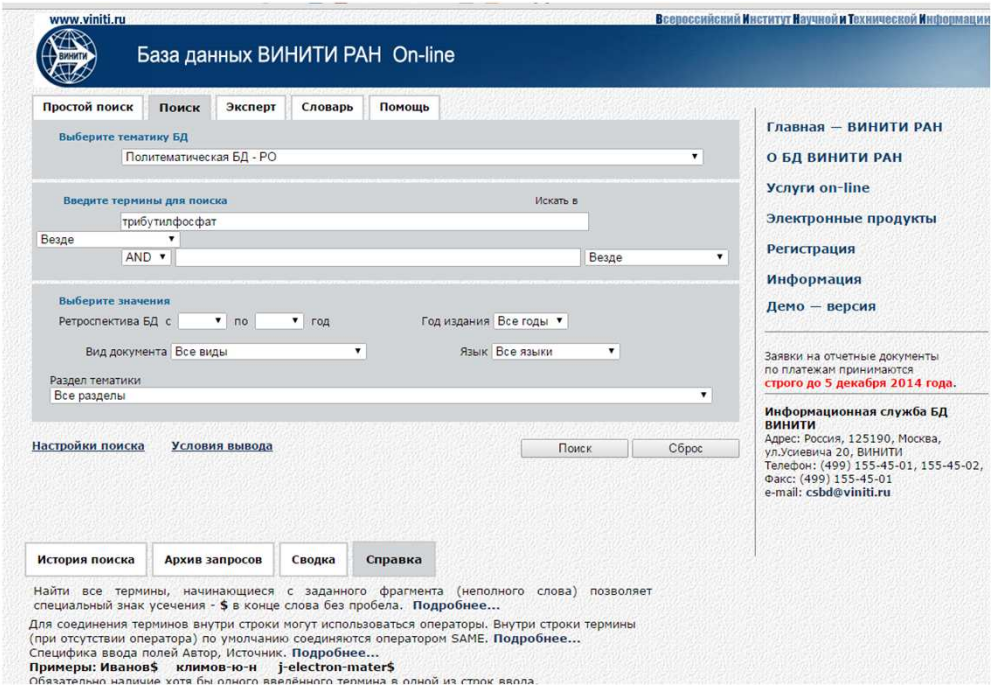
4. **α radiation experimental apparatus used for dynamic study on solvent radiolysis stability**
   Quick View | Full Text
   By Cong, Haifeng; Li, Huibo; Su, Zhe; Song, Fengli; Liu, Zhanyuan; Wang, Xiaorong; Yuan, Jieqiong
   From Faming Zhuanli Shenqing (2013), CN 103308533 A 20130918. | Language: Chinese, Database: CAPLUS


SciFinder
Preferences | SciFinder Help
Sign Out
Welcome Alexander Dzuban
Explore
Saved Searches
SciPlanner
Save
Print
Export
Substance Identifier "126-73-8 " > substances (1) > get references (4080) > keep analysis "CAS Registry Number" (530)
REFERENCES
Get Substances
Get Reactions
Get Related Citations
Get Full Text
Tools
Create Keep Me Posted Alert
Send to SciPlanner
Analyze
Refine
Categorize
Sort by: Publication Year
Display Options
Analyze by:
CAS Registry Num
126-73-8
7697-37-2
7440-61-1
112-40-3
10102-06-4
7440-07-5
7647-01-0
107-66-4
7440-67-7
7664-93-9
Show More
Categorize
1. Select a heading and category.
2. Select index terms of interest.
Category Heading
All
Physical chemistry
General chemistry
Technology
Analytical chemistry
Synthetic chemistry
Environmental chemistry
Polymer chemistry
Biotechnology
Genetics & protein chemistry
Biology
Catalysis
Category
Substances in property studies (732)
Substances in processes (566)
Subatomics (85)
Gas, liquid, & solid phenomena (67)
Thermodynamics (43)
Mechanics (28)
Spectra & spectroscopy (29)
Miscellaneous substances (31)
Particle phenomena (17)
Surface phenomena (18)
Electric & magnetic phenomena (16)
Index Terms
Select All
Deselect All
Free energy 16
Extraction enthalpy 11
Activation energy 9
Entropy 9
Thermal decomposition 8
Thermodynamic activity 8
Formation constant 6
Mixing enthalpy 6
Thermal stability 5
Equilibrium constant 4
Phase equilibrium 4
Solution enthalpy 4
Temperature 4
Equilibrium 3
Pressure 3
Stability 3
Selected Terms
Click 'x' to remove the category from 'Selected Terms'
Physical chemistry > Thermodynamics (4 Terms)
Physical chemistry > Thermodynamics > 4 Index Term(s) Selected
OK
Cancel
Thermal stability of neat octyl(phenyl)-N,N-diisobutylcarbamoylmethylphosphine oxide (ОФD[IB]CMPO) and TRUEX solvent compn. (0.2M ОФD[IB]CMPO-1.2M tri Bu phosphate-in n-dodecane) in the presence and absence of nitric acid has been studied in ambient air in a closed vessel, employing an adiabatic calorimeter. Enthalpies and kinetic parameters for the decompn. reaction were derived wherever possible and are reported for the first time. Neat ОФD[IB]CMPO was found to be thermally stable up to 633 K and exhibited an exothermic decompn. later. It decompd. at lower temps. (376-386 K) depending on ...
4. α radiation experimental apparatus used for dynamic study on solvent radiolysis stability
Quick View
Full Text
By Cong, Haifeng; Li, Huibo; Su, Zhe; Song, Fengli; Liu, Zhanyuan; Wang, Xiaorong; Yuan, Jieqiong
From Faming Zhuanli Shenqing (2013), CN 103308533 A 20130918. | Language: Chinese, Database: CAPLUS

ВИНИТИ

Крупнейший информационный центр по проблемам естественных наук, создан в 1952 г. *Фонды ВИНИТИ* – это огромный массив ретроспективной информации, сформированной на основе опубликованных отечественных и зарубежных документов из более чем 80 стран на 40 языках. С 1953 г. ВИНИТИ издается *Реферативный журнал* (РЖ), содержащий рефераты (библиографическое описание и краткое содержание) статей из журналов, сборников, трудов конференций, монографий, справочников, патентов, авторефератов диссертаций, депонированных рукописей по всем отраслям естественных наук.

Ежегодно в РЖ фиксируется примерно 1 млн документов. РЖ состоит из 28 сводных томов и 40 отдельных выпусков (издаются ежемесячно), которые имеют авторские и предметные указатели. Сейчас РЖ выходят не только в бумажном, но и в электронном виде.



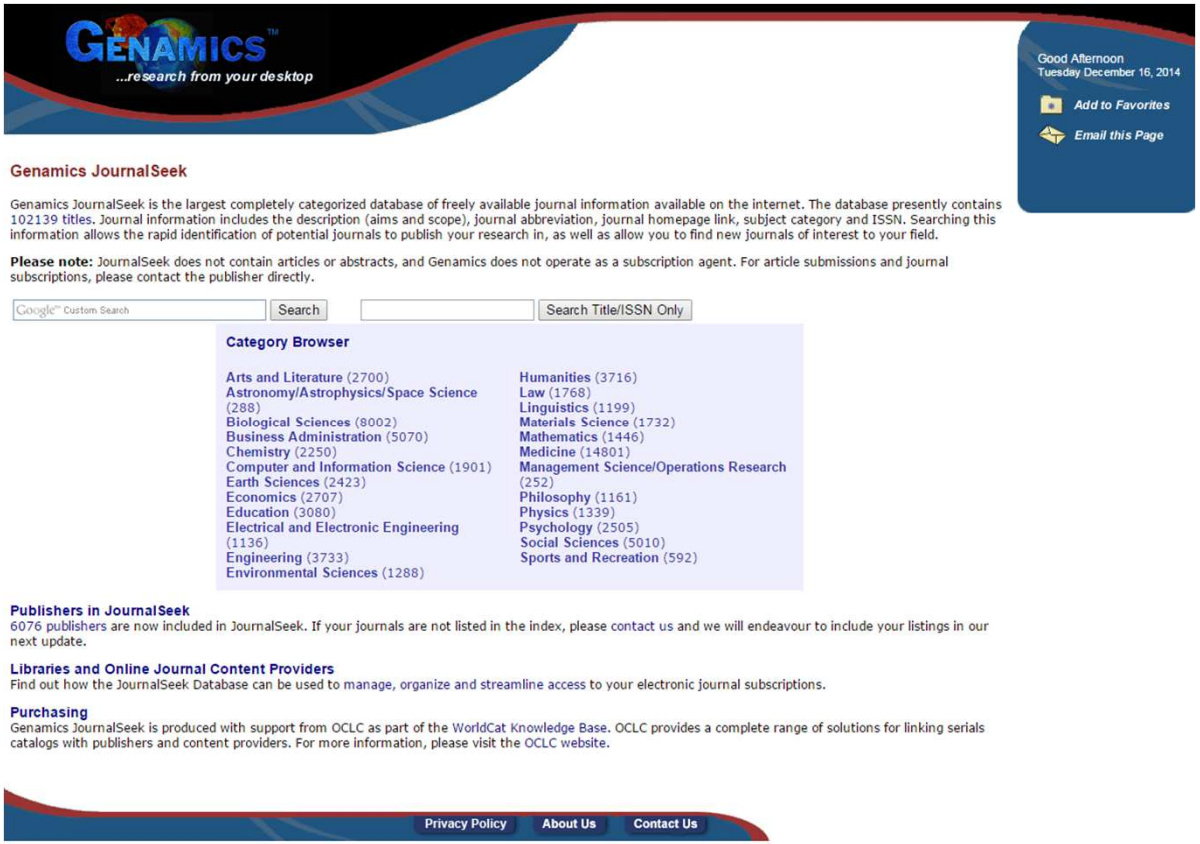
CAS Source Index (CASSI) Search Tool

Бесплатный ресурс для получения библиографической информации о журналах (аббревиатура и полное название, ISSN и др.), индексированных CAS с 1907 г.

