

Database of Recommended Data "PROCESS" in the AVOGADRO System: Recovered Data, Organization of Access

A. L. Sergievskaya, V. Yu. Levashov

*Institute of Mechanics, Lomonosov Moscow State University,
Moscow, 119192, Russia*

sergievska@imec.msu.ru

Abstract

One of the main components of the scientific information system AVOGADRO has been restored. It is a database of recommended data on the rate coefficients of chemical reactions. The data are accompanied by expert commentary with a brief justification for the recommendation and links to sources of information. The basic data has an attribute of the degree of reliability, an expert numerical value of the error in various ranges of the argument of the gas medium (translational temperature). The new version of the database is implemented as an Excel file and is accompanied by a description of the structure and procedure for accessing the data. The database is intended for information support for mathematical modeling in physical and chemical kinetics. In total, data for 1384 chemical reactions are presented.

Keywords: chemical reactions, reaction rate coefficient, databases, level of recommendation.

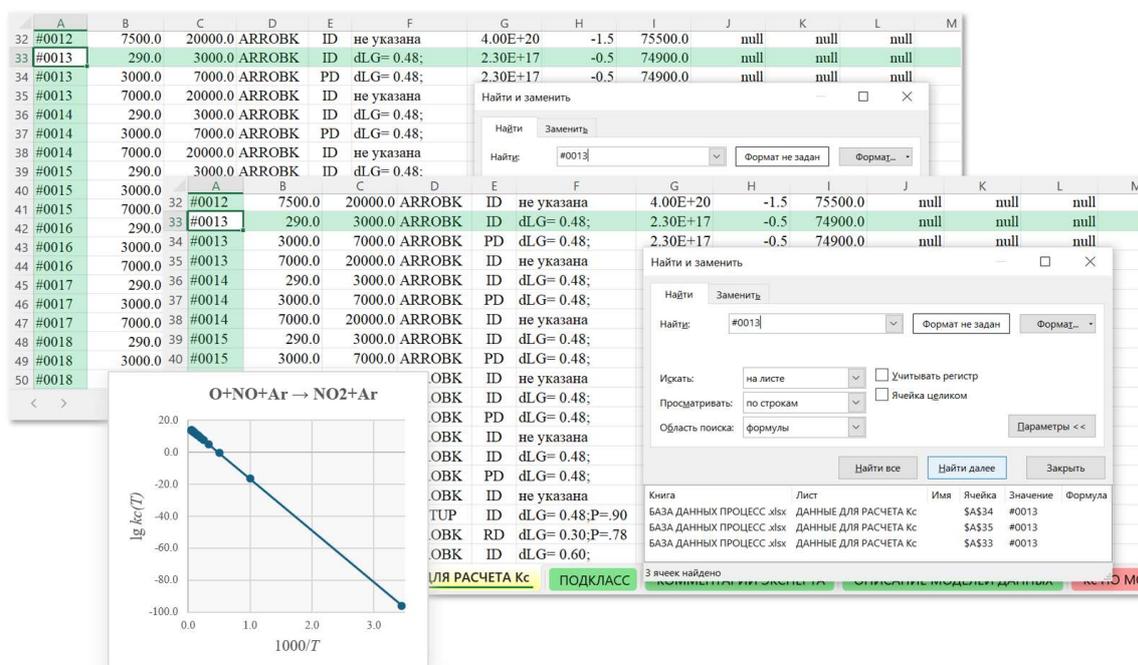


Illustration of the data search procedure for calculating the rate constant of the $O + NO + Ar \rightarrow NO_2 + Ar$ recombination reaction in the reconstructed database

УДК 541.127+539.196+533.6.011+004.62

База рекомендуемых данных «ПРОЦЕСС» в системе АВОГАДРО: восстановление и организация доступа

А. Л. Сергиевская, В. Ю. Левашов

*НИИ механики МГУ им. М. В. Ломоносова,
Россия, Москва, 119192, Мичуринский пр., 1
sergievska@imec.msu.ru*

Аннотация

Восстановлена одна из основных компонентов научной информационной системы АВОГАДРО - база рекомендуемых данных по константам скорости химических реакций. Данные сопровождаются экспертным комментарием с кратким обоснованием рекомендации и со ссылками на источники информации. Базовые данные имеет атрибут степени надежности, экспертное числовое значение погрешности на различных диапазонах аргумента газовой среды – поступательной температуры. Новая версия базы данных реализована в виде Excel файла и сопровождается описанием структуры и процедуры доступа к данным. База данных предназначена для информационного обеспечения задач математического моделирования физико-химической кинетики. Всего представлены данные для 1384 химических реакций.

Ключевые слова: химические реакции, константа скорости реакции, базы данных, категория рекомендуемости.

1. Введение

Почти 30 лет назад в Институте механики МГУ им. М. В. Ломоносова велась активная работа по созданию научной информационной системы АВОГАДРО – Автоматизированное Обеспечение Газовой Динамики Рекомендациями с Оценками достоверности [1–11]. Система АВОГАДРО имела целью информационное и логическое обеспечение математического моделирования физико-химических процессов при проведении научных исследований и разработке технических проектов, планировании и постановке испытаний, конструировании устройств, где рабочим телом является газ или многофазная среда. То есть речь шла об обеспечении пользователя всей необходимой, адекватной и согласованной для моделирования информацией: уравнениями, формулами, соотношениями вместе с величинами коэффициентов и параметров – в таком наборе, который оптимально соответствует поставленной задаче. Система создавалась в трех частях: хранимый информационный фонд, база математических моделей физико-химических процессов и база данных по параметрам этих моделей.

Обычная практика подготовки решения газодинамической задачи включает в себя на одном из последних этапов поиск и подбор термодинамических данных о компонентах среды, о динамических и кинетических параметрах процессов, протекающих в исследуемой газовой среде. При этом, если термодинамическая информация о компонентах рассматриваемой среды достаточно согласована и достоверна, как, например, в системе ИВТАНТЕРМО [12], правда и там возникают проблемы с достоверностью данных [13], то уж по характеристикам физико-химических процессов часто оказывается невозможной какая-либо априорная оценка достоверности и согласованности данных, выбираемых из различных литературных источников или из кумулятивных баз данных исходной информации, даже таких авторитетных как база данных NIST [14].

Часть проблем такого рода решается благодаря локальным, а, чаще, авторским базам данных о характеристиках физико-химических процессах, подготовленным для конкретных задач определенного типа, например задач горения [15]. Более универсальной должна была стать, созданная в рамках системы АВОГАДРО, база данных ПРОЦЕСС. В хранимом фонде этой базы данных были собраны количественные данные по константам скорости физико-химических процессов вместе с оценками погрешности и достоверности, сформированные путем экспертных обработок большого количества литературы и предназначенными для надежной информационной поддержки решений указанных задач.

База рекомендуемых данных ПРОЦЕСС системы АВОГАДРО (далее – БРД) состояла из отдельных частей в соответствии со следующими классами процессов - упругие столкновения, столкновительный энергообмен, химические и плазмохимические реакции. В результате профессиональной экспертизы были подготовлены рекомендуемые данные для более чем 2000 процессов. Источники информации – специально подготовленные экспертами ведущих научных учреждений обзоры данных.

Входные потоки информации в БРД были организованы в виде вкладов отдельных экспертов или экспертных коллективов. Отличительной особенностью базы данных ПРОЦЕСС было ранжирование информации по степени обработанности и надежности на определенных диапазонах аргументов среды.

Степень обработанности данных характеризуется специальным базовым признаком – категорией рекомендуемости. Возможными значениями этого признака были приняты:

- SD – справочные данные;
- RD – рекомендуемые данные;
- PD – предварительно-рекомендуемые данные;
- ID – информационные данные;
- ED – экстраполированные данные;
- OD – обзорно-оригинальные данные;
- 1D – первичные данные.

Данные категории 1D поступали в систему обработки из оригинальных авторских публикаций или от экспериментальных (вычислительных) установок.

Категория "OD" присваивалась данным, поступающим из обзорных публикаций; каждый такой вклад информации обязательно сопровождался экспертным комментарием.

Информационные данные "ID" получались в результате первичной экспертной обработки данных, имеющих категории "1D" и "OD".

При выработке данных категории "ID" впервые выполнялась первичная экспертная оценка погрешности. Описание погрешности может быть представлено как в числовом, так и в текстовом виде; в особом случае допускалось отсутствие оценки погрешности данных категории "ID".

