

# Phenol Decomposition Main Products Thermodynamic Characteristics

Vlada K. Batygina

*Moscow Institute of Thermal Technology (MITT),  
Moscow, 127273, Russia*

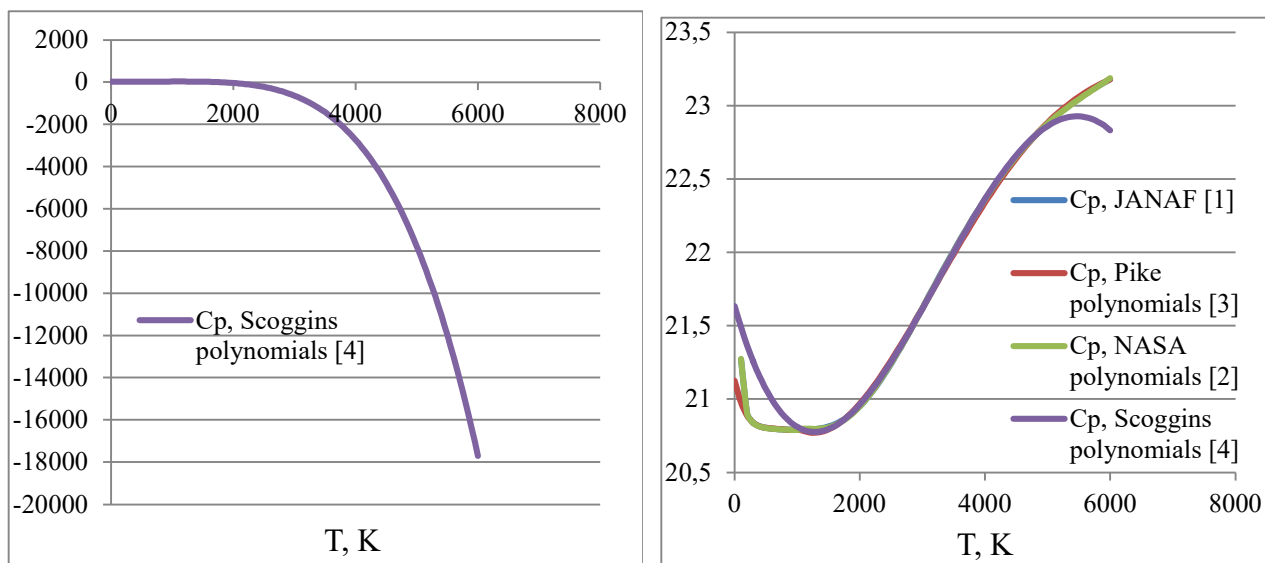
*Ishlinskyi Institute for Problems in Mechanics Russian Academy of Sciences (IPMech RAS),  
Moscow, 119526, Russia*

vladabatigi@yandex.ru

## Abstract

A comparison of the thermodynamic characteristics of the main substances involved in phenol pyrolysis, calculated using various initial data, is carried out.

Keywords: phenol, pyrolysis, thermodynamic characteristics



CO molar specific heat with Scoggins polynomials (from the left), C molar specific heat with different initial data (from the right)

УДК 533.1

# Термодинамические характеристики основных продуктов разложения фенола

В. К. Батыгина

*АО «Корпорация «Московский институт теплотехники»,  
Россия, Москва, 127273, Берёзовая аллея, 10  
Институт Проблем Механики им. А. Ю. Ишлинского РАН,  
Россия, Москва, 119526, проспект Вернадского, д. 101-1  
vladabatigi@yandex.ru*

## Аннотация

В данной работе проведено сравнение рассчитанных с помощью различных исходных данных термодинамических характеристик основных веществ, участвующих в пиролизе фенола.

Ключевые слова: фенол, пиролиз, термодинамические характеристики

## 1. Введение

Среди известных международных данных опубликованы термодинамические таблицы JANAF [1], а также существует ряд наборов полиномов для расчёта зависимости теплоёмкости, энтальпии и энтропии от температуры. Задача данной статьи заключается в том, чтобы сравнить приведённые характеристики между собой и определить, какие можно использовать для расчётов термохимического разложения фенола. В результате анализа были выбраны необходимые характеристики для работы [5].

## 2. Описание данных

Рассмотрены полиномы NASA [2], основанные на данных Гурвича и ряда других исследователей. Полиномы имеют следующий вид:

$$\frac{c_p(T)}{R_u} = a_1 T^{-2} + a_2 T^{-1} + a_3 + a_4 T + a_5 T^2 + a_6 T^3 + a_7 T^4,$$

$$\frac{H(T)}{R_u T} = -a_1 T^{-2} + \frac{a_2 \ln T}{T} + a_3 + \frac{a_4 T}{2} + \frac{a_5 T^2}{3} + \frac{a_6 T^3}{4} + \frac{a_7 T^4}{5} + \frac{a_8}{T},$$

$$\frac{S(T)}{R_u} = -\frac{a_1 T^{-2}}{2} - a_2 T^{-1} + a_3 \ln T + a_4 T + \frac{a_5 T^2}{2} + \frac{a_6 T^3}{3} + \frac{a_7 T^4}{4} + a_9,$$

где  $c_p$  – мольная теплоёмкость, Дж/моль/К;  $H$  – мольная энтальпия, Дж/моль;  $S$  – мольная энтропия, Дж/моль;  $R_u$  – универсальная газовая постоянная, Дж/моль/К;  $T$  – температура, К;  $a_{1..9}$  – полиномиальные коэффициенты.

Полиномы Пике, приведённые в [3], имеют вид

$$\frac{c_p(T)}{R_u} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4,$$

$$\frac{H(T)}{R_u T} = a_1 + \frac{a_2 T}{2} + \frac{a_3 T^2}{3} + \frac{a_4 T^3}{4} + \frac{a_5 T^4}{5} + \frac{a_6}{6},$$

$$\frac{S(T)}{R_u} = a_1 \ln T + a_2 T + \frac{a_3 T^2}{2} + \frac{a_4 T^3}{3} + \frac{a_5}{4} + a_7$$

Также рассмотрены приведённые в работе [4], посвящённой исследованию процесса разрушения фенола, полиномы для всех веществ, которые при этом образуются. В работе говорится о том, что используются полиномы NASA Glenn Research Center [2], однако ни форма полиномов, ни коэффициенты не совпадают, они выглядят практически идентичными полиномам Пике – за исключением последнего слагаемого в формуле для энтальпии:

$$\frac{c_p(T)}{R_u} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4,$$

$$\frac{H(T)}{R_u T} = a_1 + \frac{a_2 T}{2} + \frac{a_3 T^2}{3} + \frac{a_4 T^3}{4} + \frac{a_5 T^4}{5} + \frac{a_6}{T},$$

$$\frac{S(T)}{R_u} = a_1 \ln T + a_2 T + \frac{a_3 T^2}{2} + \frac{a_4 T^3}{3} + \frac{a_5}{4} + a_7$$

По всей видимости, полиномы NASA использовались в другой работе этого автора.

В таблице 1 показаны все рассмотренные вещества и их наличие в каждой из термодинамических баз.

Таблица 1

**Наличие свойств веществ в различных источниках**

Вещество	Термодинамические таблицы JANAF [1]	Полиномы NASA [2]	Полиномы Пике [3]	Полиномы Скоггинса [4]
H	+	+	+	+
H <sub>2</sub>	+	+	+	+
H <sub>2</sub> O	+	+	+	+
HCCO	–	+	–	+
HCO	–	+	+	+
ОН	+	+	+	+
С	+	+	+	+
СН	+	+	+	+
СН <sub>2</sub>	+	+	+	+
СН <sub>2</sub> O	–	+	–	+
СН <sub>3</sub>	+	+	+	+
СН <sub>3</sub> ОН	–	+	–	+
СН <sub>4</sub>	+	+	+	+
СО	+	+	+	+
С <sub>2</sub>	+	+	+	+
С <sub>2</sub> Н	+	+	+	+
С <sub>2</sub> Н <sub>2</sub>	+	+	+	+
С <sub>2</sub> Н <sub>4</sub>	+	+	+	+
С <sub>2</sub> Н <sub>5</sub>	–	+	–	+
С <sub>3</sub>	+	+	+	–

## Продолжение таблицы 1

Вещество	Термодинамические таблицы JANAF [1]	Полиномы NASA [2]	Полиномы Пике [3]	Полиномы Скоггинса [4]
C <sub>3</sub> H <sub>3</sub>	–	+	+	+
C <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	–	+	–	+
C <sub>4</sub> H	–	–	+	+
C <sub>4</sub> H <sub>2</sub>	–	+	+	+
C <sub>4</sub> H <sub>3</sub>	–	–	+	+
C <sub>4</sub> H <sub>4</sub>	–	–	–	+
C <sub>5</sub> H <sub>5</sub>	–	–	–	+
C <sub>5</sub> H <sub>6</sub>	–	+	+	+
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	–	+	–	+
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	–	+	+	+
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O	–	+	–	+
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OH	–	+	–	+
O	+	+	+	+

Стоит отметить, что в [4] приведены коэффициенты полиномов для двух диапазонов температур: от 300 К до 1000 К и от 1000 К до 5000 К. Однако второй набор коэффициентов даёт значения термодинамических характеристик, не соотносящиеся с реальностью, пример можно видеть на рис. 1. Поэтому в данной работе использовался только первый набор коэффициентов для всего диапазона температур, такие результаты были гораздо более адекватны.