Обновляется ежегодно

Genamics JournalSeek

Крупнейшая библиографическая база данных журналов (более 95 тыс. названий); не содержит статей или резюме; включены описания и аббревиатуры изданий, номера ISSN, веб-адреса издателей.



Базы данных свойств (и не только ТД)

Требования к справочным данным о термодинамических свойствах веществ

- рекомендуемые данные должны быть получены в результате критического анализа всех опубликованных данных с использованием адекватных методов обработки первичной информации и вычисления термодинамических свойств;
- рекомендуемые значения термодинамических свойств должны образовывать систему взаимосогласованных величин;
- рекомендуемые данные должны быть получены с использованием наиболее современной информации о фундаментальных константах, ключевых термохимических величинах и атомных массах;
- для каждой рекомендуемой величины должна приводиться оценка ее надежности;
- информация о способах получения рекомендуемых величин и их погрешностей должна быть доступной;
- необходимо указывать источники первичной информации, которые были использованы при получении рекомендуемых данных;
- рекомендуемые данные следует приводить для широкого, логически обоснованного набора веществ.

Г.В. Белов “Термодинамические базы данных и программные комплексы для термодинамического моделирования”

SGTE

Консорциум научных центров, вовлеченных в деятельность, связанную с разработкой термодинамических баз данных для неорганических и металлургических систем (thermodynamic databanks for inorganic and metallurgical systems) и их использованием для решения прикладных задач.

Целями организации являются:

- Создание, развитие и распространение высококачественных баз данных, позволяющих надежно и эффективно проводить анализ равновесных состояний сложных термодинамических систем
- Международное сотрудничество, обеспечивающее унификацию термодинамических данных и методов их получения.

SGTE Scientific Group Thermodata Europe

Базы данных SGTE

- PURE - свойства химических элементов. Содержит сведения о термохимических свойствах для всех стабильных и многих метастабильных модификаций от 298.15 K до газообразного состояния.
- SSUB - данные о термодинамических свойствах более 4000 газообразных и конденсированных веществ.
- SSOL - термодинамические свойства растворов. Содержит данные для 400 конденсированных бинарных и тройных систем, а также о свойствах некоторых систем более высокого порядка.
- SALTS – термодинамические свойства более 90 двойных, тройных и многокомпонентных солевых растворов
- SLAG – база данных для термодинамических расчетов равновесий в шлаках в железосодержащих системах
- SGTE Nuclear Database – термодинамические свойства материалов атомной энергетики и т.д

F*A*C*T

Facility for the Analysis of Chemical Thermodynamics

Создан в результате выполнения совместного проекта между McGill University (Prof. William T. Thompson) и École Polytechnique de Montréal (Profs. Christopher W. Bale & Arthur D. Pelton). Проект, начавшийся в 1976 году, предполагал создание программных средств для работы с термодинамическими данными и решения задач химии металлов. В 1984 году в École Polytechnique был основан исследовательский центр CRCT - Centre de Recherche en Calcul Thermochimique / Centre for Research in Computational Thermochemistry для того чтобы поддержать развитие и использование программного комплекса F*A*C*T при решении научных задач и в учебном процессе.

F*A*C*T-Web - предоставляет свободный доступ к информации о термодинамических свойствах индивидуальных веществ, химических реакций и возможностям расчета равновесного состава термодинамических систем. Содержит хорошо подобранный список ссылок на сайты, имеющие отношение к вопросам неорганической химической термодинамики. Сравнительно недавно создан объединенный продукт FactSage = FACT + ChemSage

http://www.crct.polymtl.ca/fact/

Facility for the Analysis of Chemical Thermodynamics

F*A*C*T

Home CRCT Newsletters Français

- FactSage.com
- Databases
- Phase Diagrams & Downloads
- Ordering FactSage Package
- Fact-Web
- Newsletter
- About us

Welcome !

Facility for the Analysis of Chemical Thermodynamics

Home of the Fact compound and solution databases

In 1976 F*A*C*T started as a joint project between two universities, the École Polytechnique de Montreal and McGill University, for treating thermodynamic properties and calculations in chemical metallurgy. In 1984, the research centre CRCT - *Centre de Recherche en Calcul Thermochimique / Centre for Research in Computational Thermochemistry*, was founded at the École Polytechnique in order to promote and develop F*A*C*T in both research and teaching. After more than 20 years of collaboration on software development between the F*A*C*T group and GTT-Technologies, the common product FactSage™ was released in 2001.

F*A*C*T has grown into a fully integrated thermochemical database that couples proven FactSage software with self-consistent critically assessed FACT thermodynamic data. It is employed in diverse fields of chemical thermodynamics by pyrometallurgists, hydrometallurgists, chemical engineers, corrosion engineers, inorganic chemists, geochemists, ceramists, electrochemists, environmentalists, etc. and it is installed in hundreds of universities, government laboratories and industrial research centers around the world.

For more detailed information on F*A*C*T click on "About F*A*C*T".

Last updated: May 28, 2013 - Christopher W. Bale CRCT - FACT - FactSage ~ page created by Eve Bélisle ~

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

Database Documentation

- Summary of databases
- List of stored phase diagrams
- How to use the databases

- [ELEM] - FactSage elements database
- [FTdemo] - demonstration database for slide shows
- [FactPS] - FACT pure substances database, list of compounds
- [SGPS] - SGTE pure substances database, list of compounds

- [FToxid] - FACT oxide database:
- [FTsalt] - FACT salt database:
- [FTmisc] - FACT sulfide, alloy, micellaneous databases:
- [FTOxCN] - FACT high-T oxycarbonitride database:
- [FTfrtz] - FACT fertilizer database:
- [FThall] - FACT database for Hall aluminum process:
- [FThelg] - FACT aqueous (Helgeson) database:
- [FTpulp] - FACT pulp and paper database:
- [FTlite] - FACT light metal alloy databases:

- [FScopp] - FactSage copper alloy database:
- [FSlead] - FactSage lead alloy database:
- [FSlite] - FactSage light metal alloy database:
- [FSstel] - FactSage steel alloy database:
- [FSupsi] - FactSage ultrapure silicon database:

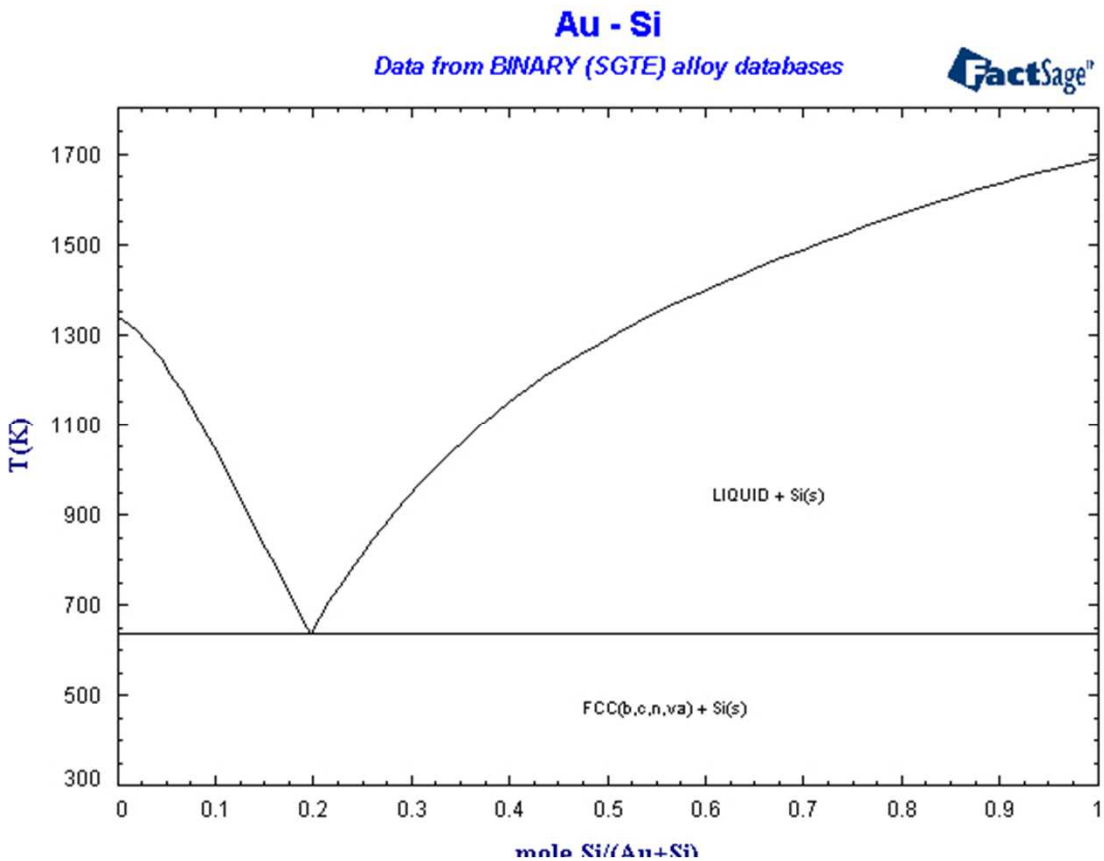
- [FSnobl] - SGTE 2007 noble metal alloy database:
- [SGnobl] - SGTE 2010 noble metal alloy database:
- [SGsold] - SGTE solder alloy database:
- [SGnucl] - SGTE nuclear database:
- [SGTE] - SGTE 2004 alloy database:
- [SGTE] - SGTE 2007 alloy database:
- [SGTE] - SGTE 2011 alloy database:
- [BINS] - SGTE free binary alloy database:
- [SGUN] - SGTE unary database:

- [TDnucl] - Thermodata nuclear database:

PhaseDiagram-Web

Search Results for: "Au - Si"
(Interactive diagrams)

Au-Si Binary Phase Diagram :	| BINARY | FSnobl | FTlite | SGnobl | SGTE | SGTE2007 | |
Au-Si-Ag Binary Phase Diagram :	| SGnobl |
Au-Si-Ag Ternary Phase Diagram / liquidus :	| SGnobl |
Au-Si-Al Ternary Phase Diagram / 1100 :	| SGnobl |
Si-Sn-Au Binary Phase Diagram :	| SGnobl |
Si-Sn-Au Ternary Phase Diagram / liquidus :	| SGnobl |
Bi-Si-Au Ternary Phase Diagram / liquidus :	| SGnobl |
Ge-Si-Au Binary Phase Diagram :	| SGnobl |
Ge-Si-Au Ternary Phase Diagram / liquidus :	| SGnobl |
Pb-Si-Au Binary Phase Diagram :	| SGnobl |
Pb-Si-Au Ternary Phase Diagram / 350 :	| SGnobl |
Sb-Si-Au Binary Phase Diagram :	| SGnobl |
Sb-Si-Au Ternary Phase Diagram / liquidus :	| SGnobl |
Au-B Binary Phase Diagram :	| SGnobl | |
Au-Bi Binary Phase Diagram :	| BINARY | FSnobl | SGnobl | SGsold | SGTE | SGTE2007 | |
Au-Bi-Ag Ternary Phase Diagram / 230 :	| SGnobl |
Au-C Binary Phase Diagram :	| FSnobl | FTlite | SGTE | SGTE2007 | |
Au-Co Binary Phase Diagram :	| SGnobl | SGTE2007 | |
Au-Co-Ag Ternary Phase Diagram / liquidus :	| SGnobl |
Au-Cr Binary Phase Diagram :	| BINARY | FSnobl | SGnobl | |
Au-Cu Binary Phase Diagram :	| BINARY | FSnobl | SGnobl | SGsold | SGTE | SGTE2007 | |
Au-Cu-Ag Ternary Phase Diagram / 800 :	| SGnobl |
Au-Cu-Ag Ternary Phase Diagram / liquidus :	| SGnobl |
Au-Ge Binary Phase Diagram :	| FSnobl | FTlite | SGnobl | SGTE | SGTE2007 | |
Au-Ge-Ag Ternary Phase Diagram / liquidus :	| SGnobl |
Au-Hf Binary Phase Diagram :	| SGnobl | SGTE2007 | |
Au-In Binary Phase Diagram :	| FSnobl | SGnobl | SGsold | SGTE | SGTE2007 | |
Au-Ir Binary Phase Diagram :	| SGnobl |
Au-Mo Binary Phase Diagram :	| SGnobl |
Au-Ni Binary Phase Diagram :	| SGnobl | SGsold | |
Au-Ni-Ag Ternary Phase Diagram / liquidus :	| SGnobl |
Au-Pb Binary Phase Diagram :	| FSnobl | SGnobl | SGsold | SGTE | SGTE2007 | |
Au-Pb-Ag Ternary Phase Diagram / liquidus :	| SGnobl |


Au - Si
Data from BINARY (SGTE) alloy databases
FactSage
T (K)
1700
1500
1300
1100
900
700
500
300
LIQUID + Si(s)
FCC(b,c,n,va) + Si(s)
0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
0.6
0.7
0.8
0.9
1
mole Si/(Au+Si)

http://www.crct.polymtl.ca/fact/

Facility for the Analysis of Chemical Thermodynamics

F*A*C*T

Home CRCT Newsletters Français

- FactSage.com
- Databases
- Phase Diagrams & Downloads
- Ordering FactSage Package
- Fact-Web
  - Compound-Web
  - Reaction-Web
  - Equilib-Web
  - Aqualib-Web
  - Predom-Web
  - EpH-Web
  - PhaseDiagram-Web
- Newsletter
- About us

PhaseDiagram-Web

- interactive phase diagrams and search engine

Please select a category :

- FACT oxides
- FACT salts
- FACT miscellaneous systems
- FactSage copper alloys
- FactSage lead alloys
- FactSage light metal alloys
- FactSage noble metal alloys
- FactSage steel alloys
- SGTE alloys

- FACT Aluminium-Hall process systems
- SGTE nuclear alloys and oxides
- Thermodata nuclear alloys and oxides

or

search for a Phase Diagram : [ ] Search

(enter one or more components, ex: Al, Al2O3, Ni3S2, SiO2)

Last updated: May 28, 2013 - Christopher W. Bale CRCT - FACT - FactSage ~ page created by Eve Bélisle ~

БД “Термические Константы Веществ”

Основана на 10-томном Справочнике "Термические константы веществ", изданном в СССР в 1965-1982 гг под редакцией академика В.П.Глушко. Содержит сведения о 26 976 веществ, образованных практически всеми химическими элементами: термические константы ($\Delta_f H^o$ при 0 К и 298,15 К; $\Delta_f G^o$ при 298,15 К; энергия диссоциации веществ на атомы; изменение энтальпии между 0 и 298,15 К; S при 298,15 К; C_p при 298,15 К), параметры фазовых переходов (давление, температура фазового перехода, изменение энтальпии, изменение энтропии), некоторые кристаллографические данные (сингония, пространственная группа, класс симметрии, структурный тип), потенциалы ионизации.

Содержит возможности поиска веществ по молекулярной формуле.

Для физических постоянных даются ссылки на литературу.

Авторы - Институт теплофизики экстремальных состояний РАН и Химический факультет МГУ

ТКВ

[База данных ТКВ] [Параметры и определения] [Поиск и просмотр информации]

Список литературы

- [6:563] Комаров В. Ф., Олейников Н. Н., Третьяков Ю. Д., Известия Академии Наук СССР. Серия неорганические материалы (СССР) 1967, 3, 1064
- [6:609] Кочнев М. И., Гельд П. В., Есин О. А., Серебренников Н. Н., Труды Уральского политехнического института им. С. М. Кирова (СССР) 1954, № 49, 163
- [6:964] Резницкий Л. А., Хомяков К. Г., Bulletin of Chemical Thermodynamics (США) 1959, 2, 32
- **[6:965]** Резницкий Л. А., Хомяков К. Г., Вестник Московского университета, серия химическая (СССР) 1959, № 2, 217
- **[6:1113]** Третьяков Ю. Д., Хомяков К. Г., Журнал неорганической химии (СССР) 1962, 7, 1219
- [6:1209] Чижиков Д. М., Цветков Ю. В., Казенас Е. К., Доклады Академии наук СССР (СССР) 1969, 189, 1318

Вещество: Fe_2O_3

Состояние	Термические параметры	
кI", гекс. (alpha, hematite)	$DH°f_0$, кДж/моль	*-815.737±8.368*
кI", гекс. (alpha, hematite)	D_0, кДж/моль	*2385.386±5.020*
кI', гекс.(alpha, hematite)	$DH°f_{298.15}$, кДж/моль	-822.156±4.184
кI', гекс.(alpha, hematite)	$DG°f_{298.15}$, кДж/моль	*-740.337*
кI', гекс.(alpha, hematite)	$H°_{298.15}$ - $H°_0$, Дж/моль	15564.48±41.84
кI', гекс.(alpha, hematite)	$S°_{298.15}$, Дж/моль·К	87.445±2.092
кI', гекс.(alpha, hematite)	$C°p_{298.15}$, Дж/моль·К	103.763±0.209
аморф.	$DH°f_{298.15}$, кДж/моль	-688.268

Сведения о свойствах около 3300 веществ, образованных из 96 химических элементов.