Предварительно-рекомендуемые данные получались при обработке обзорно-оригинальных или информационных данных; они либо поступали от внешних экспертов, либо получались при обработке имеющихся данных с категорией "OD" или "ID". Предварительно-рекомендуемые данные сопровождаются числовыми оценками погрешности, однако эти оценки требовали дополнительных экспертных уточнений и согласования с экспертным советом.

Категория "RD" присваивалась данным, которые получены в результате тщательной экспертной обработки данных всех остальных категорий. Эти данные проходили процедуру рецензирования экспертным советом.

К экстраполированным данным относятся данные, полученные путем экспертной экстраполяции данных одной из категорий – "RD", "PD" и "ID" на полный интервал представления аргументов среды в соответствии с заданием параметров предметной области.

Справочные данные заносились в базу данных на уровне стандартных данных и не подлежали исправлению в режиме ведения

Предполагалось, что система обработки данных будет работать с результатами экспериментов и расчетов, специально предназначенных для выработки новых данных. Эти данные должны были иметь категорию рекомендуемости PD. Первичные данные по категории рекомендуемости могут быть поставлены на один уровень с литературными данными, представленными в оригинальных авторских работах. Все первичные данные должны были накапливаться в специальной подсистеме для последующей экспертной обработки.

Процедура подготовки экспертом, готовящем данные для БРД, отчета-обоснования, который хранился в документах системы АВОГАДРО, состояла в проведении анализа обзорных и оригинальных (экспериментальных и теоретических) работ по каждому процессу, с последующей обработкой проанализированных результатов. По каждой работе эксперт рассматривал:

- физические предположения, ограничения;
- экспериментальные установки, методы измерения, измеряемые параметры и диапазоны измерения, причины погрешностей и способы их оценки (для экспериментальных работ);
- методы решения задач как фрагментов математической модели предметной области (для теоретических работ).

На основании анализа этой информации эксперт готовил для базы данных тексты комментариев к данным или новым моделям, предупреждения о возможных ограничениях применения данных.

При подготовке данных для БРД эксперт включал в текст отчета:

- обоснование выбора математические модели, которые использовал для представления зависимости, например, если говорить о базе данных «ПРОЦЕСС», константы скорости выбранных реакций от поступательной температуры.
- тексты возможных предупреждений об особенностях использования предлагаемых рекомендаций по каждому процессу;
- описание принятой экспертом процедуры подготовки рекомендуемых данных, в том числе процедуры экстраполяции и восполнения недостающих данных, если он ими пользовался;
- описание процедуры оценки погрешностей и доверительной вероятности.

Концептуальная схема обработки данных в системе АВОГАДРО представлена на рис. 1.



Рис. 1

Инфологические схемы всех баз данных построены в виде многоуровневых ациклических ориентированных графов. Базы данных функционировали под управлением стандартной СУБД реляционного типа с языком манипулирования данными SQL, были снабжены интерфейсами различного назначения:

- административным интерфейсом обработки данных, в том числе для ввода новой информации и экспертной верификации хранимых данных;
- пользовательским интерфейсом, поддерживающий поиск необходимых данных, их анализ, сохранение во внешнем файле и расчет констант скорости для передачи данных из хранимых фондов в решаемую задачу;
- экспертным интерфейсом для выработки новых рекомендаций.

БРД ПРОЦЕСС функционировала в Институте механики с начала 90-х и до начала 2010-х годов [16, 17]. Однако по ряду причин осталась в виде локальной базы данных, не была используется как сетевой продукт, передавалась по договорам о научном сотрудничестве в другие научные организации и даже была частично включена в ряд программных комплексов, тиражируемых какое-то время на коммерческой основе. Потом поддержка ее прекратилась.

В настоящее время проведена работа по восстановлению утраченных данных. Предлагаемая в данной публикации база данных ПРОЦЕСС содержит рекомендуемые коэффициенты математических моделей констант скорости конкретных физико-химических процессов, а именно, 1384 химических реакций, на определенных диапазонах температуры с указанием погрешности и категории рекомендуемости, сопровождаемых экспертными комментариями.

Восстановленная БРД реализована в виде Excel-приложения.

2. Описание БРД

2.1. Общая характеристика БРД

Данные Excel-реализации БРД содержатся в одной Книге и распределены по шести листам. Воспользуемся правилом, принятым в Excel, и будем использовать в дальнейшем описании БРД выделенные жирным шрифтом и с прописной буквы названия листов, например **Реакции**. Последовательность листов выстроена в соответствии с процедурой поиска данных для расчета константы скорости конкретной реакции. Часть листов носит справочный характер. На рис. 2 представлен общий вид Excel-версии БРД.

#ncodp	Молекулярная формула реакции	Тип реакции	Подкласс реакции	Диапазон T	Размерность Kc	Номер комментария	Эксперт	SAPR	SARE	Нереагирующая часть
2 #0001	N2+Ar->N+N+Ar	Диссоциация	REAB	T: 290-20000	см**3/(моль*с)	z030	О.П.Шаталов	N Ar	N	Ar
3 #0002	N2+N2->N+N+N2	Диссоциация	REAB	T: 290-20000	см**3/(моль*с)	z030	О.П.Шаталов	N	N	N2
4 #0003	N2+N->N+N+N	Диссоциация	REAB	T: 290-20000	см**3/(моль*с)	z030	О.П.Шаталов	N	N	N
5 #0004	N2+O2->N+N+O2	Диссоциация	REAB	T: 290-20000	см**3/(моль*с)	z031	О.П.Шаталов	N O	N	O2
6 #0005	N2+NO->N+N+NO	Диссоциация	REAB	T: 290-20000	см**3/(моль*с)	z031	О.П.Шаталов	N O	N	NO
7 #0006	N2+CO2->N+N+CO2	Диссоциация	REAB	T: 290-20000	см**3/(моль*с)	z031	О.П.Шаталов	C N O	N	CO2
8 #0007	N2+O->N+N+O	Диссоциация	REAB	T: 290-20000	см**3/(моль*с)	z032	О.П.Шаталов	N O	N	O
9 #0008	N2+S->N+N+S	Диссоциация	REAB	T: 290-20000	см**3/(моль*с)	z032	О.П.Шаталов	N S	N	S
10 #0009	N2+C->N+N+C	Диссоциация	REAB	T: 290-20000	см**3/(моль*с)	z032	О.П.Шаталов	C N	N	C
11 #0010	N2+Xe->N+N+Xe	Диссоциация	REAB	T: 290-20000	см**3/(моль*с)	z033	О.П.Шаталов	N Xe	N	Xe
12 #0011	N2+Ne->N+N+Ne	Диссоциация	REAB	T: 290-20000	см**3/(моль*с)	z033	О.П.Шаталов	N Ne	N	Ne
13 #0012	NO+Ar->N+O+Ar	Диссоциация	REAB	T: 290-20000	см**3/(моль*с)	z036	О.П.Шаталов	N O Ar	N O	Ar
14 #0013	NO+NO->N+O+NO	Диссоциация	REAB	T: 290-20000	см**3/(моль*с)	z036	О.П.Шаталов	N O	N O	NO
15 #0014	NO+N->N+O+N	Диссоциация	REAB	T: 290-20000	см**3/(моль*с)	z036	О.П.Шаталов	N O	N O	N
16 #0015	NO+O->N+O+O	Диссоциация	REAB	T: 290-20000	см**3/(моль*с)	z036	О.П.Шаталов	N O	N O	O
17 #0016	NO+N2->N+O+N2	Диссоциация	REAB	T: 290-20000	см**3/(моль*с)	z036	О.П.Шаталов	N O	N O	N2

Рис. 2. Общий вид БРД

Листы именуются как **Реакции**, **Данные для расчета Kc**, **Подкласс**, **Комментарий эксперта**, **Описание моделей данных**, **Kc по модели Аррениуса**. Каждый лист содержит

данные, составляющие все возможные для актуального состояния проекта экземпляры информационного элемента предметной области типа агрегация [18]. Имя агрегации – название листа, имена атрибутов агрегации отображены в названиях столбцов каждого листа. Все листы защищены от редактирования, вследствие чего будет невозможно сортировать данные. Данные можно искать, просматривать, и копировать во внешние файлы.

В представляемой БРД каждой реакции присвоен уникальный идентификатор (Ncodp) – уникальный набор символов, состоящий из знака # и четырех цифр. С этим кодом можно работать на листах **Реакции**, **Данные для расчета Kс** и **Kс по модели Аррениуса**. Для адекватного поиска информации о реакции по уникальному коду в меню поиска следует отметить галочкой поисковый атрибут Excel **Ячейка целиком** (рис. 3).