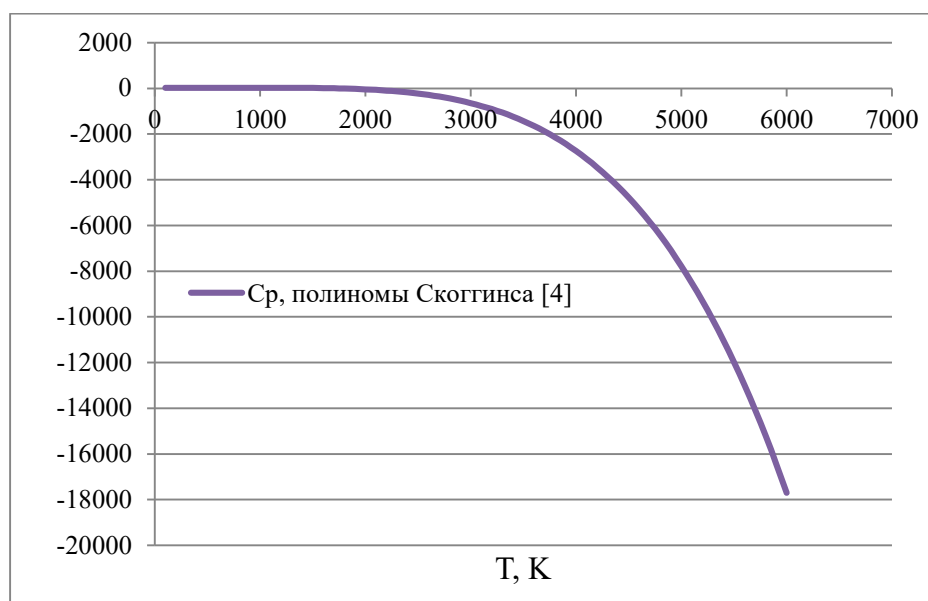


Рис. 1. Теплоёмкость CO, рассчитанная при помощи полиномов Скоггинса с разными коэффициентами для двух диапазонов температуры

Практически для всех рассмотренных веществ у полиномов Пике наблюдается скачок в месте стыка двух диапазонов температур, это хорошо видно на рис. 2.

В остальном для всех вариантов расчёта получаются близкие значения характеристик – наиболее отличающиеся для примера показаны на рис. 2–4.

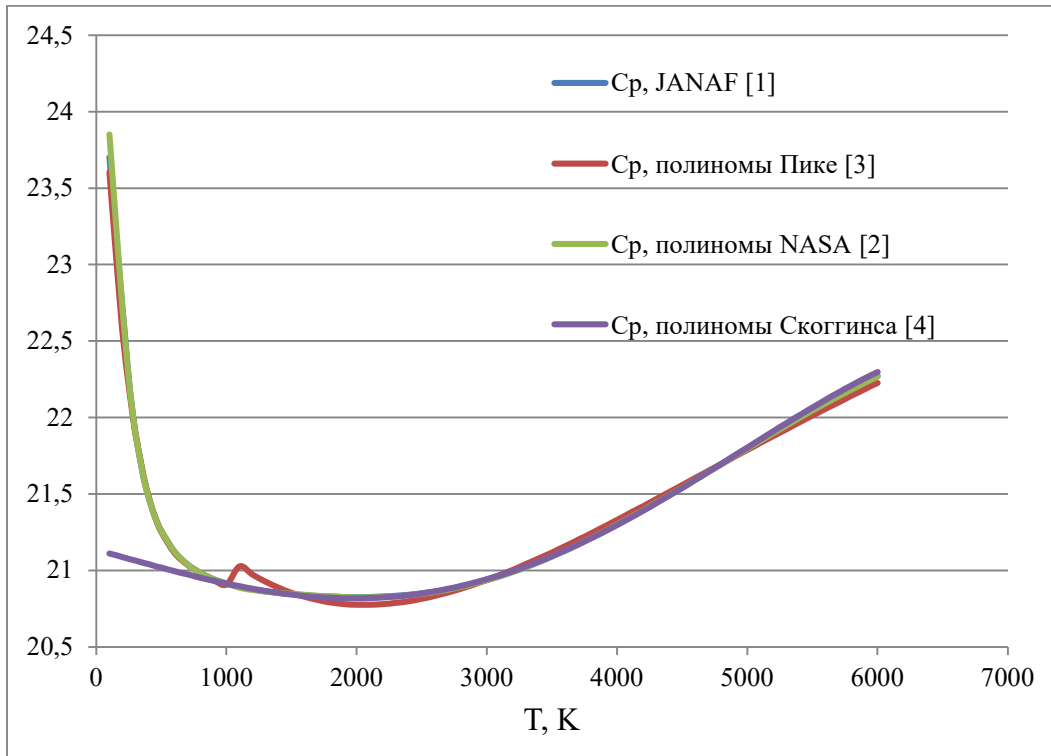


Рис. 2. Молярная теплоёмкость кислорода в зависимости от температуры

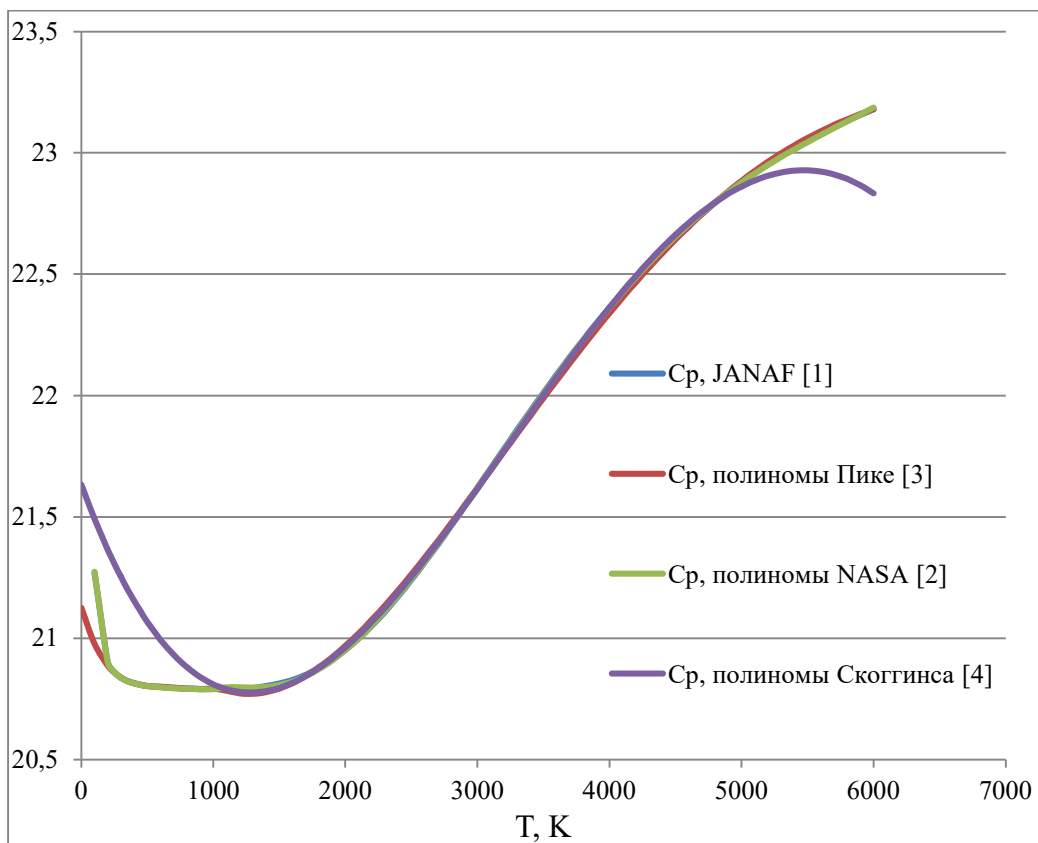
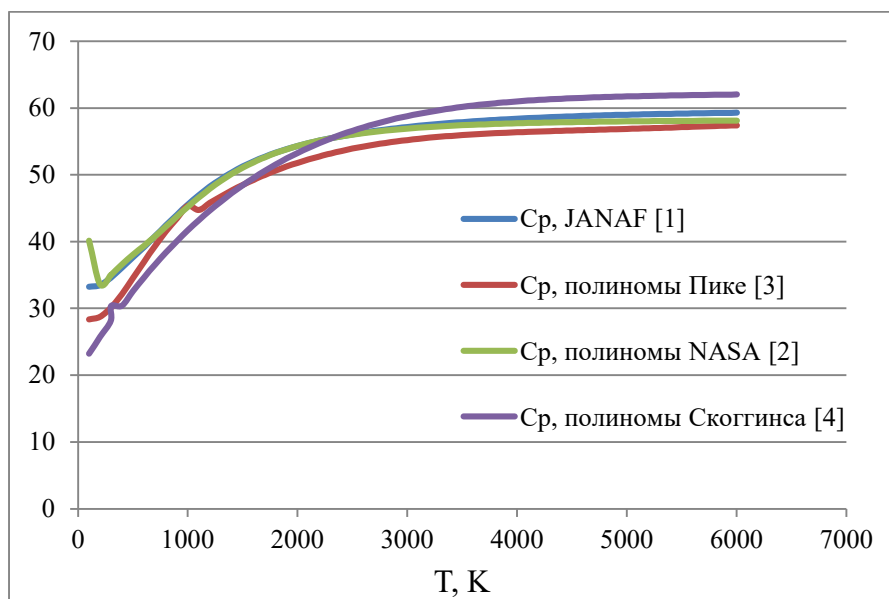


Рис. 3. Молярная теплоёмкость углерода в зависимости от температуры


 Рис. 4. Мольная теплоёмкость  $\text{CH}_2$  в зависимости от температуры

### 3. Заключение

Из анализа полученных зависимостей характеристик можно сделать вывод, что во всех рассмотренных источниках находятся близкие данные по теплоёмкости, энтальпии и энтропии веществ. Термодинамические таблицы JANAF содержат ограниченный набор веществ, полиномы NASA наиболее полная база данных, но некоторые вещества есть лишь среди полиномов Пике или Скоггинса, поэтому одним источником не обойтись. Но у Скоггинса, вероятно, данные для температуры  $> 1000$  К приведены с опечатками, что необходимо иметь в виду.