Последнее издание справочника на русском языке было осуществлено в 1978-82 гг в 4хтомах. Каждый состоит из двух книг, в первой приводится обзор источников информации, ее погрешностей, методов получения и обработки. Во второй - рекомендуемые значения термохимических величин и таблицы термодинамических свойств веществ в стандартном состоянии.

Материалы 5-го и 6-го томов справочника размещены в интернете на сайте Химического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова по адресу http://www.chem.msu.su/rus/tsiv/.

ТСИВ

ЭЛЕМЕНТЫ И ИХ СОЕДИНЕНИЯ

Том 5

Zn, Cu, Fe, Co, Ni

Том 6

Mn, Cr, V, Ti, Sc

Никель и его соединения

Ni(к,ж)	Никель	текст	таблица
Ni(г)	Никель	текст	таблица
Ni+(г)	Положительный ион никеля	текст	таблица
Ni_2(г)	Диникель	текст	таблица
NiO(к,ж)	Оксид никеля	текст	таблица
NiO(г)	Оксид никеля	текст	таблица
NiH(г)	Гидрид никеля	текст	таблица
NiOH(г)	Гидроксид никеля	текст	таблица
NiOOH(к)	Оксид-гидроксид никеля	текст	таблица
$Ni(OH)_2$(к)	Дигидроксид никеля	текст	таблица
$Ni(OH)_2$(г)	Дигидроксид никеля	текст	таблица
NiF(г)	Фторид никеля	текст	таблица
NiF_2(к,ж)	Дифторид никеля	текст	таблица

Класс точности 4-D	**Никель Ni(к,ж)**					Таблица 2022
NI[]C,L=NI $\Delta_r H°$ = 421.961 кДж · моль$^{-1}$						
T	$C°_p$ (T)	$\Phi°$ (T)	$S°$ (T)	$H°$ (T) - $H°$ (0)	lg $K°$ (T)	T
K	Дж · К$^{-1}$ · моль$^{-1}$			кДж · моль$^{-1}$		K
100.000	13.630	2.360	7.440	.508	-213.4972	100.000
200.000	22.470	8.195	20.180	2.397	-102.7917	200.000
298.150	25.990	13.818	29.870	4.786	-66.3314	298.150
300.000	26.045	13.914	30.031	4.835	-65.8732	300.000
400.000	28.460	18.958	37.873	7.566	-47.4242	400.000
500.000	30.922	23.417	44.473	10.528	-36.3666	500.000
600.000	35.017	27.427	50.436	13.805	-29.0065	600.000

$M = 58.7$

$\Delta H°$ (0) = .000 кДж · моль$^{-1}$

$\Delta H°$ (298.15 K) = .000 кДж · моль$^{-1}$

$S°_{яд}$ = 6.982 Дж · К$^{-1}$ · моль$^{-1}$

$$\Phi°(T) = 12.6094133332 + 5.156 \ln x - 0.0001695\, x^{-2} + 0.0847192250708\, x^{-1} + 689.115\, x - 4995.8\, x^2 + 21284.8333333\, x^3$$

$(x = T \cdot 10^{-4};\ 298.15 < T < 631.00$ K)

$$\Phi°(T) = -3142.98148653 - 1446.492 \ln x + 1.11265\, x^{-2} - 98.8650422597\, x^{-1} + 7325.34\, x$$

$(x = T \cdot 10^{-4};\ 631.00 < T < 670.00$ K)

$$\Phi°(T) = 85.6682936887 + 21.414 \ln x + 0.006572\, x^{-2} - 0.164318394478\, x^{-1} + 48.39\, x$$

$(x = T \cdot 10^{-4};\ 670.00 < T < 1728.00$ K)

$$\Phi°(T) = 128.685480571 + 43.1 \ln x + 0.46408\, x^{-1}$$

$(x = T \cdot 10^{-4};\ 1728.00 < T < 5000.00$ K)

NIST Chemistry Webbook

Один из крупнейших электронных справочников по физико-химическим свойствам веществ. Содержит информацию о термохимических свойствах более 7000 органических и неорганических веществ:

- энтальпию образования, энтальпию сгорания, теплоемкость, энтропию, температуры и энтальпии фазовых переходов, давления паров;
- тепловой эффект и величину изменения энергии Гиббса для 8000 химических реакций;
- инфракрасные спектры для 16000 соединений;
- электронные и колебательные спектры 5000 веществ;
- спектроскопические параметры 600 двухатомных молекул.

NIST Chemistry Webbook

Quantity	Value	Units	Method	Reference	Comment
$\Delta_f H°_{gas}$	-393.51 ± 0.13	kJ/mol	Review	Cox, Wagman, et al., 1984	CODATA Review value
$\Delta_f H°_{gas}$	-393.52	kJ/mol	Review	Chase, 1998	Data last reviewed in September, 1965
Quantity	**Value**	**Units**	**Method**	**Reference**	**Comment**
$S°_{gas,1\ bar}$	213.785 ± 0.010	J/mol*K	Review	Cox, Wagman, et al., 1984	CODATA Review value
$S°_{gas,1\ bar}$	213.79	J/mol*K	Review	Chase, 1998	Data last reviewed in September, 1965

$$C_p^\circ = A + B \cdot T + C \cdot T^2 + D \cdot T^3 + {}^{E}/_{T^2}$$

Shomate eq.

T **(K)**	298. - 1200.	1200. - 6000.
A	24.99735	58.16639
B	55.18696	2.720074
C	-33.69137	-0.492289
D	7.948387	0.038844
E	-0.136638	-6.447293
F	-403.6075	-425.9186
G	228.2431	263.6125
H	-393.5224	-393.5224
Источник	Chase, 1998	Chase, 1998
Примечание	Data last reviewed in September, 1965	Data last reviewed in September, 1965

NIST

- *IL Thermo* — БД по ионным жидкостям
- *JANAF* — БД по термохимическим свойствам органических и неорганических веществ с одним или двумя атомами углерода
- *NISTFLUIDS* — БД по термодинамическим и транспортным свойствам чистых газов и жидкостей
- *NIST Chemical Kinetics Database* — БД по химической кинетике
- ThermoLit – библиографическая БД по термодинамическим и термофизическим свойствам чистых веществ и их бинарных и тройных смесей (*TRC - Thermodynamics Research Center*)

ThermoLit

Home | Scope | Property | Report Draft | Compound Cache | Help | About

NIST

Measurement System & Property Selection

Select System Type: Help

Binary mixture

Name: water
Formula: H_2O

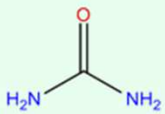
H_2O

New Compound Search

Help

WTT Pro (subscription)/NIST Chemistry WebBook

Name: urea
Formula: CH_4N_2O
Other Names: carbamide
carbamoylamine



New Compound Search

Help

WTT Pro (subscription)/NIST Chemistry WebBook

Select Property:

Property Group: Activity and osmotic coefficients

Property: Activity coefficients at infinite dilution

Help

Add result to Report Draft

Home | Scope | Property | Report Draft | Compound Cache | Help | About

NIST

Compounds: urea
water

Measurement: Activity coefficients at infinite dilution

No experimental data in the data archive of the NIST Thermodynamics Research Center.

Auxilliary relevant properties and data sources

Measurement: Osmotic coefficients

1 data source is listed in the NIST SOURCE Data Archive.

1. Kurhe, D. N.; Dagade, D. H.; Jadhav, J. P.; Govindwar, S. P.; J. Patil, K.
   Thermodynamic Studies of Amino Acid Denaturant Interactions in Aqueous Solutions at 298.15 K
   J. Solution Chem., 2011, 40, 1596-1617
   Temperature: 298.15 K
   Pressure: 101 kPa

Auxilliary relevant properties and data sources

Measurement: Vapor-liquid equilbria

5 data sources are listed in the NIST SOURCE Data Archive.