Ncodp	Молекулярная формула реакции	Тип реакции	Подкласс реe	Диапазон T	Размерность Kс	Номер кол	Эксперт	SAPR	SARE	Нереагирую
#0060	NO2+Ar->NO+O+Ar	Распад	РЕАВ	T: 1300-3500	см**3/(моль*c)	z045	А.П.Зуев	N O Ar	N O	Ar
#0061	NO2+He->NO+O+He	Распад	РЕАВ	T: 1300-3500	см**3/(моль*c)	z045	А.П.Зуев	He N O	N O	He
#0062	NO2+Ne->NO+O+Ne	Распад	РЕАВ	T: 1300-3500	см**3/(моль*c)	z045	А.П.Зуев	N O Ne	N O	Ne
#0063	NO2+Kr->NO+O+Kr	Распад	РЕАВ	T: 1300-3500	см**3/(моль*c)	z045	А.П.Зуев	N O Kr	N O	Kr
#0064	NO2+Xe->NO+O+Xe	Распад	РЕАВ	T: 1300-3500	см**3/(моль*c)	z045	А.П.Зуев	N O Xe	N O	Xe
#0065	NO2+N2->NO+O+N2	Распад	РЕАВ	T: 1300-3500	см**3/(моль*c)	z045	А.П.Зуев	N O N2	N O	N2
#0066	NO2+CO->NO+O+CO	Распад	РЕАВ	T: 1300-3500	см**3/(моль*c)	z045	А.П.Зуев	N O CO	N O	CO
#0067	NO2+O2->NO+O+O2	Распад	РЕАВ	T: 1300-3500	см**3/(моль*c)	z045	А.П.Зуев	N O O2	N O	O2
#0068	NO2+NO2->NO+O+NO2	Распад	РЕАВ	T: 1300-3500	см**3/(моль*c)	z045	А.П.Зуев	N O NO2	N O	NO2
#0069	O3+Ar->O+O2+Ar	Распад	РЕАВ	T: 1300-3500	см**3/(моль*c)	z045	А.П.Зуев	O Ar	O	Ar
#0070	O3+O3->O+O2+O3	Распад	РЕАВ	T: 1300-3500	см**3/(моль*c)	z045	А.П.Зуев	O O3	O	O3
#0071	O3+O2->O+O2+O2	Распад	РЕАВ	T: 1300-3500	см**3/(моль*c)	z045	А.П.Зуев	O O2	O	O2
#0072	NO3+N2->NO2+O+N2	Распад	РЕАВ	T: 1300-3500	см**3/(моль*c)	z045	А.П.Зуев	N O N2	N O	N2
#0073	NO3+O2->NO2+O+O2	Распад	РЕАВ	T: 1300-3500	см**3/(моль*c)	z045	А.П.Зуев	N O O2	N O	O2
#0074	NO3+Ar->NO2+O+Ar	Распад	РЕАВ	T: 1300-3500	см**3/(моль*c)	z045	А.П.Зуев	N O Ar	N O	Ar
#0075	NO3+He->NO2+O+He	Распад	РЕАВ	T: 1300-3500	см**3/(моль*c)	z045	А.П.Зуев	N O He	N O	He
#0076	NO3+Ne->NO2+O+Ne	Распад	РЕАВ	T: 1300-3500	см**3/(моль*c)	z045	А.П.Зуев	N O Ne	N O	Ne

Рис. 3 Поиск по уникальному коду

Ниже будут даны подробные описания каждого листа БРД. Но сначала обратимся к используемым основным понятиям и определениям, используемые при описании хранимых данных и процедуры работы с ними.

2.2. Основные понятия и определения, используемые в БРД

Процесс, а в данной версии БРД рассматривается только **химическая реакция** – элементарный физико-химический процесс, рассматриваемый как некоторое действие, характеризующееся начальным и конечным состоянием газовой среды. Процесс задается химической формулой – неделимый текст; в схеме БРД отдельно введены поля, содержащие раздельное описание компонентов процесса, так что

- до взаимодействия известны компоненты процесса – реагенты (левая часть формулы процесса) – два компонента;
- известно название действия, т.е. тип процесса (см. ниже);
- после взаимодействия известны результаты процесса – продукты процесса (правая часть химической формулы процесса) – не более двух;
- возможно присутствие в процессе нереагирующих компонентов, которые фигурируют в обеих частях формулы – в БРД для таких компонентов выделяется отдельный атрибут – нереагирующая частица или просто частица M.

Класс процесса – совокупность элементарных процессов, объединенная единым характером перераспределения энергии между взаимодействующими частицами, изменением их состояния и (или) состава.

Различаются классы процессов: упругие столкновения, столкновительный энергообмен, реакции и т.д. Для простого и сложного энергообмена, простых и сложных реакций и т.д. представление о классе сохраняется. В данной статье применительно к хранимым данным мы будем говорить только об одном классе процессов – о химических реакциях.

Подкласс процесса – разделение класса на группы элементарных процессов по основным специфическим особенностям, характерным для данного подкласса. В предлагаемой версии БРД выделены следующие подклассы:

- Реакции нейтральных частиц в неотождествленных состояниях.
- Ионно-молекулярные реакции.
- Ионно-молекулярные реакции с участием электронов.
- Реакции с участием неотождествленного нереагирующего компонента М.
- Реакции нейтральных частиц и ионов, находящихся в неотождествленном возбужденном состоянии, а также электронов.
- Реакции электронно-возбужденных нейтральных частиц, ионов, электронов.
- Реакции нейтральных частиц и ионов, находящихся в возбужденном состоянии (электронном или неотождествленном).
- Реакции с участием электронно-возбужденных нейтральных частиц.

Для удобства работы была сформулирована аббревиатура для краткого обозначения подкласса (см. Приложение №1)

Тип процесса – характеристика элементарного процесса, отражающая его содержание. Типами реакции в данном проекте являются – диссоциация, рекомбинация, распад, обмен, ионизация, прилипание электрона, перезарядка, ион-молекулярная реакция, нейтрализация, отрыв электрона, рекомбинация электрона. Также используется значение «неопределенный тип», когда эксперт не выбрал подходящий тип для характеристики процесса из имеющихся в списке, но считает информацию о нем значимой для размещения в БРД. Это, например реакции, у которых известны реагенты, но не идентифицированы продукты. Например, это – $\text{CH}_2 + \text{O} \rightarrow \text{products}$.

Формула процесса. Это – линейная запись последовательности входных и выходных каналов процессов, с указанием состава молекул и, если необходимо, состояния частиц. Нижние и верхние индексы не используются. Заряд ионов указывается после имени частицы в круглых скобках. Возбужденное электронное состояние дается в линейном виде в квадратных скобках, соответствующие индексы у буквы, обозначающей конкретное электронное состояние, пишутся в угловых скобках. Вместо символа * используется символ ^. Например, $\text{NO}_3 + \text{N}_2 \rightarrow \text{NO} + \text{O}_2 + \text{N}_2$ в БД представлена как $\text{NO}_3 + \text{N}_2 \rightarrow \text{NO} + \text{O}_2 + \text{N}_2$, $\text{O}_2^- + \text{HCl} \rightarrow \text{O}_2 + \text{e} + \text{HCl}$ представлена как $\text{O}_2(-) + \text{HCl} \rightarrow \text{O}_2 + \text{e} + \text{HCl}$, а реакция $\text{Ba}(^1\text{S}) + \text{O}_2(^3\Sigma) \rightarrow \text{BaO}_2^*$ представлена в БРД как $\text{Ba}[<1>\text{S}] + \text{O}_2[<3>\text{Sigma}] \rightarrow \text{BaO}_2^{\wedge}$

Система атомов процесса – набор атомов, из которых состоят все частицы, участвующие в процессе. Хранимый фонд БРД содержит 1384 реакции, которые относятся к 160 системам атомов процесса (Приложение № 2).

Система атомов реагентов – набор атомов, из которых состоят только реагенты. В данной версии БРД доступны реакции, принадлежащие 64 системам атомов реагентов (Приложение № 3).

Константа скорости реакции (синоним – коэффициент скорости реакции) определяется физической сущностью процесса, протекающего в реакции. Данные, хранимые в БРД, предназначены для моделирования констант скорости реакции, зависящих от поступательной температуры $k_c(T)$ в термически равновесном газе, и являются коэффициентами различных моделей. Набор доступных моделей был сформирован экспертами. В большинстве это – модификации классической модели Аррениуса, но для реакций ионизации, отрыва и прилипания электрона в набор включены модели другой формы. Модели, выбранные для БРД представлены на листе **Описание моделей данных** и в Приложении № 4.

Категория рекомендуемости. Специально введенный атрибут хранимых данных раскрывает степень их обработанности и уровень их рекомендуемости. В БРД используются введенные в системе АВОГАДРО обозначения (см. выше).