### Приложение

В таблицах 2–12 приведены все использованные в расчётах данные.

Таблица 2

 Параметры из базы данных JANAF [1] для H и H<sub>2</sub>

T	H			H <sub>2</sub>		
	$c_p$	S	H – H <sub>298.15</sub>	$c_p$	S	H – H <sub>298.15</sub>
0	0	0	-6.197	0	0	-8.467
100	20.786	92.009	-4.119	28.154	100.727	-5.468
200	20.786	106.417	-2.04	27.447	119.412	-2.774
250	20.786	111.055	-1.001	28.344	125.64	-1.378
298.15	20.786	114.716	0	28.836	130.68	0
300	20.786	114.845	0.038	28.849	130.858	0.053
350	20.786	118.049	1.078	29.081	135.325	1.502
400	20.786	120.825	2.117	29.181	139.216	2.959
450	20.786	123.273	3.156	29.229	142.656	4.42
500	20.786	125.463	4.196	29.26	145.737	5.882
600	20.786	129.253	6.274	29.327	151.077	8.811
700	20.786	132.457	8.353	29.441	155.606	11.749
800	20.786	135.232	10.431	29.624	159.548	14.702
900	20.786	137.681	12.51	29.881	163.051	17.676
1000	20.786	139.871	14.589	30.205	166.216	20.68

## Продолжение таблицы 2

Т	Н			Н <sub>2</sub>		
	с <sub>p</sub>	S	Н – Н <sub>298.15</sub>	с <sub>p</sub>	S	Н – Н <sub>298.15</sub>
1100	20.786	141.852	16.667	30.581	169.112	23.719
1200	20.786	143.66	18.746	30.992	171.79	26.797
1300	20.786	145.324	20.824	31.423	174.288	29.918
1400	20.786	146.865	22.903	31.861	176.633	33.082
1500	20.786	148.299	24.982	32.298	178.846	36.29
1600	20.786	149.64	27.06	32.725	180.944	39.541
1700	20.786	150.9	29.139	33.139	182.94	42.835
1800	20.786	152.088	31.217	33.537	184.846	46.169
1900	20.786	153.212	33.296	33.917	186.669	49.541
2000	20.786	154.278	35.375	34.28	188.418	52.951
2100	20.786	155.293	37.453	34.624	190.099	56.397
2200	20.786	156.26	39.532	34.952	191.718	59.876
2300	20.786	157.184	41.61	35.263	193.278	63.387
2400	20.786	158.068	43.689	35.559	194.785	66.928
2500	20.786	158.917	45.768	35.842	196.243	70.498
2600	20.786	159.732	47.846	36.111	197.654	74.096
2700	20.786	160.516	49.925	36.37	199.021	77.72
2800	20.786	161.272	52.004	36.618	200.349	81.369
2900	20.786	162.002	54.082	36.856	201.638	85.043
3000	20.786	162.706	56.161	37.087	202.891	88.74
3100	20.786	163.388	58.239	37.311	204.111	92.46
3200	20.786	164.048	60.318	37.528	205.299	96.202
3300	20.786	164.688	62.397	37.74	206.457	99.966
3400	20.786	165.308	64.475	37.946	207.587	103.75
3500	20.786	165.911	66.554	38.149	208.69	107.555
3600	20.786	166.496	68.632	38.348	209.767	111.38
3700	20.786	167.066	70.711	38.544	210.821	115.224
3800	20.786	167.62	72.79	38.738	211.851	119.089
3900	20.786	168.16	74.868	38.928	212.86	122.972
4000	20.786	168.686	76.947	39.116	213.848	126.874
4100	20.786	169.2	79.025	39.301	214.816	130.795
4200	20.786	169.7	81.104	39.484	215.765	134.734
4300	20.786	170.19	83.183	39.665	216.696	138.692
4400	20.786	170.667	85.261	39.842	217.61	142.667
4500	20.786	171.135	87.34	40.017	218.508	146.66
4600	20.786	171.591	89.418	40.188	219.389	150.67
4700	20.786	172.038	91.497	40.355	220.255	154.698
4800	20.786	172.476	93.576	40.518	221.106	158.741
4900	20.786	172.905	95.654	40.676	221.943	162.801
5000	20.786	173.325	97.733	40.829	222.767	166.876

Таблица 3

 Параметры из базы данных JANAF [1] для H<sub>2</sub>O и OH

Т	H <sub>2</sub> O			OH		
	c <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>	c <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>
0	0	0	-9.904	0	0	-9.172
100	33.299	152.388	-6.615	32.627	149.59	-6.139
200	33.349	175.485	-3.282	30.777	171.592	-2.976
298.15	33.59	188.834	0	29.986	183.708	0
300	33.596	189.042	0.062	29.977	183.894	0.055
400	34.262	198.788	3.452	29.65	192.466	3.035
500	35.226	206.534	6.925	29.521	199.066	5.992
600	36.325	213.052	10.501	29.527	204.447	8.943
700	37.495	218.739	14.192	29.663	209.007	11.902
800	38.721	223.825	18.002	29.917	212.983	14.88
900	39.987	228.459	21.938	30.264	216.526	17.888
1000	41.268	232.738	26	30.676	219.736	20.935
1100	42.536	236.731	30.191	31.124	222.68	24.024
1200	43.768	240.485	34.506	31.586	225.408	27.16
1300	44.945	244.035	38.942	32.046	227.955	30.342
1400	46.054	247.407	43.493	32.492	230.346	33.569
1500	47.09	250.62	48.151	32.917	232.602	36.839
1600	48.05	253.69	52.908	33.319	234.74	40.151
1700	48.935	256.63	57.758	33.694	236.771	43.502
1800	49.749	259.451	62.693	34.044	238.707	46.889
1900	50.496	262.161	67.706	34.369	240.557	50.31
2000	51.18	264.769	72.79	34.67	242.327	53.762
2100	51.823	267.282	77.941	34.95	244.026	57.243
2200	52.408	269.706	83.153	35.209	245.658	60.752
2300	52.947	272.048	88.421	35.449	247.228	64.285
2400	53.444	274.312	93.741	35.673	248.741	67.841
2500	53.904	276.503	99.108	35.881	250.202	71.419
2600	54.329	278.625	104.52	36.075	251.613	75.017
2700	54.723	280.683	109.973	36.256	252.978	78.633
2800	55.089	282.68	115.464	36.426	254.3	82.267
2900	55.43	284.619	120.99	36.586	255.581	85.918
3000	55.748	286.504	126.549	36.736	256.824	89.584
3100	56.044	288.337	132.139	36.878	258.031	93.265
3200	56.323	290.12	137.757	37.013	259.203	96.96
3300	56.583	291.858	143.403	37.14	260.344	100.667
3400	56.828	293.55	149.073	37.261	261.455	104.387
3500	57.058	295.201	154.768	37.376	262.537	108.119
3600	57.276	296.812	160.485	37.486	263.591	111.863
3700	57.48	298.384	166.222	37.592	264.62	115.617
3800	57.675	299.919	171.98	37.693	265.624	119.381
3900	57.859	301.42	177.757	37.791	266.604	123.155
4000	58.033	302.887	183.552	37.885	267.562	126.939



Продолжение таблицы 3

Т	H <sub>2</sub> O			OH		
	c <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>	c <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>
4100	58.199	304.322	189.363	37.976	268.499	130.732
4200	58.357	305.726	195.191	38.064	269.415	134.534
4300	58.507	307.101	201.034	38.15	270.311	138.345
4400	58.65	308.448	206.892	38.233	271.189	142.164
4500	58.787	309.767	212.764	38.315	272.05	145.991
4600	58.918	311.061	218.65	38.394	272.893	149.827
4700	59.044	312.329	224.548	38.472	273.719	153.67
4800	59.164	313.574	230.458	38.549	274.53	157.521
4900	59.275	314.795	236.38	38.625	275.326	161.38
5000	59.39	315.993	242.313	38.699	276.107	165.246

Таблица 4

Параметры из базы данных JANAF [1] для C и CH

Т	C			CH		
	c <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>	c <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>
0	0	0	-6.536	0	0	-8.73
100	21.271	135.18	-4.15	29.261	151.151	-5.783
200	20.904	149.768	-2.048	29.171	171.393	-2.863
250	20.861	154.427	-1.004	29.167	177.902	-1.404
298.15	20.838	158.1	0	29.171	183.04	0
300	20.838	158.228	0.039	29.171	183.22	0.054
350	20.824	161.439	1.08	29.187	187.718	1.513
400	20.815	164.219	2.121	29.223	191.617	2.973
450	20.809	166.671	3.162	29.291	195.063	4.436
500	20.804	168.863	4.202	29.4	198.154	5.903
600	20.799	172.655	6.282	29.757	203.543	8.859
700	20.795	175.861	8.362	30.292	208.168	11.86
800	20.793	178.638	10.441	30.967	212.256	14.922
900	20.792	181.087	12.52	31.739	215.947	18.057
1000	20.791	183.278	14.6	32.565	219.334	21.272
1100	20.791	185.259	16.679	33.411	222.477	24.57
1200	20.793	187.068	18.758	34.25	225.42	27.954
1300	20.796	188.733	20.837	35.062	228.194	31.42
1400	20.803	190.274	22.917	35.831	230.821	34.965
1500	20.814	191.71	24.998	36.548	233.318	38.584
1600	20.829	193.053	27.08	37.208	235.698	42.272
1700	20.85	194.317	29.164	37.808	237.972	46.024
1800	20.878	195.509	31.25	38.348	240.149	49.832
1900	20.912	196.639	33.34	38.83	242.235	53.691
2000	20.952	197.713	35.433	39.257	244.238	57.596
2100	20.999	198.736	37.53	39.632	246.163	61.541
2200	21.052	199.714	39.633	39.961	248.014	65.521
2300	21.11	200.651	41.741	40.247	249.797	69.532