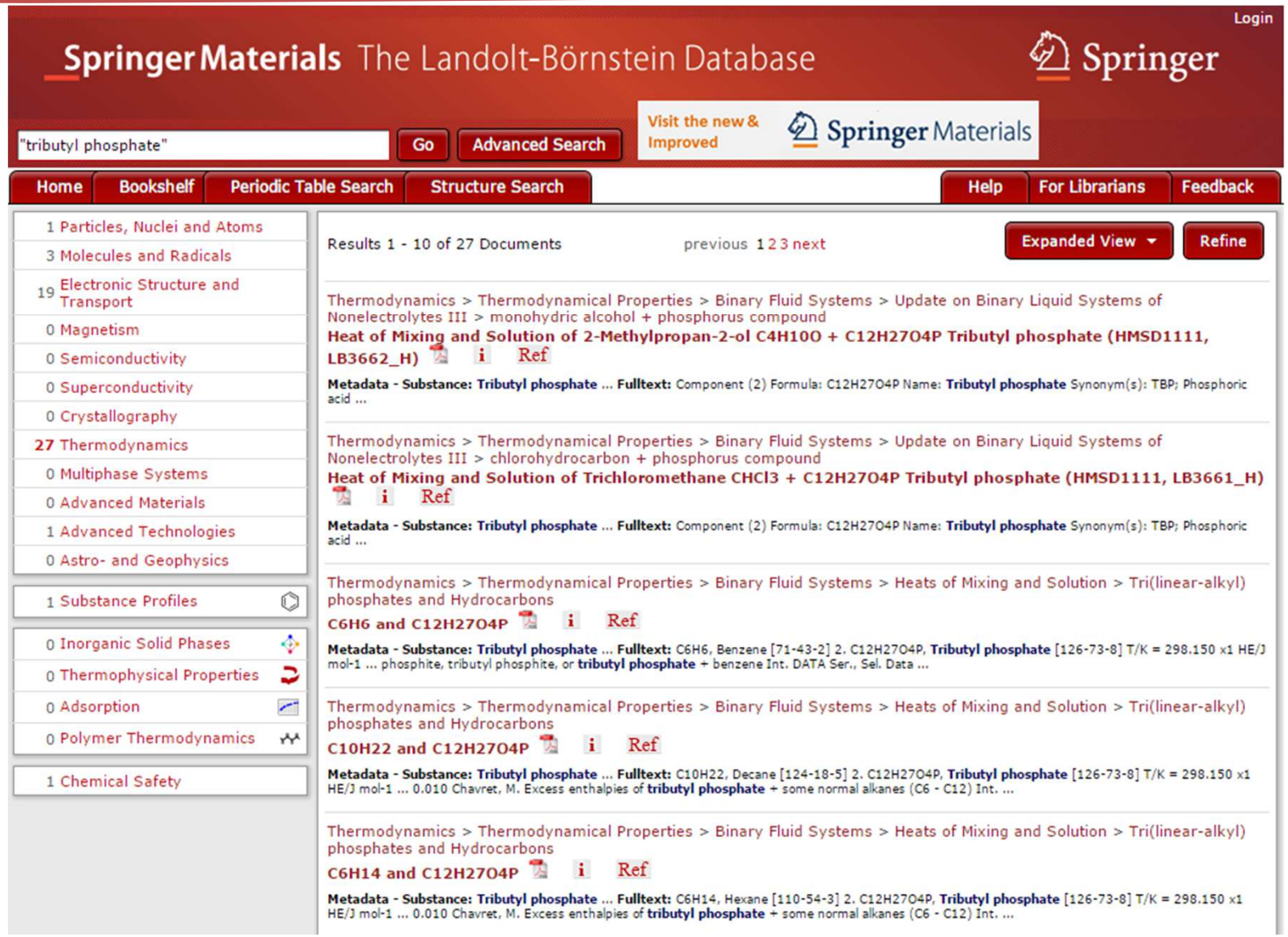
1. Hou, C.-H.; Wang, G.-L.; Zhang, B.-L.
   Bubble Point Pressure of the Solutions of H2SiF6 + H2O and H2SiF6 + CO(NH2)2 + H2O from 323 K to 353 K
   J. Chem. Eng. Data, 2006, 51, 864-866
   Temperature: 323 K - 353 K
   Pressure: 11.84 kPa - 46.11 kPa
2. Szarawara, J.; Piotrowski, J.; Zolotajkin, M.
   Zesz. Nauk. Politech. Slaskiej, Chem., 1979, 87, 27
   Temperature: 293.15 K - 393.12 K
   Pressure: 2.04 kPa - 2.51 kPa
3. Perman, E. P.; Lovett, T.
   Vapour pressure and heat of dilution of aqueous solutions: I.
   Trans. Faraday Soc., 1926, 22, 1-19
   Temperature: 313.15 K - 353.22 K

Springer Materials

Регулярно обновляемая БД по материаловедению. Включает характеристики и свойства 250 тыс. веществ и материалов. Данные включаются в базы на основании экспертной оценки публикаций 8 тыс. профильных журналов. Включает в себя:

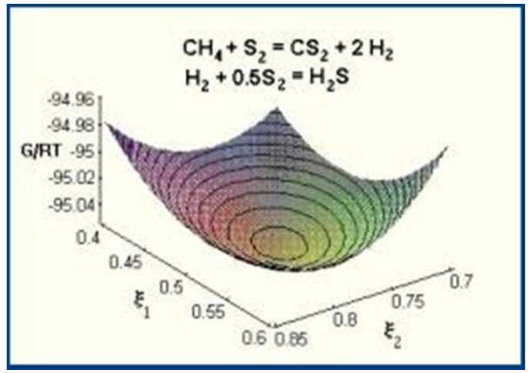
- Не менее 400 томов базы *Landolt-Börnstein Database* по химическим и физическим свойствам материалов;
- 44000 документов по химической безопасности, такие как REACH (Registration, Evaluation, Authorization and Restriction of Chemicals - регламент Европейского союза), GHS (Globally Harmonized System), директивы RoHS (Restriction of Hazardous Substances), WEEE (Waste from Electrical and Electronic Equipment - электронные отходы);
- самую полную и наиболее известную базу данных по термофизическим свойствам Database on Thermophysical Properties, являющейся частью базы DDBST (Dortmund Data Bank Software & Separation Technology) с 300000 фактическими данными;
- Linus Pauling Files (файлы Лайнуса Полинга) - наиболее полная база данных по неорганическим твёрдым компонентам, содержащая 190000 документов.

Springer Materials



EQS4WIN

Мощный и удобный программный комплекс, предназначенный для решения широкого класса задач, связанных с расчетом фазового и химического состава сложных термодинамических систем в состоянии равновесия. Позволяет рассчитывать равновесный состав в системах, содержащих до 3-х конденсированных растворов, газовую фазу и неограниченное число однокомпонентных конденсированных фаз. В состав всех версий программного комплекса входит база данных по термодинамическим свойствам веществ, сведения в которой заимствованы из таблиц JANAF.

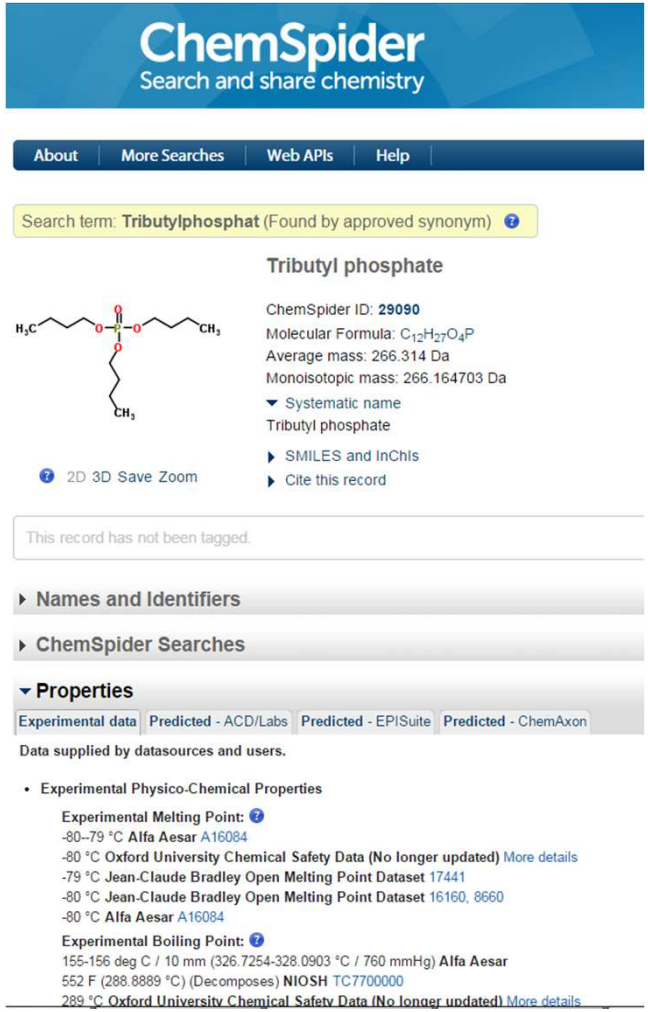


Mathtrek Systems

EQS4WIN: Chemical EQuilibrium Software 4WINdows

ChemSpider

база данных свойств более 29 миллионов химических веществ, главным образом, органических, и их смесей, принадлежащая королевскому химическому обществу Великобритании