2.3. Лист Реакции

Этот лист рассматриваемой книги Excel содержит описательную информацию о каждой из 1384-х реакций БД, распределенную по 16 столбцам, соответствующим выявленным для характеристики реакций атрибутам.

1. Ncodp – уникальный код реакции.
2. Молекулярная формула реакции.
3. Тип реакции.
4. Подкласс реакции – содержит краткое имя подкласса (см. Приложение № 1).
5. Диапазон T – диапазон поступательной температуры, на котором определены рекомендуемые величины k_c ; размерность T – градус К.
6. Размерность k_c .
7. Номер комментария – пронумерованные тексты комментариев хранятся на листе **Комментарий эксперта**.
8. Эксперт – приводятся фамилии экспертов, подготовивших данную рекомендацию.
9. SAPR – система атомов процесса (Приложение №2).
10. SARE – система атомов реагентов (Приложение №3).
11. Нереагирующая частица.
12. – 16. 1й реагент, 2й реагент, 1й продукт, 2й продукт, 3й продукт.

Все ячейки этого листа имеют текстовый формат. Корректный результат осуществляется при поиске по значению ячейки целиком. В случае отсутствия у данной реакции нереагирующей частицы или одного из реагентов/продуктов, в столбце указывается значение «null». Например, так выглядит на листе **Реакции** реакции #0103 и #0104.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P
	№codp	Молекулярная формула реакции	Тип реакции	Подкласс реакции	Диапазон T	Размерность Kc	Номер комментария	Эксперт	SAPR	SARE	Нереагирующая частица	1й реагент	2й реагент	1й продукт	2й продукт	3й продукт
2	#0103	N2O5+O2->NO2+NO	Распад	REAB	T: 220-500	см**3/(моль*с)	z057	А.П.Зуев	N O	N O	O2	N2O5	null	NO2	NO3	null
3	#0104	O+N2+Ar->N2O+Ar	Рекомбинация	REAB	T: 290-5000	см**6/(моль**2*с)	z060	А.П.Зуев	N O Ar	N O	Ar	O	N2	N2O	null	null

Рис. 4. Описательная информация реакций #0103 и #0104

2.4. Лист Данные для расчета Kc

Лист **Данные для расчета Kc** содержит количественные значения коэффициентов модели, определенной на листе **Реакции** достаточные для расчета величины константы скорости на указанном диапазоне поступательной температуры.

1. Ncodp – уникальный код реакции.
2. Начало диапазона T .
3. Конец диапазона T .
4. Модель данных – специальная аббревиатура, используемая для именования моделей констант скорости. Расшифровка имен и выражения для расчета приведены в Приложении № 4.
5. КР – категория рекомендуемости.
6. Погрешность данных.
7. – 16. Значения коэффициентов модели: A1, A2, A3, A4, A5, A6, A7, A8, A9, A10. Столбцы A1-A10 хранят значения коэффициентов математической модели константы скорости в числовом формате; имя модели указано в той же строке в столбце "Модель данных". Последовательность A1-A10 аналогична последовательности указанных в описании модели ее коэффициентов.
17. Кол-во коэффициентов модели.

Полный диапазон поступательной температуры может быть представлен набором поддиапазонов, на которых хранятся данные для расчета величин k_c с разным уровнем рекомендуемости и/или по разным моделям. Из 1823 поддиапазонов данных на листе имеют категорию рекомендуемости RD - 276, PD - 368, ID - 1179. Рассмотрим для примера следующий фрагмент листа **Данные для расчета K_c** .

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q
	Ncodp	Tmin	Tmax	Модель данных	КР	Погрешность данных	A1	A2	A3	A4	A5	A6	A7	A8	A9	A10	Кол-во коэффициентов модели
1																	
2	#0001	290.0	6000.0	ODSTUP	ID	dLG= 0.60;P=.90	1.08E+16	113200.0	3354.0	null	3						
3	#0001	6000.0	7000.0	ARROBK	RD	dLG= 0.48;P=.82	1.86E+29	-3.6	113200.0	null	3						
4	#0001	7000.0	10000.0	ARROBK	RD	dLG= 0.30;P=.79	1.86E+29	-3.6	113200.0	null	3						
5	#0001	10000.0	15000.0	ARROBK	RD	dLG= 0.48;P=.71	1.86E+29	-3.6	113200.0	null	3						
6	#0001	15000.0	20000.0	ARROBK	ID	не указана	1.86E+29	-3.6	113200.0	null	3						

Рис. 5. Выборка данных для расчета $k_c(T)$ реакции $N_2 + Ar \rightarrow N + N + Ar$

Видно, что для реакции с Ncodp=#0001 выделено четыре поддиапазона поступательной температуры, на которых представлены данные для вычисления k_c по двум разным моделям, результаты имеют разную погрешность и категорию рекомендуемости. Более интересным представляется другой пример – данные для расчета k_c реакции $N + N + Ar \rightarrow N_2 + Ar$

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q
	Ncodp	Tmin	Tmax	Модель данных	КР	Погрешность данных	A1	A2	A3	A4	A5	A6	A7	A8	A9	A10	Кол-во коэффициентов модели
1																	
2	#0029	290.0	6000.0	ARRENK	RD	dLG= 0.40;P=.67	3.20E+14	-435.0	null	2							
3	#0029	6000.0	15000.0	ARRENK	PD	dLG= 0.48;P=.80	6.52E+11	-38377.0	null	2							
4	#0029	15000.0	20000.0	ARRENK	ID	не указана	6.52E+11	-38377.0	null	2							

Рис. 6. Выборка данных для расчета $k_c(T)$ реакции $N + N + Ar \rightarrow N_2 + Ar$

В данном примере весь диапазон T разбит на три поддиапазона из-за разной погрешности данных и категории рекомендации, которую определил эксперт. При этом на всех поддиапазонах для расчета предлагается воспользоваться одной и той же моделью константы скорости.

2.5. Лист Подкласс

Третий лист содержит следующую информацию:

1. Кол-во реакций в подклассе.
2. Подкласс – принятая аббревиатура для обозначения имени подкласса.
3. Name of the reaction subclass.
4. Название подкласса реакций.

Полное описание подклассов реакций можно также найти в Приложении № 1.

2.6. Лист Комментарий эксперта

Четвертый лист содержит пронумерованные тексты комментариев, которыми эксперты сопроводили свою оценку предоставленным в БД данным, сформулированную в виде погрешности и категории рекомендуемости.

Столбцы этого листа:

1. Номер комментария – уникальный четырех символьный код, начинающийся с символа «Z» и трехзначного последовательного номера.
2. Текст экспертного комментария на русском языке.

Номер комментария	Текст экспертного комментария
1	
2	z000 Комментарий отсутствует.
3	z021 При низких температурах данные получены из анализа теоретических и экспериментальных работ. При высоких температурах рекомендованы данные, полученные экстраполяцией из низкотемпературного интервала.
4	z022 Экспериментальных данных нет. Рекомендация получена пересчетом K_c при $M=O_2$. Эффективность не реагирующей частицы при $M=NO$ взята такой же, как в процессе диссоциации O_2 .
5	z023 Экспериментальных данных нет. Рекомендация получена пересчетом K_c при $M=O_2$. Эффективность не реагирующей частицы при $M=N$ взята такой же, как в процессе диссоциации O_2 .
6	z025 Рекомендация взята из обзора <i>Baulch D.L. et al., Evaluated Kinetic Data for High Temperature Reactions, v.3, London: Butterworths, 1976.</i>
7	z028 При низких температурах рекомендуемая K_c диссоциации O_2 рассчитана по теории одноквантового ступенчатого возбуждения. При высоких температурах рекомендуемые значения основаны на результатах экспериментов с $M = O, O_2, Ar$.
8	z030 При $T < 6000K$ экспериментальных данных нет; дается рекомендация величин K_c , полученных согласно теории одноквантового ступенчатого возбуждения; при $T = 300K$ расхождение приводимых данных с литературными данными по K_c обратной реакции характеризуется множителем 1.5-4.0. При $T > 6000K$ величины K_c соответствуют результатам экспериментов на ударных трубах.
	z031 При $T < 6000K$ экспериментальных данных нет; дается рекомендация величин K_c , полученных согласно теории одноквантового ступенчатого возбуждения; при $T = 300K$ расхождение приводимых данных с литературными данными по K_c обратной реакции характеризуется множителем 1.5-4.0. При $T > 6000K$ приводимые величины K_c получены из экспериментов на ударных трубах. Эффективность не реагирующей частицы N_2 задана коэффициентом N_2 из таблицы коэффициентов K_c обратной реакции K_c обратной реакции N_2 .