Продолжение таблицы 4

Т	С			СН		
	$c_p$	S	H – H <sub>298.15</sub>	$c_p$	S	H – H <sub>298.15</sub>
2400	21.174	201.551	43.855	40.495	251.515	73.569
2500	21.241	202.417	45.976	40.709	253.173	77.63
2600	21.313	203.251	48.103	40.893	254.773	81.71
2700	21.387	204.057	50.238	41.051	256.319	85.807
2800	21.464	204.836	52.381	41.187	257.815	89.919
2900	21.542	205.591	54.531	41.303	259.262	94.044
3000	21.621	206.322	56.689	41.402	260.664	98.179
3100	21.701	207.032	58.856	41.488	262.023	102.324
3200	21.78	207.723	61.03	41.562	263.341	106.477
3300	21.859	208.394	63.212	41.627	264.621	110.636
3400	21.936	209.048	65.401	41.683	265.865	114.802
3500	22.012	209.685	67.599	41.734	267.074	118.973
3600	22.087	210.306	69.804	41.78	268.25	123.148
3700	22.159	210.912	72.016	41.822	269.396	127.328
3800	22.23	211.504	74.235	41.861	270.511	131.513
3900	22.298	212.082	76.462	41.899	271.599	135.701
4000	22.363	212.648	78.695	41.936	272.661	139.892
4100	22.426	213.201	80.934	41.973	273.696	144.088
4200	22.487	213.742	83.18	42.01	274.708	148.287
4300	22.544	214.272	85.432	42.048	275.697	152.49
4400	22.6	214.791	87.689	42.087	276.664	156.696
4500	22.652	215.299	89.951	42.127	277.611	160.907
4600	22.702	215.797	92.219	42.17	278.537	165.122
4700	22.75	216.286	94.492	42.214	279.444	169.341
4800	22.795	216.766	96.769	42.26	280.334	173.565
4900	22.838	217.236	99.051	42.309	281.206	177.793
5000	22.878	217.698	101.337	42.359	282.061	182.027

Таблица 5

 Параметры из базы данных JANAF [1] для CH<sub>2</sub> и CH<sub>3</sub>

Т	CH <sub>2</sub>			CH <sub>3</sub>		
	$c_p$	S	H – H <sub>298.15</sub>	$c_p$	S	H – H <sub>298.15</sub>
0	0	0	-9.994	0	0	-10.407
100	33.258	157.288	-6.668	33.395	155.665	-7.08
200	33.499	180.376	-3.336	35.638	179.38	-3.646
298.15	34.6	193.931	0	38.693	194.17	0
300	34.627	194.146	0.064	38.753	194.41	0.072
400	36.142	204.313	3.602	42.041	206.008	4.111
500	37.663	212.541	7.292	45.252	215.737	8.477
600	39.206	219.544	11.135	48.288	224.258	13.155
700	40.808	225.707	15.135	51.174	231.921	18.13
800	42.442	231.263	19.298	53.926	238.935	23.386
900	44.048	236.355	23.623	56.527	245.438	28.91

Продолжение таблицы 5

Т	CH <sub>2</sub>			CH <sub>3</sub>		
	с <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>	с <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>
1000	45.571	241.075	28.105	58.954	251.521	34.686
1100	46.976	245.486	32.733	61.187	257.247	40.694
1200	48.247	249.629	37.495	63.217	262.659	46.916
1300	49.379	253.536	42.378	65.048	267.793	53.331
1400	50.381	257.233	47.367	66.69	272.675	59.919
1500	51.264	260.74	52.45	68.156	277.327	66.663
1600	52.04	264.073	57.616	69.463	281.768	73.545
1700	52.724	267.249	62.855	70.628	286.015	80.551
1800	53.327	270.28	68.158	71.667	290.082	87.667
1900	53.861	273.178	73.518	72.594	293.982	94.881
2000	54.336	275.953	78.928	73.422	297.727	102.182
2100	54.76	278.615	84.384	74.165	301.327	109.562
2200	55.142	281.171	89.879	74.831	304.793	117.013
2300	55.485	283.63	95.411	75.43	308.133	124.526
2400	55.797	285.998	100.975	75.971	311.355	132.097
2500	56.08	288.282	106.569	76.459	314.466	139.719
2600	56.338	290.486	112.19	76.902	317.474	147.387
2700	56.575	292.617	117.836	77.304	320.384	155.098
2800	56.792	294.678	123.505	77.67	323.202	162.847
2900	56.993	296.675	129.194	78.003	325.933	170.63
3000	57.177	298.61	134.903	78.309	328.583	178.446
3100	57.348	300.488	140.629	78.588	331.155	186.291
3200	57.506	302.311	146.372	78.845	333.655	194.163
3300	57.652	304.083	152.13	79.082	336.084	202.06
3400	57.787	305.806	157.902	79.3	338.449	209.979
3500	57.913	307.483	163.687	79.501	340.75	217.919
3600	58.03	309.116	169.484	79.687	342.992	225.879
3700	58.139	310.708	175.293	79.86	345.178	233.856
3800	58.24	312.259	181.112	80.02	347.31	241.85
3900	58.334	313.773	186.94	80.169	349.391	249.86
4000	58.421	315.251	192.778	80.308	351.422	257.884
4100	58.502	316.695	198.624	80.438	353.407	265.921
4200	58.577	318.106	204.478	80.559	355.346	273.971
4300	58.647	319.485	210.339	80.672	357.243	282.033
4400	58.713	320.834	216.207	80.778	359.099	290.105
4500	58.773	322.154	222.082	80.878	360.916	298.188
4600	58.83	323.446	227.962	80.972	362.694	306.281
4700	58.882	324.712	233.848	81.06	364.437	314.382
4800	58.931	325.952	239.738	81.143	366.144	322.492
4900	58.976	327.168	245.634	81.221	367.818	330.611
5000	59.018	328.36	251.533	81.295	369.46	338.737

Таблица 6

 Параметры из базы данных JANAF [1] для CH<sub>4</sub> и CO

T	CH <sub>4</sub>			CO		
	c <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>	c <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>
0	0	0	-10.024	0	0	-8.671
100	33.258	149.5	-6.698	29.104	165.85	-5.769
200	33.473	172.577	-3.368	29.108	186.025	-2.858
298.15	35.639	186.251	0	29.142	197.653	0
300	35.708	186.472	0.066	29.142	197.833	0.054
400	40.5	197.356	3.861	29.342	206.238	2.976
500	46.342	207.014	8.2	29.794	212.831	5.931
600	52.227	215.987	13.13	30.443	218.319	8.942
700	57.794	224.461	18.635	31.171	223.066	12.023
800	62.932	232.518	24.675	31.899	227.277	15.177
900	67.601	240.205	31.205	32.577	231.074	18.401
1000	71.795	247.549	38.179	33.183	234.538	21.69
1100	75.529	254.57	45.549	33.71	237.726	25.035
1200	78.833	261.287	53.27	34.175	240.679	28.43
1300	81.744	267.714	61.302	34.572	243.431	31.868
1400	84.305	273.868	69.608	34.92	246.006	35.343
1500	86.556	279.763	78.153	35.217	248.426	38.85
1600	88.537	285.413	86.91	35.48	250.707	42.385
1700	90.283	290.834	95.853	35.71	252.865	45.945
1800	91.824	296.039	104.96	35.911	254.912	49.526
1900	93.188	301.041	114.212	36.091	256.859	53.126
2000	94.399	305.853	123.592	36.25	258.714	56.744
2100	95.477	310.485	133.087	36.392	260.486	60.376
2200	96.439	314.949	142.684	36.518	262.182	64.021
2300	97.301	319.255	152.371	36.635	263.808	67.679
2400	98.075	323.413	162.141	36.74	265.369	71.348
2500	98.772	327.431	171.984	36.836	266.871	75.027
2600	99.401	331.317	181.893	36.924	268.318	78.715
2700	99.971	335.08	191.862	37.003	269.713	82.411
2800	100.489	338.725	201.885	37.083	271.06	86.116
2900	100.96	342.26	211.958	37.15	272.362	89.827
3000	101.389	345.69	222.076	37.217	273.623	93.546
3100	101.782	349.021	232.235	37.279	274.844	97.271
3200	102.143	352.258	242.431	37.338	276.029	101.001
3300	102.474	355.406	252.662	37.392	277.178	104.738
3400	102.778	358.47	262.925	37.443	278.295	108.48
3500	103.06	361.453	273.217	37.493	279.382	112.227
3600	103.319	364.36	283.536	37.543	280.438	115.978
3700	103.56	367.194	293.881	37.589	281.468	119.735
3800	103.783	369.959	304.248	37.631	282.471	123.496
3900	103.99	372.658	314.637	37.673	283.449	127.261
4000	104.183	375.293	325.045	37.715	284.403	131.031

Продолжение таблицы 6

Т	CH <sub>4</sub>			CO		
	c <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>	c <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>
4100	104.363	377.868	335.473	37.756	285.335	134.804
4200	104.531	380.385	345.918	37.794	286.245	138.582
4300	104.688	382.846	356.379	37.832	287.135	142.363
4400	104.834	385.255	366.855	37.869	288.005	146.148
4500	104.972	387.612	377.345	37.903	288.856	149.937
4600	105.101	389.921	387.849	37.941	289.69	153.729
4700	105.223	392.182	398.365	37.974	290.506	157.525
4800	105.337	394.399	408.893	38.007	291.306	161.324
4900	105.445	396.572	419.432	38.041	292.09	165.126
5000	105.546	398.703	429.982	38.074	292.859	168.932