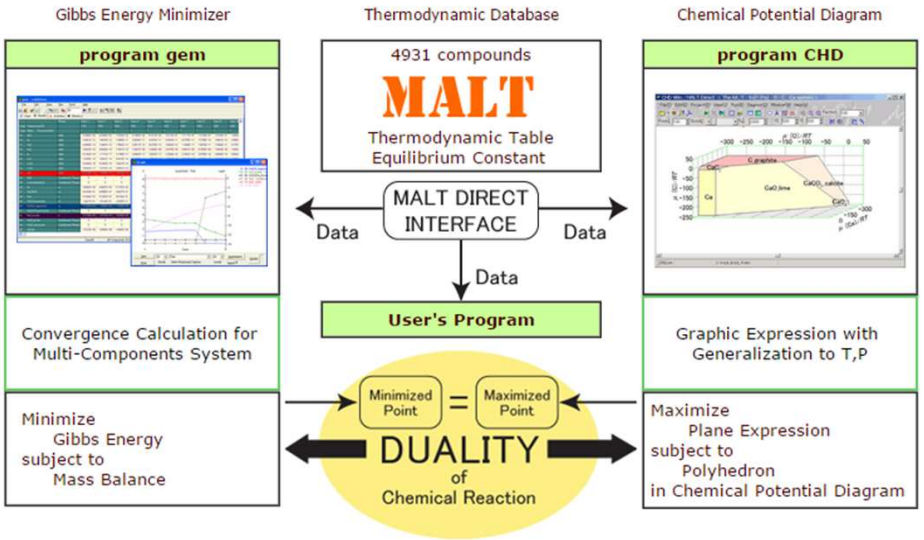


MALT2

Materials-oriented Little Thermodynamic Database for Personal Computers

Довольно полная база данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ с программами расчета равновесного состава и решения задач материаловедения. Создана специальной группой, организованной японским обществом калориметрии и термического анализа. Содержит такие сведения, как $\Delta_f H°$ (298.15 K), $\Delta_f H°$ (298.15 K), $S°$ (298.15 K), C_p, сведения о теплотах фазовых переходов и изменениях энтальпии фазовых переходов для примерно 5000 веществ.

Ориентирована на анализ процессов производства керамики, полупроводников, ядерных топлив, материалов для производства ядерных реакторов, анализа плазмохимических процессов и т.д.



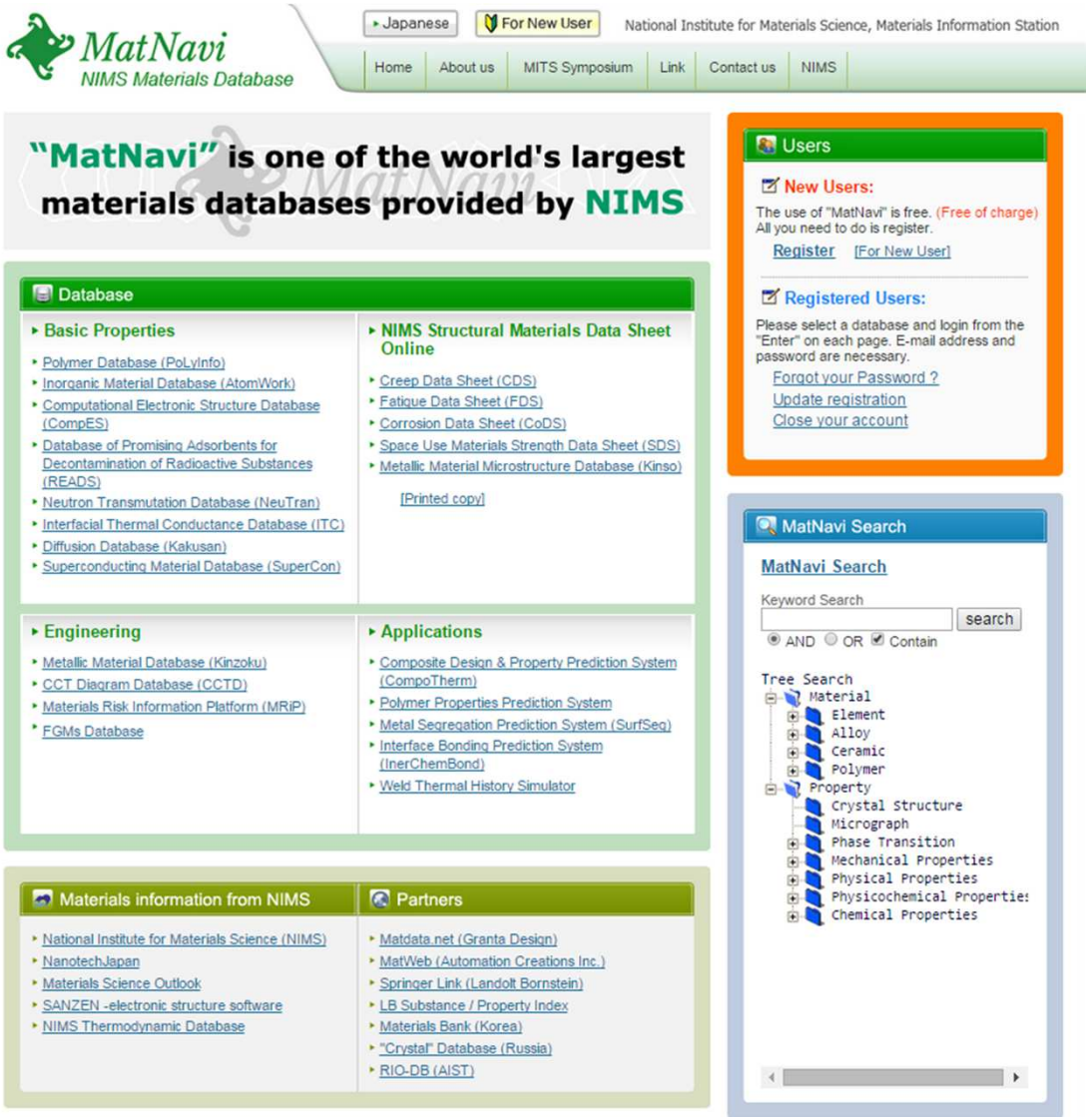
Knovel

Предлагает рецензированную инженерную информацию широкого охвата, отобранную из наиболее авторитетных источников и предоставленную для быстрого и удобного доступа. Обширная коллекция Knovel содержит данные о свойствах материалов и процессов, проектные данные, надлежащие практики, уравнения и формулы, необходимые для конкретных отраслей и инженерных дисциплин.

- International Critical Tables of Numerical Data, Physics, Chemistry and Technology (1st Electronic Edition)
- Knovel Critical Tables 2d edition
- Smithsonian Physical Tables 9th Revised Edition

Knovel®
Know More. Search Less.