 Рис. 7. Фрагмент листа **Комментарий эксперта**

Поиск по номеру комментария лучше выполнять по значению ячейки целиком. Для удобства работы с текстами комментариев они дополнительно представлены в Приложении № 5.

2.7. Лист Описание моделей данных

Лист содержит описания и математические выражения моделей, которые использовали эксперты для представления зависимости константы скорости выбранных реакций от поступательной температуры. Столбцы этого листа:

1. Имя модели – шестисимвольное название модели, состоящее из прописных латинских букв. Такое кодирование применялось ранее в системе АВОГАДРО и сохранилось в восстановленной версии БРД. Формула для вычисления константы скорости – математическое выражение для вычисления константы скорости. Сформулировано на интуитивно понятном псевдокоде. Например, формула Аррениуса выглядит в таком описании следующим образом - $A * T^{**n} * \exp(-E/T)$. Традиционное представление можно найти в Приложении № 4.
2. Описание модели – краткое разъяснение сущности модели.
3. Аргументы и коэффициенты модели.

На листе **Данные для расчета K_c** столбцы A1–A10 хранят значения коэффициентов модели, имя которой указано в той же строке в столбце "Модель данных". Последовательность A1–A10 на листе **Данные для расчета K_c** аналогична последовательности коэффициентов модели на листе **Описание моделей данных**.

2.8. Лист K_c по модели Аррениуса

Этот лист содержит данные для расчета констант скорости большой группы реакций БРД по модели Аррениуса. Модель широко применяется при решении прикладных задач в моделировании физико-химической кинетики, поэтому была предпринята попытка выделить те диапазоны температуры, на которых константа может быть рассчитана по аррениусово подобным моделям. Параметры этих моделей были при необходимости пересчитаны, например, для значений расчетных параметров по модели ARPLGK, которая определяет константу скорости как $k_c = 10^A \cdot \exp(-E/T)$, при подготовке аррениусовских аналогов первый коэффициент был пересчитан и занесен на лист **K_c по модели Аррениуса** как первый параметр, второй параметр на этом листе n_{Arr} был принят равным нулю, а второй параметр модели ARPLGK был занесен в столбец E. На рис. 8 показано переопределение параметров для реакции $Ncodp = \#0040$.

#0040	O+O+N->O2+N						
Лист Данные для расчета Kc				A1	A2		
#0040	290.0	500.0	ARPLGK	ID	14	-720.0	
#0040	500.0	4000.0	FUNSTE	ID	3.75E+15	-0.4	
#0040	4000.0	10000.0	ARRENK	ID	8E+12	-11435.0	
#0040	10000.0	20000.0	ARRENK	ID	3.68E+12	-33453.0	
Лист Kc по модели Аррениуса				A	nArr	E	
1 #0040	4	O+O+N->	290.0	500.0	1.00E+14	0	-720
2 #0040	4	O+O+N->	500.0	4000.0	3.75E+15	-0.41	0
3 #0040	4	O+O+N->	4000.0	10000.0	8.00E+12	0	-11435
4 #0040	4	O+O+N->	10000.0	20000.0	3.68E+12	0	-33453

Рис. 8. Пример переопределения параметров модели при подготовке рекомендаций по модели Аррениуса

Работа была выполнена для 985 реакций следующего типа:

- диссоциация;
- рекомбинация;
- распад;
- обмен;
- неопределенный тип.

Категория рекомендуемости для этих данных не определялась.

На листе определены следующие столбцы данных:

1. Ncodr – уникальный код реакции, сквозной для всех листов БД.
2. Количество диапазонов T . На данном листе могут быть представлены несколько поддиапазонов поступательной температуры T со своими значениями коэффициентов модели Аррениуса.
3. Формула реакции.
4. Тип реакции.
5. Размерность константы скорости.
6. Tmin – начало поддиапазона T
7. Tmax – конец поддиапазона T .
8. – 10. A, nArr, Ea – значения коэффициентов модели Аррениуса.

Рассмотрим еще один на этот раз более сложный пример пересчета параметров модели при формировании строк на листе **Kc по модели Аррениуса**. Реакции $\text{FO} + \text{N}_2 \rightarrow \text{F} + \text{O} + \text{N}_2$ в БРД присвоен Ncodr = #0390. На листе **Данные для расчета Kc** указано, что для реакции с уникальным номером Ncodr = #0390 на диапазоне $T = 200 \div 5000$, представлены данные для расчета константы скорости по модели AROTKL – $k_c = 10^A (T/300)^n \cdot \exp(-E/T)$ с тремя коэффициентами $A = 15.73$, $n = -1.5$, $E = 26000.0$. В результате пересчета были получены следующие значения коэффициентов модели Аррениуса: $A = 2.79 \times 10^{19}$, $n = -1.5$, $E = 26000.0$ для того же диапазона поступательной температуры. На рис. 9 представлено зависимость константы скорости рассматриваемой реакции от температуры на рекомендуемом диапазоне, рассчитанной по двум моделям. Кроме графика зависимости на рисунке представлена таблица полученных расчетных значений $k_c(T)$.

Видно, что при низких температурах существует небольшое различия в значениях $k_c(T)$. Поэтому при решении задач с низкотемпературными средами целесообразно пользоваться экспертной рекомендацией.

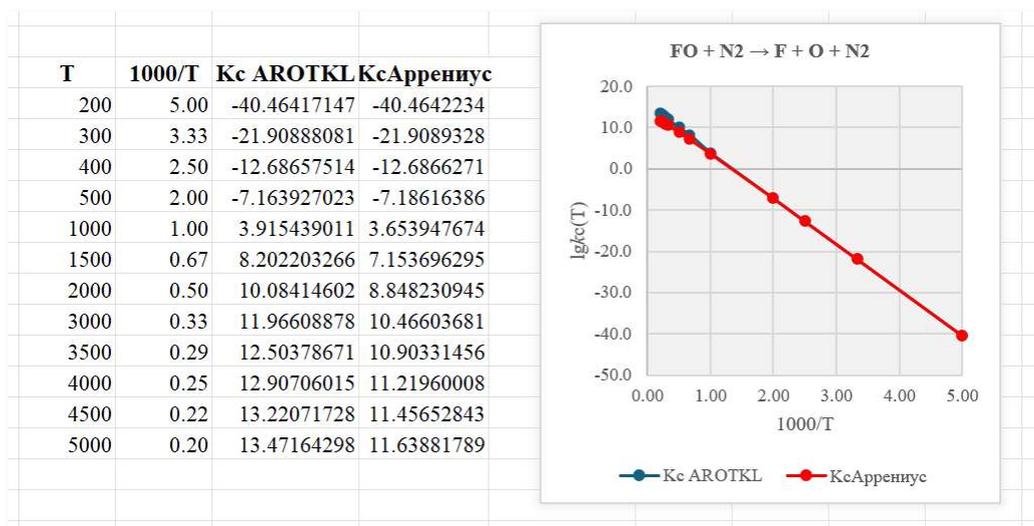


Рис. 9. Зависимость $k_c(T)$ реакции $\text{FO} + \text{N}_2 \rightarrow \text{F} + \text{O} + \text{N}_2$ и таблица расчетных значений

3. Процедуры работы

С данными БРД можно работать как с любыми данными Excel. Однако в БРД существуют ограничения по редактированию – все данные защищены от изменений и по сортировке внутри БРД.

Обзорные запросы к хранимому фонду БРД предполагают выдачу справочной информации, которая, с одной стороны, должна представить полноту представляемых данных для интересов решаемой задачи, а, с другой стороны, дает четкое понимание ограничений на совместимость конкретных значений описательных атрибутов. Например, здесь заранее до начала поиска можно выяснить наличие в выбранном подклассе реакций в интересующей пользователя газовой среде.

Ниже будут проиллюстрированы несколько примеров процедур работы с хранимыми данными. Одна из процедур подразумевает общий обзор хранимого фонда БРД, вторая связана с подготовкой данных для расчета константы скорости конкретной реакции или группы реакций, составляющих целевой список для решения прикладной задачи. При составлении группового запроса можно получить информацию о реакциях:

- начиная с заданного кода (номера) процесса;
- с ионизованными компонентами, выбирая соответствующие подклассы;
- с заданным компонентом (реагентом или продуктом);
- с заданными реагентами;
- в заданной системе атомов процесса или в заданной системе атомов реагентов;
- реагенты которых, включая и не реагирующую частицу, входят в конкретный набор веществ;
- происходящих в заданной компонентной среде.