Таблица 7

Параметры из базы данных JANAF [1] для C<sub>2</sub> и C<sub>2</sub>H

Т	C <sub>2</sub>			C <sub>2</sub> H		
	c <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>	c <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>
0	0	0	-10.578	0	0	-9.404
100	29.765	158.761	-7.667	29.242	172.435	-6.498
200	40.456	182.316	-4.204	32.702	193.53	-3.435
250	43.379	191.73	-2.092	35.084	201.087	-1.739
298.15	43.145	199.382	0	37.104	207.444	0
300	43.1	199.649	0.08	37.175	207.673	0.069
350	41.443	206.176	2.196	38.922	213.539	1.972
400	39.65	211.59	4.222	40.395	218.835	3.956
450	38.191	216.172	6.166	41.675	223.669	6.009
500	37.141	220.138	8.048	42.818	228.12	8.122
600	36	226.793	11.696	44.837	236.109	12.507
700	35.622	232.307	15.273	46.615	243.157	17.081
800	35.603	237.06	18.833	48.212	249.487	21.824
900	35.746	241.261	22.399	49.651	255.251	26.718
1000	35.963	245.038	25.984	50.943	260.55	31.749
1100	36.212	248.477	29.593	52.102	265.461	36.902
1200	36.479	251.639	33.227	53.142	270.04	42.165
1300	36.756	254.57	36.889	54.081	274.331	47.527
1400	37.038	257.304	40.579	54.935	278.37	52.979
1500	37.324	259.869	44.297	55.72	282.188	58.512
1600	37.61	262.287	48.043	56.451	285.807	64.121
1700	37.896	264.576	51.819	57.14	289.251	69.801
1800	38.179	266.75	55.622	57.795	292.535	75.548
1900	38.457	268.822	59.454	58.424	295.677	81.359
2000	38.729	270.801	63.314	59.032	298.689	87.232
2100	38.994	272.697	67.2	59.622	301.584	93.165
2200	39.251	274.517	71.112	60.194	304.371	99.156
2300	39.5	276.268	75.05	60.75	307.059	105.203

Продолжение таблицы 7

	C <sub>2</sub>			C <sub>2</sub> H		
2400	39.74	277.954	79.012	61.289	309.656	111.305
2500	39.972	279.581	82.997	61.81	312.168	117.46
2600	40.197	281.153	87.006	62.313	314.602	123.666
2700	40.414	282.674	91.037	62.796	316.963	129.922
2800	40.624	284.148	95.088	63.258	319.255	136.225
2900	40.827	285.577	99.161	63.698	321.483	142.573
3000	41.026	286.964	103.254	64.115	323.649	148.964
3100	41.219	288.313	107.366	64.509	325.758	155.395
3200	41.409	289.624	111.498	64.878	327.812	161.865
3300	41.595	290.901	115.648	65.223	329.814	168.37
3400	41.778	292.146	119.816	65.544	331.766	174.909
3500	41.96	293.36	124.003	65.84	333.67	181.478
3600	42.14	294.544	128.208	66.113	335.529	188.076
3700	42.318	295.701	132.431	66.362	337.344	194.7
3800	42.496	296.832	136.672	66.588	339.117	201.347
3900	42.674	297.938	140.931	66.792	340.849	208.017
4000	42.852	299.021	145.207	66.975	342.542	214.705
4100	43.03	300.081	149.501	67.138	344.198	221.411
4200	43.209	301.12	153.813	67.281	345.818	228.132
4300	43.388	302.139	158.143	67.407	347.402	234.867
4400	43.568	303.139	162.49	67.515	348.953	241.613
4500	43.749	304.12	166.856	67.607	350.472	248.369
4600	43.932	305.083	171.24	67.684	351.958	255.134
4700	44.115	306.03	175.643	67.746	353.415	261.905
4800	44.299	306.961	180.063	67.796	354.842	268.683
4900	44.485	307.876	184.503	67.834	356.24	275.464
5000	44.671	308.777	188.96	67.86	357.611	282.249

Таблица 8

 Параметры из базы данных JANAF [1] для C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> и C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>

T	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>			C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>		
	c <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>	c <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>
0	0	0	-10.012	0	0	-10.518
100	29.347	163.294	-7.104	33.27	180.542	-7.192
200	35.585	185.097	-3.925	35.359	203.955	-3.804
298.15	44.095	200.958	0	42.886	219.33	0
300	44.229	201.231	0.082	43.063	219.596	0.079
400	50.48	214.856	4.833	53.048	233.343	4.882
500	54.869	226.61	10.108	62.477	246.215	10.668
600	58.287	236.924	15.771	70.663	258.348	17.335
700	61.149	246.127	21.745	77.714	269.783	24.763
800	63.76	254.466	27.992	83.84	280.57	32.847
900	66.111	262.113	34.487	89.2	290.761	41.505

Продолжение таблицы 8

Т	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>			C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>		
	с <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>	с <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>
1000	68.275	269.192	41.208	93.899	300.408	50.665
1100	70.245	275.793	48.136	98.018	309.555	60.266
1200	72.053	281.984	55.252	101.626	318.242	70.252
1300	73.693	287.817	62.54	104.784	326.504	80.576
1400	75.178	293.334	69.985	107.55	334.372	91.196
1500	76.53	298.567	77.572	109.974	341.877	102.074
1600	77.747	303.546	85.286	112.103	349.044	113.181
1700	78.847	308.293	93.117	113.976	355.898	124.486
1800	79.852	312.829	101.053	115.628	362.46	135.968
1900	80.76	317.171	109.084	117.089	368.752	147.606
2000	81.605	321.335	117.203	118.386	374.791	159.381
2100	82.362	325.335	125.401	119.54	380.596	171.278
2200	83.065	329.183	133.673	120.569	386.181	183.284
2300	83.712	332.89	142.012	121.491	391.561	195.388
2400	84.312	336.465	150.414	122.319	396.75	207.58
2500	84.858	339.918	158.873	123.064	401.758	219.849
2600	85.37	343.256	167.384	123.738	406.598	232.19
2700	85.846	346.487	175.945	124.347	411.28	244.595
2800	86.295	349.618	184.553	124.901	415.812	257.058
2900	86.713	352.653	193.203	125.404	420.204	269.573
3000	87.111	355.6	201.895	125.864	424.463	282.137
3100	87.474	358.462	210.624	126.284	428.597	294.745
3200	87.825	361.245	219.389	126.67	432.613	307.393
3300	88.164	363.952	228.189	127.024	436.516	320.078
3400	88.491	366.589	237.022	127.35	440.313	332.797
3500	88.805	369.159	245.886	127.65	444.009	345.547
3600	89.101	371.665	254.782	127.928	447.609	358.326
3700	89.388	374.11	263.706	128.186	451.118	371.132
3800	89.666	376.498	272.659	128.424	454.539	383.962
3900	89.935	378.83	281.639	128.646	457.878	396.816
4000	90.194	381.11	290.646	128.852	461.138	409.691
4100	90.439	383.341	299.678	129.045	464.322	422.586
4200	90.678	385.523	308.733	129.224	467.434	435.5
4300	90.91	387.659	317.813	129.392	470.476	448.43
4400	91.137	389.752	326.915	129.549	473.453	461.378
4500	91.358	391.802	336.04	129.696	476.366	474.34
4600	91.563	393.813	345.186	129.835	479.218	487.317
4700	91.768	395.784	354.353	129.965	482.012	500.307
4800	91.97	397.718	363.54	130.087	484.749	513.309
4900	92.171	399.617	372.747	130.202	487.433	526.324
5000	92.37	401.481	381.974	130.311	490.064	539.349

Таблица 9

Параметры из базы данных JANAF [1] для C<sub>3</sub> и O

T	C <sub>3</sub>			O		
	c <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>	c <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>
0	0	0	-11.761	0	0	-6.725
100	42.459	193.021	-7.929	23.703	135.947	-4.518
200	39.861	221.795	-3.791	22.734	152.153	-2.186
298.15	37.74	237.246	0	21.911	161.058	0
300	37.719	237.479	0.07	21.901	161.194	0.041
400	37.497	248.274	3.821	21.482	167.43	2.207
500	38.38	256.727	7.612	21.257	172.197	4.343
600	39.706	263.841	11.515	21.124	176.06	6.462
700	41.125	270.069	15.557	21.04	179.31	8.57
800	42.48	275.65	19.738	20.984	182.116	10.671
900	43.714	280.726	24.049	20.944	184.585	12.767
1000	44.815	285.39	28.477	20.915	186.79	14.86
1100	45.786	289.708	33.008	20.893	188.782	16.95
1200	46.647	293.729	37.63	20.877	190.599	19.039
1300	47.413	297.494	42.334	20.864	192.27	21.126
1400	48.095	301.033	47.11	20.853	193.816	23.212
1500	48.71	304.372	51.951	20.845	195.254	25.296
1600	49.267	307.534	56.85	20.838	196.599	27.381
1700	49.773	310.536	61.802	20.833	197.862	29.464
1800	50.233	313.394	66.803	20.83	199.053	31.547
1900	50.66	316.122	71.848	20.827	200.179	33.63
2000	51.053	318.731	76.934	20.826	201.247	35.713
2100	51.417	321.23	82.057	20.827	202.263	37.796
2200	51.76	323.63	87.216	20.83	203.232	39.878
2300	52.081	325.938	92.408	20.835	204.158	41.962
2400	52.384	328.161	97.632	20.841	205.045	44.045
2500	52.667	330.305	102.885	20.851	205.896	46.13
2600	52.936	332.376	108.165	20.862	206.714	48.216
2700	53.189	334.379	113.471	20.877	207.502	50.303
2800	53.43	336.318	118.802	20.894	208.261	52.391
2900	53.659	338.197	124.157	20.914	208.995	54.481
3000	53.877	340.019	129.534	20.937	209.704	56.574
3100	54.084	341.789	134.932	20.963	210.391	58.669
3200	54.283	343.51	140.35	20.991	211.057	60.767
3300	54.476	345.183	145.788	21.022	211.704	62.867
3400	54.66	346.812	151.245	21.056	212.332	64.971
3500	54.834	348.399	156.72	21.092	212.943	67.079
3600	55.003	349.946	162.212	21.13	213.537	69.19
3700	55.164	351.455	167.72	21.17	214.117	71.305
3800	55.321	352.929	173.244	21.213	214.682	73.424
3900	55.472	354.368	178.784	21.257	215.234	75.547
4000	55.618	355.774	184.339	21.302	215.772	77.675