MatNavi (NIMS Materials Database)



Одно из самых крупных собраний неорганических материалов

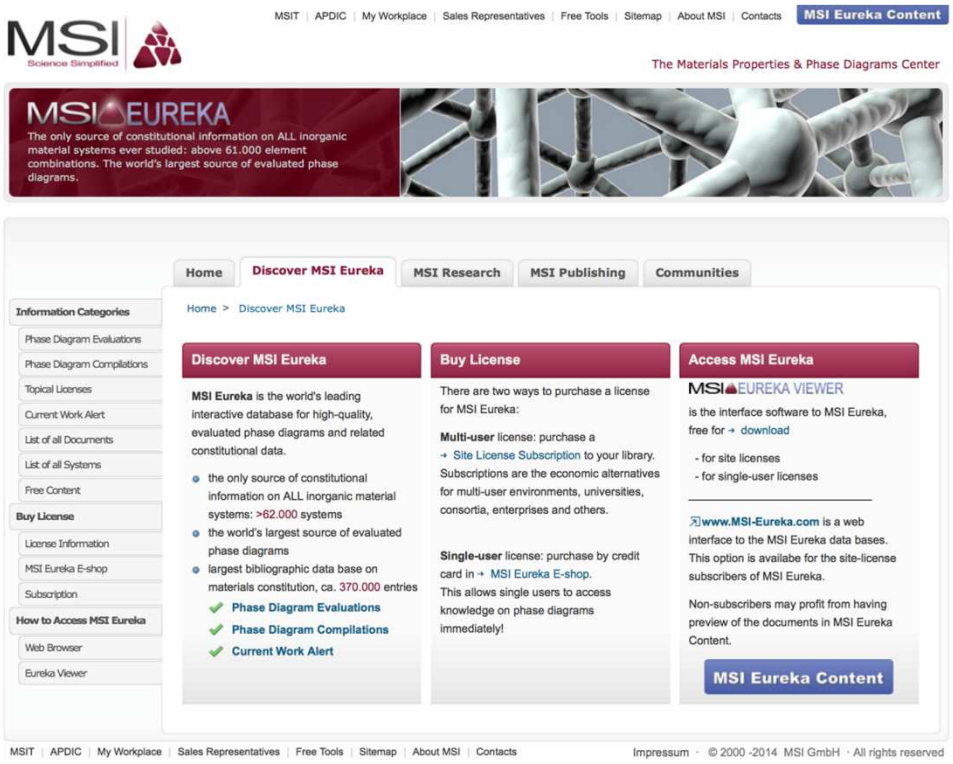
- Фазовые диаграммы
- Кристаллические структуры
- Термофизические свойства

Pauling File

MSI Eureka

Научно-исследовательская и информационная платформа, которая компилирует и критически оценивает данные по конституционным свойствам неорганических материалов, диаграммам состояния и т.д.

БД охватывает практически все неорганические материалы, по которым когда-либо публиковались данные в литературе, начиная с 1890 года. Постоянно обновляется. Создается международной группой специалистов в области фазовых диаграмм MSITR, Materials Science International Team, в международных программах по критической оценке данных, ведущихся более чем 25 лет.



MSI Eureka

MSI EUREKA

Discover MSI Eureka | MSIport | MSI Eureka | List of All Documents

As an individual user you can buy this document online and recommend your library to take a site license.

Buy This Document Online

Recommend to Library

Document Preview

Print

Authors	MSIT
Title	C-N-O Links to Phase Diagram Literature
Category	Links to Literature
Source	MSI Eureka
Editor	Effenberg, G. (Ed.)
Publisher	MSI, Materials Science International Services GmbH, Stuttgart
Publication year	2014
Version	6
Document ID	60.10407.6.8

C-N-O Bibliography

[78xxx136]
Ann. Chim. (Paris), **3(1)**, 59-79 (1978) (Experimental, Thermodynamics)
....
5 references in total.

(c) MSI GmbH, Stuttgart. All rights reserve

Contacts | About MSI Eureka | Subscription Representatives

MSI EUREKA

Discover MSI Eureka | MSIport | MSI Eureka | List of All Documents

Recent Documents

C-N-O 6

Select all systems
As selected + any other element
As selected + subsystems
As selected
Reset

Material systems selected

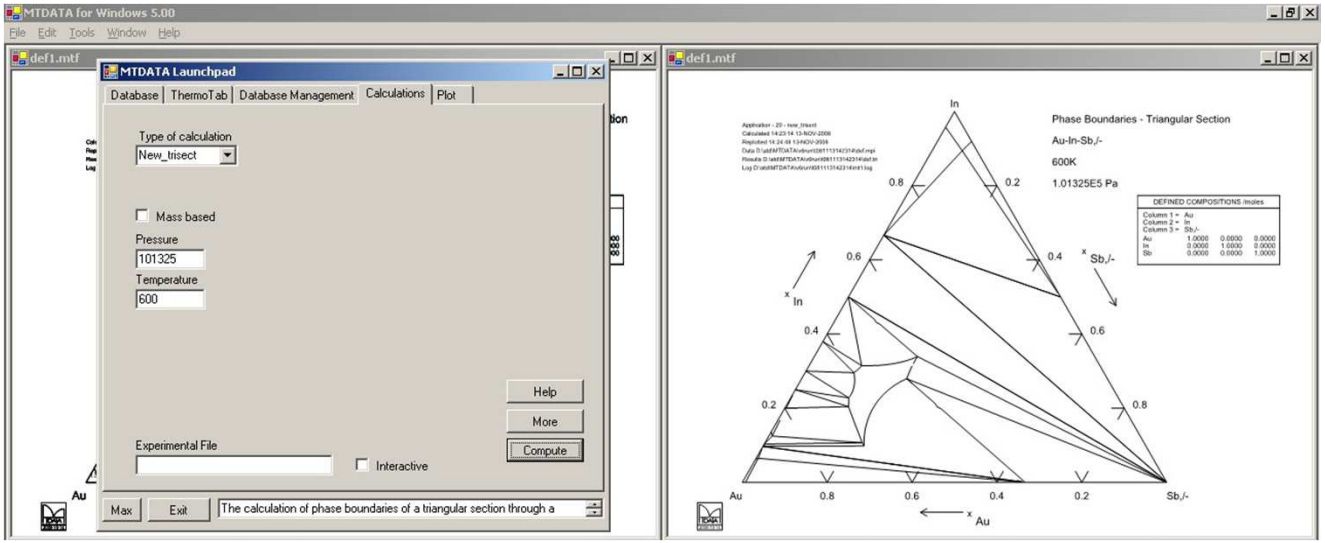
C-N-O

Select information type	Results
Ternary Evaluations	0
Binary Evaluations	0
Reference Diagrams	0
p-T-x Diagrams	0
Research Results	0
Links to Literature	5
Property Links	0
All categories	5

Pos.	Cat. ▲	Material System	Title	Version	DocumentID
1		C-N-O	C-N-O Links to Phase Diagram Li...	6	60.10407.6.8

MTDATA

Программный комплекс для расчета фазовых равновесий в многофазный многокомпонентных системах, в состав которого входит банк данных, содержащий критически отобранные термодинамические свойства. Ориентирован на решение задач металлургии, химии, материаловедения и геохимии. Область применимости ограничена только наличием термодинамических данных. Термодинамические модели, необходимые для анализа соответствующих процессов, включены в состав программного комплекса и учтены при разработке структуры базы данных.



OLI

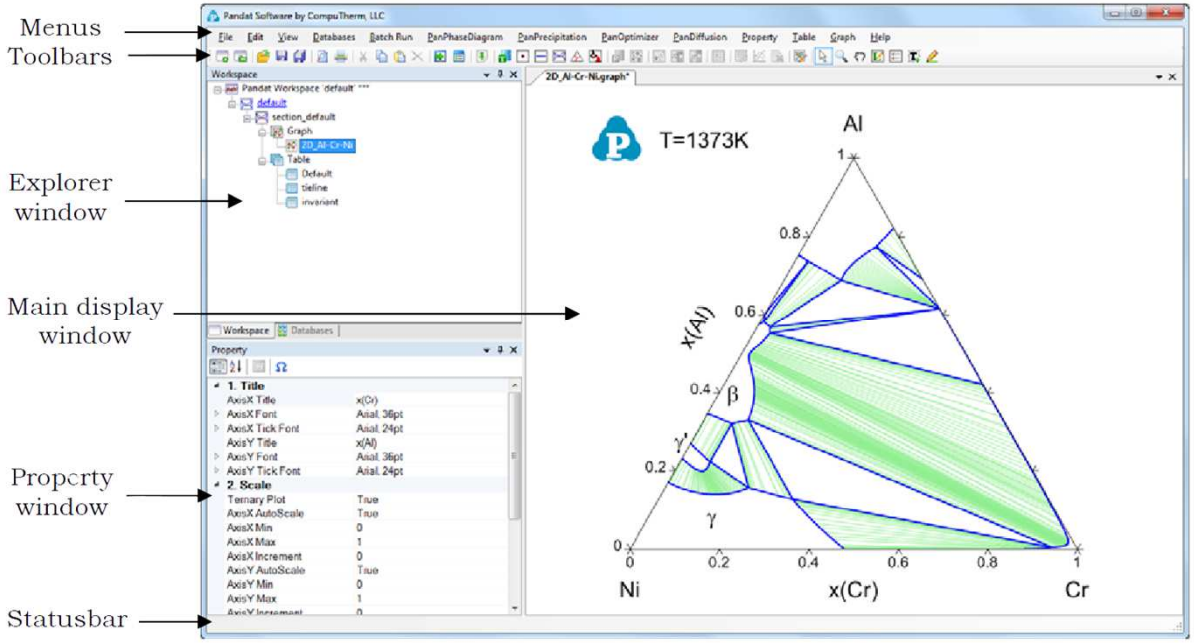
В течение 40 лет фирма разрабатывает программное обеспечение для моделирования практически любых многокомпонентных гетерогенных водных растворов. Основой программного обеспечения OLI является OLI Engine, который включает в себя решатели (Solvers), а также анализаторы – Stream Analyser, OLI Express, Water Analyser. Термодинамический программный комплекс OLI позволяет анализировать многокомпонентные водные растворы, включая жидкую и газовую фазы, растворы органических веществ, в диапазоне температур от -50 до 300 °C при давлении до 1500 бар. В результате вычислений определяются pH, ионная сила, энтальпия, плотность и осмотическое давление. Программа моделирования окружающей среды (Environmental Simulation Program) предназначена для анализа стационарных процессов. Анализ нестационарных процессов можно выполнить при помощи другой программы – DynaChem.