Поисковые действия по составлению общего обзора БРД можно начинать с просмотра информации на листе **Реакции**. Рассмотрим несколько возможных действий, которые выполняются с помощью функции Excel **Найти и заменить**. Ознакомившись предварительно с имеющимися подклассами реакций и подобрав интересующий, можно просмотреть все реакции, принадлежащие к выбранному подклассу. Для этого:

1. открыть **Редактирование** или воспользоваться клавишами **Ctrl+F**;
2. в поле **Найти** указать искомое имя подкласса;
3. нажать **Найти далее**, чтобы перемещаться между результатами поиска или **Найти все**, чтобы сразу получить весь список `Ncode` реакций этого подкласса.

Чтобы поисковый запрос был корректным, следует использовать параметр поискового меню – **Ячейка целиком** включенным. Это тем более важно в том случае, когда осуществляется поиск по характеристикам SAPR и SARE, а также при поиске по реагентам или продуктам. Рисунок 10 иллюстрирует формирование запроса на поиск реакций, относящихся к подклассу ABIE (ионно-молекулярные реакции с участием электронов).

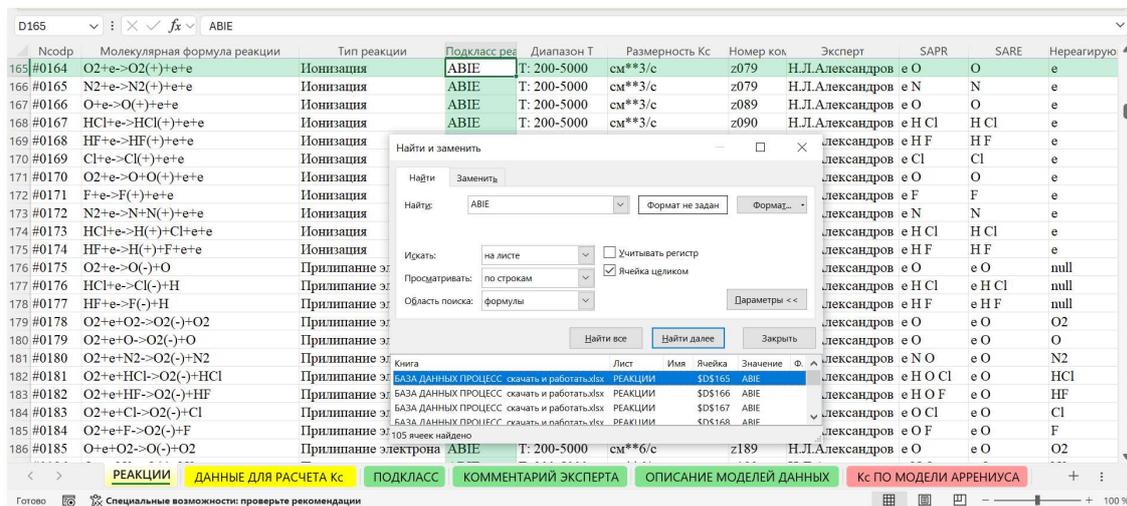


Рис. 10. Результат поиска реакций ионно-молекулярных реакций с участием электронов

Найдено 105 реакций. Далее возможно поочередно просматривать качественные характеристики всех 105 отобранных реакций подкласса ABIE. Аналогичным образом выполняется поиск по любому другому атрибуту реакции этого листа и всех остальных.

Для того, чтобы получить полную базовую информацию о конкретной реакции следует воспользоваться поиском по всей книге (рис. 11). Например, выбирая для поиска реакцию $N_2 + NO \rightarrow N + N + NO$ с уникальным кодом #0005, следует сформировать запрос на листе таким образом, чтобы в поле **Найти** было указание на поиск во всем листе, т.е. по книге.

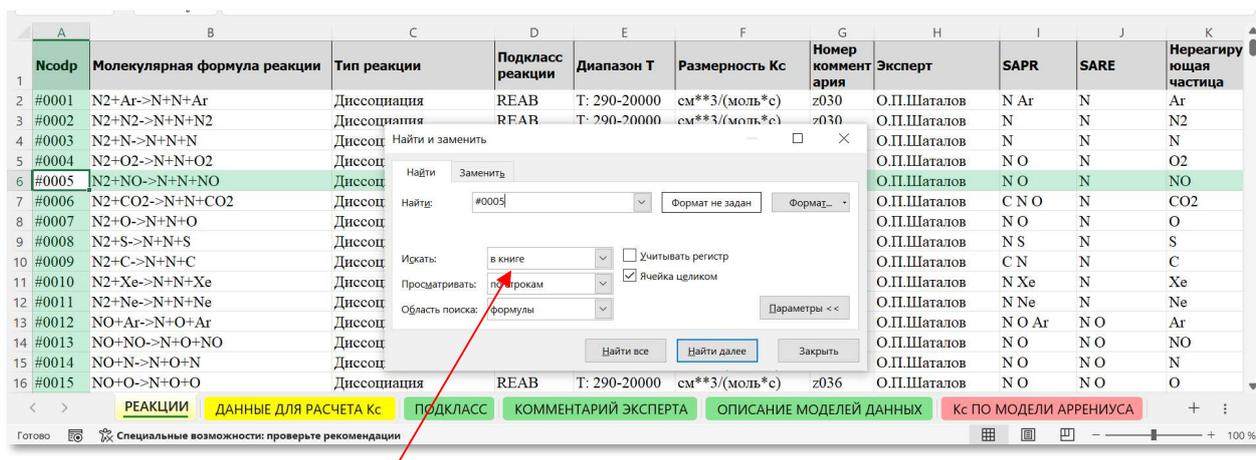


Рис. 11. Поисковый запрос по всей книге

Нажимая **Найти далее**, можно переместиться на все листы, информация на которых индексирована Ncodr, а именно на листы **Данные для расчета** и **Кс по модели Аррениуса**. Можно просмотреть и скопировать при необходимости все доступные данные в собственный файл для дальнейшей работы. В итоге может быть сформирован набор данных по реакции и проведен расчет зависимости константы скорости от поступательной температуры T и построить график зависимости $\lg k_c(T)$ (рис. 12)

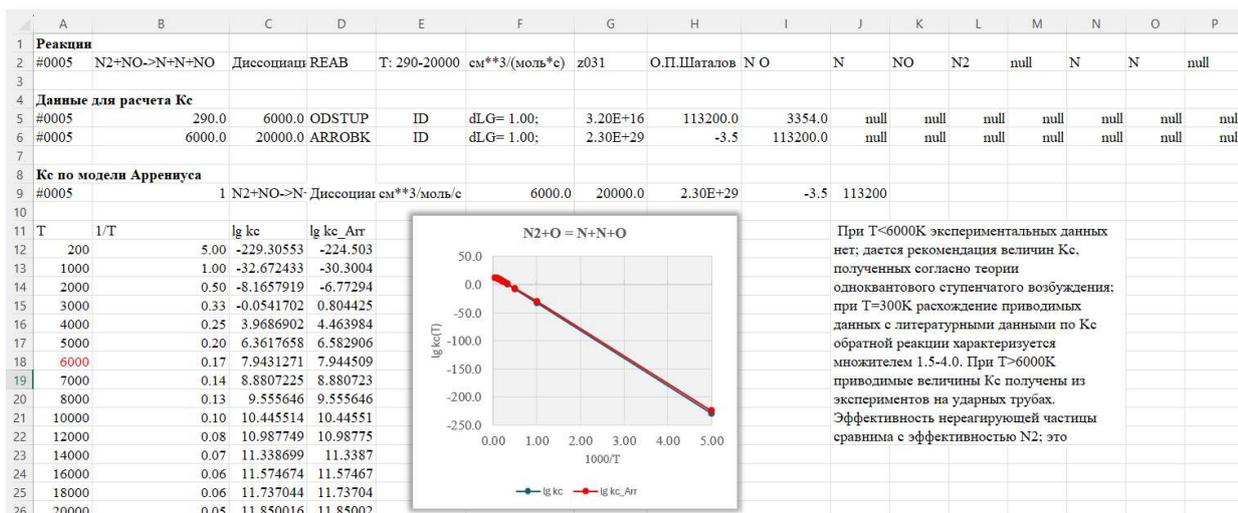


Рис. 12. Информация по реакции $\text{N}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{N} + \text{N} + \text{NO}$

Видно, что значения константы скорости, вычисленные на диапазоне T от 200 К до 6000 К по двум разным моделям, отличаются незначительно, так что в прикладных расчетах можно использовать данные модель Аррениуса.