Продолжение таблицы 9

Т	С <sub>3</sub>			О		
	с <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>	с <sub>p</sub>	S	H – H <sub>298.15</sub>
4100	55.757	357.149	189.907	21.349	216.299	79.808
4200	55.893	358.494	195.49	21.397	216.814	81.945
4300	56.024	359.811	201.086	21.445	217.318	84.087
4400	56.151	361.1	206.695	21.495	217.812	86.234
4500	56.275	362.364	212.316	21.545	218.295	88.386
4600	56.392	363.602	217.949	21.596	218.769	90.543
4700	56.506	364.816	223.594	21.647	219.234	92.705
4800	56.618	366.007	229.25	21.697	219.69	94.872
4900	56.726	367.175	234.918	21.748	220.138	97.045
5000	56.831	368.322	240.596	21.799	220.578	99.222

Таблица 10

**Коэффициенты полиномов NASA [2] для всех рассматриваемых веществ**

	a <sub>1</sub>	a <sub>2</sub>	a <sub>3</sub>	a <sub>4</sub>	a <sub>5</sub>	a <sub>6</sub>	a <sub>7</sub>	a <sub>8</sub>	a <sub>9</sub>
H	0.00E+00	0.00E+00	2.50E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	2.55E+04	-4.47E-01
	6.08E+01	-1.82E-01	2.50E+00	-1.23E-07	3.73E-11	-5.69E-15	3.41E-19	2.55E+04	-4.48E-01
H <sub>2</sub>	4.08E+04	-8.01E+02	8.21E+00	-1.27E-02	1.75E-05	-1.20E-08	3.37E-12	2.68E+03	-3.04E+01
	5.61E+05	-8.37E+02	2.98E+00	1.25E-03	-3.74E-07	5.94E-11	-3.61E-15	5.34E+03	-2.20E+00
H <sub>2</sub> O	-3.95E+04	5.76E+02	9.32E-01	7.22E-03	-7.34E-06	4.96E-09	-1.34E-12	-3.30E+04	1.72E+01
	1.03E+06	-2.41E+03	4.65E+00	2.29E-03	-6.84E-07	9.43E-11	-4.82E-15	-1.38E+04	-7.98E+00
HCCO	6.96E+04	-1.16E+03	9.46E+00	-2.33E-03	5.16E-06	-3.53E-09	8.60E-13	2.54E+04	-2.73E+01
	1.09E+06	-4.50E+03	1.25E+01	-6.34E-04	1.11E-07	-1.13E-11	5.69E-16	4.65E+04	-5.10E+01
HCO	-1.19E+04	2.15E+02	2.73E+00	1.81E-03	4.98E-06	-5.81E-09	1.87E-12	2.91E+03	1.14E+01
	6.95E+05	-3.66E+03	9.60E+00	-1.12E-03	2.88E-07	-3.63E-11	1.81E-15	2.54E+04	-3.58E+01
OH	-2.00E+03	9.30E+01	3.05E+00	1.53E-03	-3.16E-06	3.32E-09	-1.14E-12	2.99E+03	4.67E+00
	1.02E+06	-2.51E+03	5.12E+00	1.31E-04	-8.28E-08	2.01E-11	-1.56E-15	2.02E+04	-1.10E+01
C	6.50E+02	-9.65E-01	2.50E+00	-1.28E-05	1.98E-08	-1.61E-11	5.31E-15	8.55E+04	4.75E+00
	-1.29E+05	1.72E+02	2.65E+00	-3.35E-04	1.74E-07	-2.90E-11	1.64E-15	8.41E+04	4.13E+00
CH	2.22E+04	-3.41E+02	5.53E+00	-5.79E-03	7.97E-06	-4.47E-09	9.60E-13	7.24E+04	-9.11E+00
	2.06E+06	-5.40E+03	7.86E+00	-7.97E-04	1.76E-07	-1.98E-11	5.03E-16	1.06E+05	-3.15E+01
CH <sub>2</sub>	3.22E+04	-2.88E+02	4.20E+00	3.46E-03	-6.75E-06	7.65E-09	-2.87E-12	4.73E+04	-2.14E+00
	2.55E+06	-7.97E+03	1.23E+01	-1.70E-03	2.99E-07	-2.77E-11	1.05E-15	9.64E+04	-6.09E+01
CH <sub>2</sub> O	-1.17E+05	1.87E+03	-6.89E+00	2.64E-02	-2.19E-05	1.01E-08	-2.02E-12	-2.31E+04	6.42E+01
	1.70E+06	-7.62E+03	1.47E+01	-1.65E-03	3.29E-07	-3.50E-11	1.53E-15	3.15E+04	-7.39E+01
CH <sub>3</sub>	-2.88E+04	5.09E+02	2.00E-01	1.36E-02	-1.43E-05	1.01E-08	-3.03E-12	1.41E+04	2.02E+01
	2.76E+06	-9.34E+03	1.49E+01	-1.44E-03	2.44E-07	-2.22E-11	8.40E-16	7.48E+04	-7.92E+01
CH <sub>3</sub> OH	-2.42E+05	4.03E+03	-2.05E+01	6.90E-02	-7.60E+05	4.60E-08	-1.16E-11	-4.43E+04	1.40E+02
	3.41E+06	-1.35E+04	2.26E+01	-2.14E-03	3.73E-07	-3.50E-11	1.37E-15	5.64E+04	-1.28E+02
CH <sub>4</sub>	-1.77E+05	2.79E+03	-1.20E+01	3.92E-02	-3.62E-05	2.03E-08	-4.98E-12	-2.33E+04	8.90E+01
	3.73E+06	-1.38E+04	2.05E+01	-1.96E-03	4.73E-07	-3.73E-11	1.62E-15	7.53E+04	-1.22E+02

Продолжение таблицы 10

	a <sub>1</sub>	a <sub>2</sub>	a <sub>3</sub>	a <sub>4</sub>	a <sub>5</sub>	a <sub>6</sub>	a <sub>7</sub>	a <sub>8</sub>	a <sub>9</sub>
CO	1.49E+04	-2.92E+02	5.72E+00	-8.18E-03	1.46E-05	-1.09E-08	3.03E-12	-1.30E+04	-7.86E+00
	4.62E+05	-1.94E+03	5.92E+00	-5.66E-04	1.40E-07	-1.79E-11	9.62E-16	-2.47E+03	-1.39E+01
C <sub>2</sub>	5.56E+05	-9.98E+03	6.68E+01	-1.74E-01	2.45E-04	-1.70E-07	4.68E-11	1.45E+05	-3.45E+02
	-9.69E+05	3.56E+03	-5.06E-01	2.95E-03	-7.14E-07	8.67E-11	-4.08E-15	7.68E+04	3.34E+01
C <sub>2</sub> H	1.34E+04	-5.07E+02	7.77E+00	-6.51E-03	1.03E-05	-5.88E-09	1.23E-12	6.89E+04	-1.87E+01
	3.92E+06	-1.20E+04	1.76E+01	-3.66E-03	6.99E-07	-6.83E-11	2.72E-15	1.43E+05	-9.56E+01
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	1.60E+05	-2.22E+03	1.27E+01	-7.98E-03	8.05E-06	-2.43E-09	-7.53E-14	3.71E+04	-5.24E+01
	1.71E+06	-5.93E+03	1.24E+01	1.31E-04	-1.36E-07	2.71E-11	-1.30E-15	6.27E+04	-5.82E+01
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	-1.16E+05	2.55E+03	-1.61E+01	6.63E-02	-7.89E-05	5.13E-08	-1.37E-11	-6.18E+03	1.09E+02
	3.41E+06	-1.37E+04	2.37E+01	-2.42E-03	4.43E-07	-4.35E-11	1.78E-15	8.82E+04	-1.37E+02
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	-1.41E+05	2.71E+03	-1.53E+01	6.45E-02	-7.26E-05	4.60E-08	-1.22E-11	5.98E+02	1.09E+02
	4.17E+06	-1.66E+04	2.80E+01	-3.05E-03	5.68E-07	-5.68E-11	2.36E-15	1.14E+05	-1.64E+02
C <sub>3</sub>	-4.35E+04	6.66E+02	1.45E+00	7.43E-03	-3.81E-06	-2.34E-11	4.41E-13	9.64E+04	2.03E+01
	4.51E+06	-1.46E+04	2.28E+01	-8.54E-03	2.15E-06	-2.10E-10	6.35E-15	1.91E+05	-1.27E+02
C <sub>3</sub> H <sub>3</sub>	6.19E+04	-8.91E+02	6.35E+00	1.63E-02	-1.95E-05	1.42E-08	-4.20E-12	4.27E+04	-1.23E+01
	2.99E+06	-1.12E+04	2.22E+01	-2.07E-03	4.12E-07	-4.44E-11	1.97E-15	1.06E+05	-1.19E+02
C <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	-3.56E+04	8.33E+02	-4.07E+00	4.11E-02	-4.47E-05	2.85E-08	-7.70E-12	1.71E+04	4.52E+01
	3.71E+06	-1.49E+04	2.73E+01	-2.65E-03	4.86E-07	-4.79E-11	1.96E-15	1.10E+05	-1.57E+02
C <sub>4</sub> H <sub>2</sub>	2.47E+05	-3.90E+03	2.37E+01	-2.21E-02	2.78E-05	-1.58E-08	3.42E-12	7.09E+04	-1.11E+02
	2.33E+06	-8.93E+03	2.11E+01	-1.37E-03	2.33E-07	-2.12E-11	8.05E-16	1.06E+05	-1.09E+02
C <sub>5</sub> H <sub>6</sub>	-1.89E+05	4.74E+03	-3.89E+01	1.67E-01	-2.14E-04	1.44E-07	-3.91E-11	-5.67E+03	2.28E+02
	4.43E+06	-2.12E+04	4.31E+01	-3.91E-03	7.31E-07	-7.33E-11	3.04E-15	1.38E+05	-2.61E+02
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	-1.21E+05	3.53E+03	-3.12E+01	1.47E-01	-1.83E-04	1.19E-07	-3.15E-11	2.42E+04	1.87E+02
	3.67E+06	-1.89E+04	4.18E+01	-3.50E-03	6.56E-07	-6.59E-11	2.75E-15	1.48E+05	-2.48E+02
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	-1.68E+05	4.40E+03	-3.72E+01	1.64E-01	-2.02E-04	1.31E-07	-3.44E-11	-1.04E+04	2.17E+02
	4.54E+06	-2.26E+04	4.69E+01	-4.21E-03	7.91E-07	-7.97E-11	3.33E-15	1.39E+05	-2.87E+02