База данных OLI содержит термодинамические, транспортные и физические свойства веществ, образованных из 79 химических элементов, их свойства в водных растворах, а также свойства более 3000 органических соединений.

Pandat

Программный комплекс для расчетов фазовых диаграмм и термодинамических характеристик многокомпонентных сплавов.

Продукт компании *CompuTherm LLC,* созданной в 1996 году для разработки программных комплексов, предназначенных для расчета фазовых диаграмм. Кроме того, в CompuTherm разработано несколько коммерческих баз данных по сплавам.



Thermo-Calc

Мощная и гибкая программа, предназначенная для выполнения термодинамических расчетов и построения фазовых диаграмм. При разработке особое внимание уделялось возможности исследования термодинамических систем с использованием существенно неидеальных моделей. Развивается начиная с 1981 профессором Королевского Технологического института Бо Сундманом.

Thermo-Calc

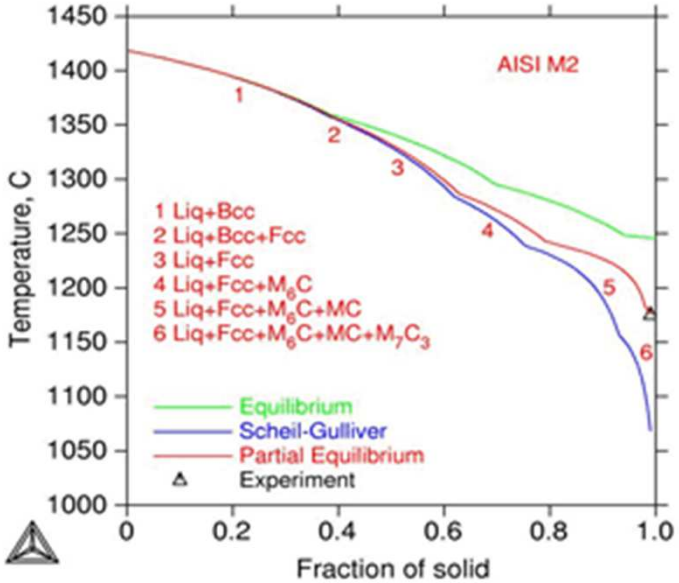
Thermodynamic and phase diagram calculations for multicomponent systems

DICTRA

Simulation of DIffusion Controlled phase TRAnsformations

TC-PRISMA

Simulation of 3D multiparticle diffusive precipitation kinetics

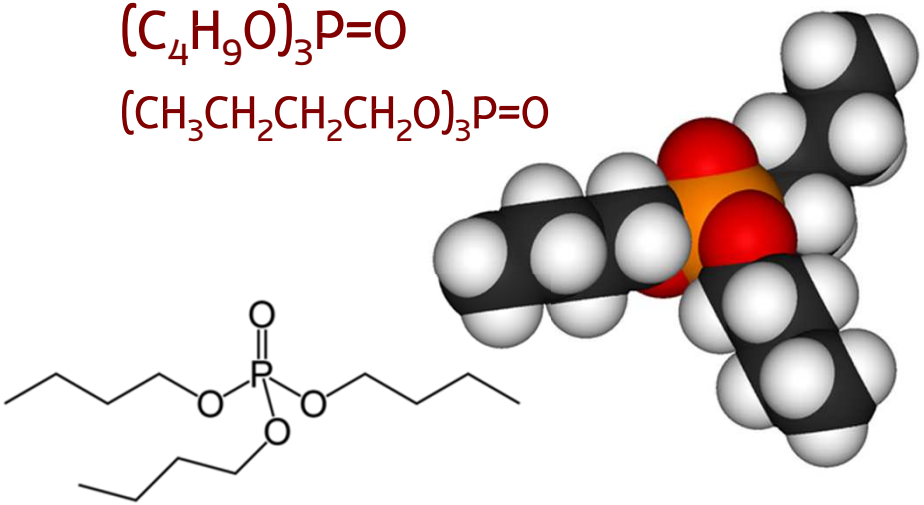


- *ASM Alloy Phase Diagram Database* — БД по фазовым диаграммам и свойствам сплавов
- *CEA* (Chemical Equilibrium with Applications, NASA) — программа, предназначенная для расчета равновесного состава и свойств сложных термодинамических систем.
- *DDBST* — один из крупнейших банков данных по термофизическим свойствам чистых веществ и их смесей
- *PPDS* — программное обеспечение для термодинамических расчетов и БД по теплофизическим свойствам газов и жидкостей

- *ChemSpider* — база данных химических соединений и смесей, принадлежащая королевскому химическому обществу Великобритании
- *Crystallography Open Database*
- *ICSD* — крупнейшая база данных структур кристаллических неорганических веществ FIZ Karlsruhe
- *SciGlass* — БД по составу и свойствам стекол (плотность, вязкость, механические, оптические, электрические свойства)

Формы отображения веществ в БД

- Тривиальное название **Tributyl phosphate**
- Систематическое название Phosphoric acid tributyl ester
- Молекулярная (брутто-) формула $C_{12}H_{27}O_4P$
- Рациональная формула $(C_4H_9O)_3P{=}O$
  - … в полуразвернутом виде $(CH_3CH_2CH_2CH_2O)_3P{=}O$
- Двумерное представление
- Трёхмерное представление
- Молекулярные поверхности
- Идентификаторы
  - CAS RN 126-73-8
  - IUPAC Standard InChI 1S/C12H27O4P/c1-4-7-10-14-17(13,15-11-8-5-2)16-12-9-6-3/h4-12H2,1-3H3
  - IUPAC Standard InChIKey STCOOQWBFONSKY-UHFFFAOYSA-N
  - SMILES O=P(OCCCC)(OCCCC)OCCCC



CAS Registry Number

Номер, под которым химическое вещество (или смесь веществ) зарегистрировано в Chemical Abstracts Service.

Присваивается в хронологическом порядке, химический смысл не закладывается.

16дек2014, 18:00

Tributyl phosphate

TBP; Phosphoric acid tributyl ester; Butyl phosphate; Celluphos 4; Disflamoll TB; Tri-n-butyl phosphate; Tributoxyphosphine oxide; Butyl phosphate, ((BuO)3PO); Butyl phosphate, tri-; Tributilfosfato; Tributyle (phosphate de); Tributylfosfaat; Tributylphosphat; Tributylfosfat; Tributylphsophate; Tributyl ester of phosphoric acid; Kronitex TBP; Phosphoric acid tri-n-butyl ester; Syn-O-Ad 8412; NSC 8484; tributhyl phosphate

CAS RN данного вещества **однозначен** 126-73-8

Линейные нотации

- Химические соединения представляются как буквенно-цифровые линейные последовательности, согласующиеся с номенклатурой IUPAC.
- Линейные нотации могут быть чрезвычайно компактными, что является преимуществом при хранении информации о соединениях.
- Позволяют свободно обмениваться информацией о химических соединениях без необходимости использования специального ПО, интерпретация поддерживается поисковыми системами.

Наиболее популярные типы линейных нотаций:

- SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System)
  - в текстовой строке показывает состав вещества и связи между атомами (метод валентных связей)
- SMARTS (расширение SMILES)
- InChI (IUPAC International Chemical Identifier)
  - компьютеризованный вариант систематического названия

Пополнение баз данных

Настоящее:

Тысячи людей в течение десятков лет вручную составляют библиографические справки и заполняют базы данных

Будущее:

Системы автоматического распознавания информации

- CLiDE (SimBioSys, Канада) — наиболее развитая программа из перечисленных, но нередко ошибается, требует вмешательства человека и «не знает» многих особенностей молекул.
- OSRA (Игорь Филиппов, Frederick National Laboratory for Cancer Research, NIH, DHHS, Frederick, MD) — проект с открытыми исходниками. Активно развивается, но обладает на данный момент худшим качеством распознавания.
- ChemoCR (Марк Циммерман, институт Фраунгофера, Германия) — находится в закрытой разработке: программное обеспечение недоступно, тем не менее опубликовано немалое количество работ по алгоритмам, используемым в ней.

Fin

http://td.chem.msu.ru/res/useful-links/