Описание и расчетные формулы моделей ODSTUP и ARROBK, использованных для хранения данных и расчета зависимости константы скорости на двух базовых диапазонах, доступны на листе **Описание моделей** или в Приложении № 4.

Если требуется подготовить набор данных по группе реакций, то следует последовательно подбирать данные по каждой реакции из группы. Формировать саму группу можно с использованием таких характеристик реакции как имена реагентов, продуктов, SAPR, SARE или формулы реакции.

Например, требуется найти данные по реакциям, в которых первым реагентом является CO_2 . Рассмотрим возможные шаги реализации этой задачи. Сначала на листе **Реакции** формируем с помощью функции **Найти и заменить** поиск по первому реагенту – выделяем столбец **1-й реагент**, вводим в поле **Найти** имя выбранного компонента CO_2 , отмечаем параметр поиска **Ячейка целиком**, нажимаем **Найти все**. В результате получаем 17 реакций.

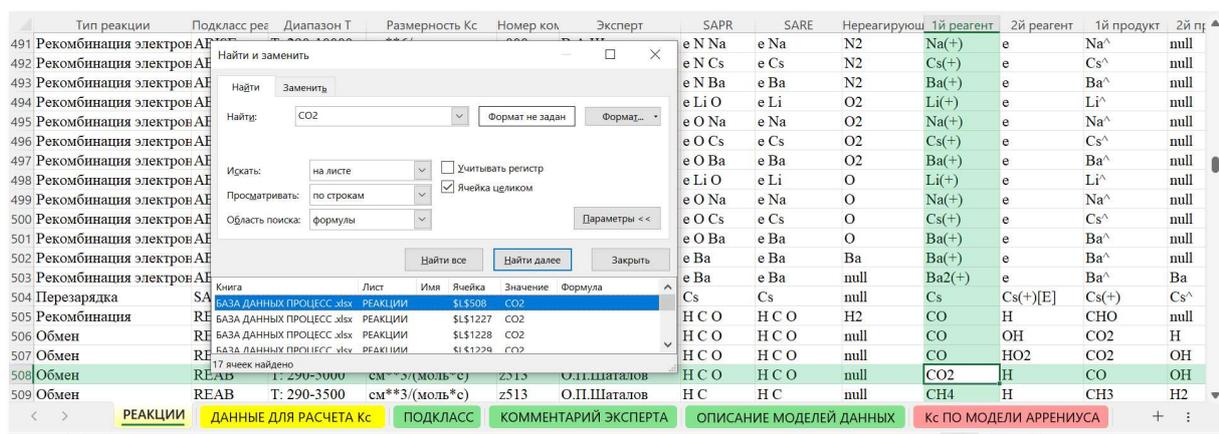


Рис. 13. Составление данных по группе реакций

Далее фиксируем номера ячеек, указанные в поле результатов **Найти и заменить**, получили набор уникальных кодов реакций набора – #0490, #0749, #1483, #1484, #1485, #1486, #1487, #1488, #1489, #1490, #1491, #1492, #1493, #1494, #1495, #1496, #1575. Перебираем все выбранные строки, копируем информацию во внешнем файле. Во время просмотра можно

уточнить характеристики отобранных реакций (тип реакции, диапазон T). Проводим поиск данных для расчета константы скорости по всей книге, как было описано выше, с помощью уникальных номеров Ncodr отобранных реакций, формируем внешний файл (рис. 14). Подготовленную информацию можно использовать для решения поставленной задачи. Во внешнем файле доступна сортировка выбранной из БРД информации.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	Реакции								
2	#0490	CO2+O->CO+O2	Обмен	REAB	T: 1700-6000	см**3/с	z341	Л.Б.Ибрагимова	
3	#0749	CO2+H->CO+OH	Обмен	REAB	T: 290-5000	см**3/(моль*с)	z513	О.П.Шаталов	
4	#1483	CO2+Ar->CO+O+Ar	Распад	REAB	T: 290-11000	см**3/с	z586	ИбрагимоваШаталв	
5	#1484	CO2+Kr->CO+O+Kr	Распад	REAB	T: 290-6000	см**3/с	z586	ИбрагимоваШаталв	
6	#1485	CO2+Ne->CO+O+Ne	Распад	REAB	T: 290-6000	см**3/с	z586	ИбрагимоваШаталв	
7	#1486	CO2+N2->CO+O+N2	Распад	REAB	T: 290-6000	см**3/с	z586	ИбрагимоваШаталв	
8	#1487	CO2+CO2->CO+O+CO2	Распад	REAB	T: 290-6000	см**3/с	z586	ИбрагимоваШаталв	
9	#1488	CO2+He->CO+O+He	Распад	REAB	T: 290-11000	см**3/с	z587	ИбрагимоваШаталв	
10	#1489	CO2+Xe->CO+O+Xe	Распад	REAB	T: 290-11000	см**3/с	z587	ИбрагимоваШаталв	
11	#1490	CO2+M2->CO+O+M2	Распад	REAB	T: 290-11000	см**3/с	z587	ИбрагимоваШаталв	
12	#1491	CO2+MM->CO+O+MM	Распад	REAB	T: 290-11000	см**3/с	z587	ИбрагимоваШаталв	
13	#1492	CO2+H->CO+O+H	Распад	REAB	T: 290-11000	см**3/с	z587	ИбрагимоваШаталв	
14	#1493	CO2+C->CO+O+C	Распад	REAB	T: 290-11000	см**3/с	z587	ИбрагимоваШаталв	
15	#1494	CO2+N->CO+O+N	Распад	REAB	T: 290-11000	см**3/с	z587	ИбрагимоваШаталв	
16	#1495	CO2+O->CO+O+O	Распад	REAB	T: 290-11000	см**3/с	z587	ИбрагимоваШаталв	
17	#1496	CO2->CO+O	Распад	REAB	T: 290-3500	1/с	z586	Л.Б.Ибрагимова	
18	#1575	CO2+C2O->products	Неопред.	REAB	T: 290-350	см**3/(моль*с)	z595	Л.Б.Ибрагимова	
19									

Рис. 14. Группа реакций с заданным первым реагентом

4. Заключение

Восстановлена база рекомендуемых данных системы АВОГАДРО в части химических реакций. Подготовлен новый вариант хранения и доступа к данным, составляющих фонд рекомендуемых коэффициентов аналитических моделей констант скорости химических реакций на определенных диапазонах поступательной температуры с указанием погрешности и уровня рекомендации. Данные были подготовлены в 2000-х годах группой высококвалифицированных специалистов для научной информационной системы АВОГАДРО.

Приложение №1

ПОДКЛАССЫ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

REAB	– Реакции нейтральных частиц в неотождествленных состояниях / Reactions of neutral particles in unidentified states
REABI	– Ионно-молекулярные реакции / Ion-molecular reactions
ABIE	– Ионно-молекулярные реакции с участием электронов / Ion-molecular reactions involving electrons
REMAV	– Реакции с участием неотождествленного нереагирующего компонента M / Reactions involving an unidentified non-reacting component M
ABISE	– Реакции нейтральных частиц и ионов, находящихся в неотождествленном возбужденном состоянии, а также электронов / Reactions involving neutral particles and ions in an unidentified excited state, as well as with the participation of electrons
ABSIE	– Реакции электронно-возбужденных нейтральных частиц, ионов, электронов / Reactions of electronically excited neutral particles, ions, electrons
SABI	– Реакции нейтральных частиц и ионов, находящихся в возбужденном состоянии (электронном или неотождествленном) / Reactions of neutral particles and ions in an excited state (electronic or unidentified)
AB(S)	– Реакции с участием электронно-возбужденных нейтральных частиц / Reactions involving electronically excited neutral particles