*Продолжение таблицы 10*

	a <sub>1</sub>	a <sub>2</sub>	a <sub>3</sub>	a <sub>4</sub>	a <sub>5</sub>	a <sub>6</sub>	a <sub>7</sub>	a <sub>8</sub>	a <sub>9</sub>
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O	-1.29E+05	3.41E+03	-2.91E+01	1.46E-01	-1.78E-04	1.14E-07	-2.97E-11	-1.06E+04	1.77E+02
	3.68E+06	-1.97E+04	4.54E+01	-3.75E-03	7.11E-07	-7.23E-11	3.05E-15	1.16E+05	-2.68E+02
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OH	-1.21E+05	3.38E+03	-2.99E+01	1.57E-01	-1.97E-04	1.29E-07	-3.42E-11	-2.78E+04	1.80E+02
	4.46E+06	-2.17E+04	4.82E+01	-3.57E-03	6.33E-07	-6.04E-11	2.40E-15	1.11E+05	-2.86E+02
O	-7.95E+03	1.61E+02	1.97E+00	1.01E-03	-1.11E-06	6.52E-10	-1.58E-13	2.84E+04	8.40E+00
	2.62E+05	-7.30E+02	3.32E+00	-4.28E-04	1.04E-07	-9.44E-12	2.73E-16	3.39E+04	-6.68E-01

Таблица 11

## Коэффициенты полиномов Пике [3] для всех рассматриваемых веществ

	a <sub>1</sub>	a <sub>2</sub>	a <sub>3</sub>	a <sub>4</sub>	a <sub>5</sub>	a <sub>6</sub>	a <sub>7</sub>
H	2.50E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	2.55E+04	-4.60E-01
	2.50E+00	-8.24E-06	6.42E-10	-1.72E-13	1.46E-17	2.55E+04	-4.61E-01
H <sub>2</sub>	2.85E+00	4.19E-03	-9.61E-06	9.51E-09	-3.31E-12	-9.67E+02	-1.41E+00
	3.36E+00	2.79E-04	9.37E-08	-2.95E-11	2.14E-15	-1.02E+03	-3.55E+00
H <sub>2</sub> O	4.16E+00	-1.72E-03	5.70E-06	-4.59E-09	1.42E-12	-3.03E+02	-6.86E-01
	3.39E+00	2.14E-03	-5.05E-07	5.27E-11	-2.00E-15	-3.03E+04	2.64E+00
HCO	3.87E+00	-5.37E-04	6.90E-06	-6.65E-09	2.06E-12	-2.80E+03	4.90E+00
	3.51E+00	3.03E-03	-1.00E-06	1.44E-10	-7.51E-15	2.82E+03	6.06E+00
OH	3.33E+00	-1.12E-03	1.25E-06	-2.10E-10	-5.26E-14	3.59E+03	5.83E-01
	3.28E+00	5.09E-04	-2.29E-08	-1.00E-11	1.06E-15	3.63E+03	3.23E+00
C	2.54E+00	-2.21E-04	4.74E-07	-4.53E-10	1.60E-13	8.55E+04	4.57E+00
	2.61E+00	-2.03E-04	1.10E-07	-1.70E-11	8.59E-16	8.54E+04	4.14E+00
CH	3.55E+00	8.80E-05	-1.83E-06	4.46E-09	-2.19E-12	7.06E+04	1.82E+00
	3.19E+00	9.46E-04	-2.44E-07	3.11E-11	-1.35E-15	7.06E+04	3.50E+00
CH <sub>2</sub>	3.55E+00	-2.51E-03	1.24E-05	-1.18E-08	3.81E-12	3.37E-06	1.80E+00
	3.27E+00	2.64E-03	-7.54E-07	9.70E-11	-4.63E-15	3.37E+04	3.18E+00
CH <sub>3</sub>	3.40E+00	4.27E-03	2.03E-07	-1.16E-09	4.13E-13	1.57E+04	2.70E+00
	3.53E+00	5.21E-03	-1.68E-06	2.40E-10	-1.25E-14	1.47E+04	1.89E+00
CH <sub>4</sub>	4.25E+00	-6.91E-03	3.16E-05	-2.97E-08	9.51E-12	-1.02E+04	-9.18E-01
	2.23E+00	8.93E-03	-2.94E-06	4.26E-10	-2.25E-14	-1.02E+04	6.76E+00
CO	3.79E+00	-2.17E-03	5.08E-06	-3.47E-09	7.72E-13	-1.44E+04	2.63E+00
	3.25E+00	9.10E-04	-2.65E-07	3.04E-11	-1.18E-15	-1.43E+04	4.88E+00
C <sub>2</sub>	7.51E+00	-1.07E-02	1.01E-05	-8.62E-10	-1.75E-12	9.88E+04	-1.61E+01
	4.44E+00	-2.89E-04	3.04E-07	-6.24E-11	3.92E-15	9.79E+04	-1.09E+00
C <sub>2</sub> H	3.49E+00	3.56E-03	-1.24E-06	1.87E-10	-1.01E-14	5.81E+04	4.78E+00
	5.31E+00	8.97E-04	-1.38E-07	9.25E-12	-2.28E-16	5.81E+04	-5.29E+00
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	7.90E-01	2.35E-02	-3.55E-05	2.80E-08	-8.45E-12	2.63E+04	1.40E+01
	3.89E+00	5.72E-03	-1.96E-06	2.93E-10	-1.59E-14	2.59E+04	6.52E-01
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	1.12E+00	1.39E-02	2.66E-06	-1.16E-08	5.24E-12	5.33E+03	1.58E+01
	2.77E+00	1.17E-02	-4.05E-06	6.10E-10	-3.30E-14	6.03E+03	7.19E+00
C <sub>3</sub>	2.63E+00	9.42E-03	-9.59E-06	5.58E-09	-1.42E-12	9.43E+04	8.08E+00
	4.00E+00	3.54E-03	-1.32E-06	2.06E-10	-1.14E-14	9.42E+04	2.02E+00
C <sub>3</sub> H <sub>3</sub>	2.59E+00	1.89E-02	-1.39E-05	5.54E-09	-9.08E-13	3.70E+04	1.03E+01
	4.66E+00	1.05E-02	-3.96E-06	6.72E-10	-4.25E-14	3.67E+04	6.29E-01
C <sub>4</sub> H	2.70E+00	2.27E-02	-2.45E-05	1.32E-08	-2.67E-12	7.65E+04	1.04E+01
	-	-	-	-	-	-	-
C <sub>4</sub> H <sub>2</sub>	6.22E+00	9.66E-03	-3.49E-06	5.41E-10	-3.00E-14	5.61E+04	-1.21E+01
	1.12E+01	2.19E-03	-3.40E-07	2.29E-11	-5.67E-16	5.61E+04	-3.94E+01
C <sub>4</sub> H <sub>3</sub>	5.75E+00	1.25E-02	-4.75E-06	8.14E-10	-5.17E-13	4.91E+04	-3.43E+00
	-	-	-	-	-	-	-
C <sub>5</sub> H <sub>6</sub>	8.74E-01	2.77E-02	4.26E-06	-1.44E-08	4.47E-12	9.00E+03	1.91E+01
	-	-	-	-	-	-	-

Продолжение таблицы 11

	a <sub>1</sub>	a <sub>2</sub>	a <sub>3</sub>	a <sub>4</sub>	a <sub>5</sub>	a <sub>6</sub>	a <sub>7</sub>
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	3.51E-01	3.75E-02	-7.95E-06	-7.51E-09	3.04E-12	8.26E+03	1.99E+01
	—	—	—	—	—	—	—
O	3.02E+00	-2.17E-03	3.75E-06	-3.00E-09	9.08E-13	2.91E+04	2.65E+00
	2.67E+00	-1.97E-04	7.19E-08	-8.90E-12	4.00E-16	2.92E+04	4.50E+00

Таблица 12

Коэффициенты полиномов Скоггинса [4] для всех рассматриваемых веществ

	a <sub>1</sub>	a <sub>2</sub>	a <sub>3</sub>	a <sub>4</sub>	a <sub>5</sub>	a <sub>6</sub>	a <sub>7</sub>
H	2.50E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	2.55E+04	-4.60E-01
	2.50E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	2.55E+04	-4.60E-01
H <sub>2</sub>	2.99E+00	7.00E-04	-5.63E-08	-9.23E-12	1.58E-15	-8.35E+02	-1.36E+00
	3.30E+00	8.25E-04	-8.14E-07	-9.48E-11	4.13E-13	-1.01E+03	-3.29E+00
H <sub>2</sub> O	2.67E+00	3.06E-03	-8.73E-07	1.20E-10	-6.39E-15	-2.99E+04	6.86E+00
	3.39E+00	3.47E-03	-6.35E-06	6.97E-09	-2.51E-12	-3.02E+04	2.59E+00
HCCO	6.76E+00	2.00E-03	-2.03E-07	-1.04E-10	1.97E-14	1.90E+04	-9.07E+00
	5.05E+00	4.45E-03	2.27E-07	-1.48E-09	2.25E-13	1.97E+04	4.82E-01
HCO	3.56E+00	3.35E-03	-1.34E-06	2.47E-10	-1.72E-14	3.92E+03	5.55E+00
	2.90E+00	6.20E-03	-9.62E-06	1.09E-08	-4.57E-12	4.16E+03	8.98E+00
OH	2.88E+00	1.01E-03	-2.28E-07	2.17E-11	-5.13E-16	3.89E+03	5.60E+00
	3.64E+00	1.85E-04	-1.68E-06	2.39E-09	-8.43E-13	3.61E+03	1.36E+00
C	2.60E+00	-1.79E-04	9.09E-08	-1.15E-11	3.31E-16	8.54E+04	4.20E+00
	2.50E+00	8.09E-05	-2.70E-07	3.04E-10	-1.11E-13	8.55E+04	4.75E+00
CH	2.20E+00	2.34E-03	-7.06E-07	9.01E-11	-3.86E-15	7.09E+03	9.18E+00
	3.20E+00	2.07E-03	-5.13E-06	5.73E-09	-1.96E-12	7.05E+04	3.33E+00
CH <sub>2</sub>	2.79E+00	3.13E-03	-8.11E-07	9.56E-11	-4.29E-15	5.08E+04	6.11E+00
	3.48E+00	1.61E-03	4.41E-07	-3.71E-10	6.27E-14	5.06E+04	2.36E+00
CH <sub>2</sub> O	3.00E+00	6.68E-03	-2.63E-06	4.74E-10	-3.21E-14	-1.53E+04	6.91E+00
	1.65E+00	1.26E-02	-1.89E-05	2.05E-08	-8.41E-12	-1.49E+04	1.38E+01
CH <sub>3</sub>	3.47E+00	5.22E-03	-1.73E-06	2.62E-10	-1.49E-14	1.64E+04	1.85E+00
	3.56E+00	3.50E-03	1.17E-06	-1.43E-09	3.15E-13	1.66E+04	1.99E+00
CH <sub>3</sub> OH	4.03E+00	9.38E-03	-3.05E-06	4.36E-10	-2.22E-14	-2.62E+04	2.38E+00
	2.66E+00	7.34E-03	7.17E-06	-8.79E-09	2.39E-12	-2.54E+04	1.12E+01
CH <sub>4</sub>	1.68E+00	1.02E-02	-3.88E-06	6.79E-10	-4.50E-14	-1.01E+04	9.62E+00
	7.79E-01	1.75E-02	-2.78E-05	3.05E-08	-1.22E-11	-9.83E+03	1.37E+01
CO	3.03E+00	1.44E-03	-5.63E-07	1.02E-10	-6.91E-15	-1.43E+04	6.11E+00
	3.26E+00	1.51E-03	-3.88E-06	5.58E-09	-2.47E-12	-1.43E+04	4.85E+00
C <sub>2</sub>	4.14E+00	6.53E-05	1.84E-07	-5.30E-11	4.71E-15	9.97E+04	7.47E-01
	7.00E+00	-7.40E-03	3.23E-06	4.80E-09	-3.30E-12	9.90E+04	-1.38E+01
C <sub>2</sub> H	4.88E+00	1.88E-03	-6.65E-07	1.06E-10	-6.23E-15	6.67E+04	-3.58E+00
	3.57E+00	3.99E-03	-1.54E-06	-3.49E-12	8.60E-14	6.72E+04	3.76E+00
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	5.26E+00	4.11E-03	-1.34E-06	2.01E-10	-1.14E-14	25376.8442	-6.96E+00
	3.04E+00	1.18E-02	-1.16E-05	6.21E-09	-1.29E-12	2.59E+04	4.08E+00
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	3.53E+00	1.15E-02	-4.42E-06	7.84E-10	-5.27E-14	4.43E+03	2.23E+00
	-8.61E-01	2.80E-02	-3.39E-05	2.79E-08	-9.74E-12	5.57E+03	2.42E+01

Продолжение таблицы 12

	a <sub>1</sub>	a <sub>2</sub>	a <sub>3</sub>	a <sub>4</sub>	a <sub>5</sub>	a <sub>6</sub>	a <sub>7</sub>
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	5.70E+00	1.06E-02	-3.58E-06	5.52E-10	-3.19E-14	1.18E+04	-7.25E+00
	1.76E+00	1.65E-02	-5.30E-06	-3.60E-10	3.73E-13	1.35E+04	1.52E+01
C <sub>3</sub> H <sub>3</sub>	7.94E+00	6.56E-03	-2.20E-06	3.37E-10	-1.94E-14	3.82E+04	-1.72E+01
	3.12E+00	2.06E-02	-1.84E-05	8.95E-09	-1.75E-12	3.96E+04	7.83E+00
C <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	7.37E+00	9.63E-03	-3.26E-06	5.04E-10	-2.91E-14	1.86E+04	-1.74E+01
	6.96E-01	2.58E-02	-1.87E-05	7.40E-09	-1.23E-12	2.09E+04	1.82E+01
C <sub>4</sub> H	6.24E+00	6.19E-03	-2.09E-06	3.08E-10	-1.64E-15	7.57E+04	-7.21E+00
	5.02E+00	7.09E-03	-6.07E-09	-2.28E-09	8.09E-13	7.62E+04	-6.94E-02
C <sub>4</sub> H <sub>2</sub>	9.03E+00	6.05E-03	-1.95E-06	2.75E-10	-1.39E-14	5.29E+04	-2.39E+01
	4.01E+00	1.98E-02	-9.87E-06	-6.64E-09	6.08E-12	5.42E+04	1.85E+00
C <sub>4</sub> H <sub>3</sub>	1.08E+01	5.38E-03	-5.55E-07	-3.05E-10	5.76E-14	6.12E+04	-2.97E+01
	4.15E+00	1.73E-02	-2.39E-07	-1.02E-08	4.34E-12	6.34E+04	6.04E+00
C <sub>4</sub> H <sub>4</sub>	1.07E+01	6.98E-03	-6.57E-07	-3.88E-10	7.20E-14	3.03E+04	-3.13E+01
	3.23E+00	1.87E-02	1.27E-06	-9.41E-09	2.96E-12	3.30E+04	9.92E+00
C <sub>5</sub> H <sub>5</sub>	1.27E+01	1.28E-02	-4.35E-06	6.73E-10	-3.90E-14	2.56E+04	-4.67E+01
	-3.36E+00	5.80E-02	-5.42E-05	2.57E-08	-4.80E-12	3.03E+04	3.67E+01
C <sub>5</sub> H <sub>6</sub>	1.27E+01	1.53E-02	-5.24E-06	8.13E-10	-4.72E-14	1.03E+04	-4.75E+01
	-4.78E+00	6.10E-02	-5.17E-05	2.25E-08	-3.93E-12	1.58E+04	4.43E+01
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	1.39E+01	1.45E-02	-4.98E-06	7.76E-10	-4.52E-14	3.39E+04	-5.36E+01
	-4.79E+00	6.41E-02	-5.63E-05	2.51E-08	-4.44E-12	3.98E+04	4.47E+01
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	1.41E+01	1.68E-02	-5.76E-06	8.98E-10	-5.22E-14	2.80E+03	5.73E+01
	5.79E+00	6.85E-02	-5.82E-05	2.53E-08	-4.40E-12	9.12E+03	4.74E+01
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O	1.63E+01	1.49E-02	-5.14E-06	8.03E-10	-4.67E-14	-1.20E+03	-6.52E+01
	-4.18E+00	6.95E-02	-6.15E-05	2.74E-08	-4.85E-12	5.19E+03	4.24E+01
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OH	1.69E+01	1.71E-02	-5.99E-06	9.45E-10	-5.55E-14	-1.97E+04	-6.88E+01
	-4.93E+00	7.76E-02	-7.29E-05	3.52E-08	-6.74E-12	-1.30E+04	4.51E+01
O	2.54E+00	-2.76E-05	-3.10E-09	4.55E-12	-4.37E-16	2.92E+04	4.92E+00
	2.95E+00	-1.64E-03	2.42E-06	-1.60E-09	3.89E-13	2.91E+04	2.96E+00

## Литература

1. NIST-JANAF Thermochemical Tables. DOI: 10.18434/T42S31
2. McBride B. J., Gordon S., Reno M. A. Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species. Technical Memorandum TM-4513, NASA, 1993.
3. Pike R. Thermodynamic properties in polynomial form for carbon, hydrogen, nitrogen, and oxygen systems from 300 to 15000 K. NASA Langley Research Center, November 15, 1970.
4. Scoggins J. B. The Development of a Thermochemical Nonequilibrium Ablation and Pyrolysis Model for Carbon-Phenolic Thermal Protection Systems. Raleigh, North Carolina, 2011. 77 p.
5. Батыгина В. К. Исследование процесса разрушения фенола при высоких тепловых нагрузках // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2024. Т. 25, вып. 7. <http://chemphys.edu.ru/issues/2024-25-7/articles/1139/>

## References

1. NIST-JANAF Thermochemical Tables. DOI: 10.18434/T42S31

2. McBride B. J., Gordon S., Reno M. A., *Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species*, Technical Memorandum TM-4513, NASA, 1993.
3. Pike R., *Thermodynamic properties in polynomial form for carbon, hydrogen, nitrogen, and oxygen systems from 300 to 15000 K*, NASA Langley Research Center, November 15, 1970.
4. Scoggins J. B., *The Development of a Thermochemical Nonequilibrium Ablation and Pyrolysis Model for Carbon-Phenolic Thermal Protection Systems*, Raleigh, North Carolina, 2011, 77 p.
5. Batygina V. K., Study of the Phenol Destruction Process under High Thermal Loads, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2024, vol. 25, iss. 7 [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2024-25-7/articles/1139/>

Статья поступила в редакцию 15 февраля 2025 г.