Приложение №2

СИСТЕМЫ АТОМОВ ПРОЦЕССА

N	O	C Ar	H	H Li	H O Na	e Ba	Ba
N Ar	O Ar	C N	H Ar	H Li N	H O Ne	e Cl	Cs
N Ba	O Ar Cs	C N O	H Ba	H Li N O	H O S	e F	F S
N Cl	O Ba	C O	H C	H Li O	H O S M	e F Cl	Na
N Cs	O Cl	C O Ar	H C Ar	H M	H O Xe	e F S	S Ar
N F	O Cs	C O Cs	H C Kr	H N	H S	e H C O	S M
N Na	O F	C O Kr	H C M	H N Ba	H S M	e H Cl	
N Ne	O F S	C O M	H C N	H N Cl	H Xe	e H F	
N O	O Na	C O Na	H C N O	H N Cs	He C O	e H F Cl	
N O Ar	O Na Ar	C O Ne	H C Ne	H N F	He Li O	e H O	
N O Ba	O Na Cs	C O S	H C O	H N Na	He N O	e H O Cl	
N O Cl	O Ne	C O S M	H C O Ar	H N O	He O Cs	e H O F	
N O Cs	O S	C O Xe	H C O Kr	H N O Ba	He O Na	e Li N	
N O F	O S Kr	C S	H C O M	H N O Cl	He O S	e Li O	
N O F S	O S M	C S Ar	H C O Ne	H N O Cs	Li	e N	
N O Kr	O Xe	C S M	H C O S	H N O F	Li N	e N Ba	
N O Na			H C O Xe	H N O Na	Li N O	e N Cl	
N O Ne			H C S	H Na	Li O	e N Cs	
N O Xe			H C Xe	H Ne	Li O Cs	e N F	
N S			H Cl Ar	H O	Li O Na	e N Na	
N Xe			H Cs	H O Ar		e N O	
			H F Ar	H O Ba		e O	
			H He	H O Cl		e O Ba	
			H He C	H O Cs		e O Cl	
			H He C O	H O F		e O Cs	
			H He O	H O Kr		e O F	
			H Kr	H O M		e O Na	

Приложение №3

СИСТЕМЫ АТОМОВ РЕАГЕНТОВ

Ba	C	C N	C N O	C O	C O Ar	C O S	C S
Cl	Cs	e Ba	e Cl	e Cs	e F	e F S	e H Cl
e H F	e Li	e Na	e O	F	F S	H	H Ba
H C	H C O	H C O S	H C S	H Cl	H Cs	H F	H Li
H Li O	H N Cl	H N F	H Na	H O	H O Ba	H O Cl	H O Cs
H O F	H O Na	H O S	H S	Li	Li N	Li O	N
N Ba	N Cl	N Cs	N F	N Na	N O	Na	O
O Ba	O Cl	O Cs	O F	O F S	O Na	O S	S

Приложение №4

ОПИСАНИЕ МОДЕЛЕЙ КОНСТАНТЫ СКОРОСТИ
ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Имя модели	Формула	Описание модели. Аргументы и коэффициенты модели
AIONBA	$k = 10^A \exp(-E/T) \ln(1+BT) - C[BT - \ln(1+BT)]$	Константа скорости процесса ассоциативной ионизации бария для уровней выше девятого. Аргумент модели – $T(K)$; коэффициенты – A, E, B, C
AROLGK	$k = 10^A T^n \exp(-E/T)$	Обобщенная формула Аррениуса. Модель предназначена для описания кинетики химических реакций. Предэкспонент представлен своим десятичным логарифмом, размерность энергии активации – K . Аргумент модели – $T(K)$; коэффициенты – A, n, E
AROTKL	$k = 10^A (T/300)^n \exp(-E/T)$	Обобщенная формула Аррениуса, в которой подстепенное выражение нормировано на температуру $T=300 K$. Аргумент модели – $T(K)$; коэффициенты – A, n, E
ARPLGK	$k = 10^A \exp(-E/T)$	Аррениус простой. Размерность энергии активации – K . Аргумент модели – $T(K)$; коэффициенты – A, E
ARRENK	$k = A \exp(-E/T)$	Аррениус простой. Размерность энергии активации – K . Аргумент модели – $T(K)$; коэффициенты – A, E
ARROBK	$k = AT^n \exp(-E/T)$	Аррениус обобщенный. Размерность энергии активации – K . Аргумент модели – $T(K)$; коэффициенты – A, n, E
EXPOLG	$k = \frac{10^A}{1 + B \exp(-E_1/T) + C \exp(-E_2/T)}$	Экспоненциально-полиномиальная модель константы скорости реакции, идущей одновременно по трем каналам. Аргумент модели – $T(K)$; коэффициенты – A, B, E_1, C, E_2
FCONLG	$k = 10^A$	Десятичный логарифм величины константы скорости, определенной на некотором наборе диапазонов аргументов среды. Количество аргументов модели неопределено, единственным коэффициентом модели является значение \lg величины константы скорости. Аргумент модели – нет; коэффициент – A
FCONST	$k = A$	Модель – число, постоянная величина. Определяется величина константы скорости на некотором наборе диапазонов аргументов среды. Количество аргументов модели неопределено, единственным коэффициентом модели является само значение константы скорости. Аргумент модели – нет; коэффициент – A
FUNSLG	$k = 10^A T^n$	Степенная зависимость константы скорости от температуры. Аргумент модели – $T(K)$; коэффициенты – A, n

FUNSTE	$k = AT^n$	Степенная модель константы скорости. Аргумент модели – $T(K)$; коэффициенты – A, n
FUSTTK	$k = A(T/298)$	Степенная нормированная модель константы скорости, в которой аргумент нормируется комнатной температурой $T=298$ К. Аргумент модели – $T(K)$; коэффициенты – A, n
MIONIZ	$k = 10^4 T^{3/2} (2 + E/T) \exp(-E/T)$	Модель константы скорости процесса ионизации и отрыва электрона, в предположении линейной зависимости сечения процесса в припороговой области при осреднении по максвелловскому распределению. Аргумент модели – $T(K)$; коэффициенты – A, n
MPREL1	$k = 10^4 T^{-3/2} \exp(-E_1/T) [1 - \exp(-E_2/T)]$	Модель константы скорости процесса прилипания электронов, учитывающая колебательное возбуждение молекулы. Аргумент модели – $T(K)$; коэффициенты – A, E_1, E_2
MPREL2	$k = [1 - \exp(-E_1/T)] \times$ $\times \{10^4 T^{1/2} E_3^2 \exp(-3E_1/T) / (T + E_3)^2 +$ $+ 10^{42} [E_4 + TE_5 / (T + E_5)] \times$ $\times E_5 T^{-1/2} \exp(-E_2/T) / (T + E_5)\}$	Модель константы скорости процесса прилипания электронов, соответствующая неадиабатической теории (метод эффективного радиуса взаимодействия). Аргумент модели – $T(K)$; коэффициенты – $A_1, A_2, E_1, E_2, E_3, E_4, E_5$
MPREL3	$k = T^{-3/2} [10^{41} \exp(-E_1/T) + 10^{42} \exp(-E_2/T) +$ $+ 10^{43} \exp(-E_3/T) + 10^{44} \exp(-E_4/T) +$ $+ 10^{45} (-E_5/T)]$	Модель константы скорости процесса трехчастичного прилипания электронов к молекуле на основе полуэмпирического подхода. Аргумент модели – $T(K)$; коэффициенты – $A_1, A_2, A_3, A_4, A_5, E_1, E_2, E_3, E_4, E_5$
ODSTUP	$k = A \exp(-E/T) [1 - \exp(-B/T)]$	Модель константы скорости диссоциации. Формула Аррениуса дополнена множителем $(1 - \exp(-B/T))$ в соответствии с теорией одноквантового ступенчатого возбуждения Е. Е. Никитина, где B – характеристическая температура диссоциирующей молекулы. Аргумент – $T(K)$; коэффициенты – A, E, B
RASZAH	$k = 10^{A_1} T^{-5/2} + 10^{A_2} T^{-1}$	Модель константы скорости рекомбинации атомных ионов с образованием возбужденного атома. Суммарно учитываются два процесса: рассеяние электрона на атоме и захват молекулой электрона под действием резонансной перезарядки. Аргумент модели – $T(K)$; коэффициенты – A_1, A_2
RESPBA	$k = 10^4 T^{1/2} \lg^2(B/T^{1/2})$	Модель константы скорости резонансной перезарядки атомов Ва. Аргумент модели – $T(K)$, коэффициенты – A, B
TOMLSU	$k = 10^4 T^{-0.75} (1 - BT^{-0.5})^{1.5}$	Модифицированная модель Томсона–Ланжевена описывает ионно-молекулярные реакции, комбинируя модели Томсона и Ланжевена с учетом возможности прилипания к иону частицы с постоянным дипольным моментом. Аргумент модели – $T(K)$; коэффициенты – A, B

Приложение №5

КОММЕНТАРИИ ЭКСПЕРТОВ

Код	Эксперт	Комментарий
z000		Комментарий отсутствует.
z021	О.П. Шаталов	При низких температурах данные получены из анализа теоретических и экспериментальных работ. При высоких температурах рекомендованы данные, полученные экстраполяцией из низкотемпературного интервала
z022	О.П. Шаталов	Экспериментальных данных нет. Рекомендация получена пересчетом k_c при $M=O_2$. Эффективность нереагирующей частицы при $M=NO$ взята такой же, как в процессе диссоциации O_2
z023	О.П. Шаталов	Экспериментальных данных нет. Рекомендация получена пересчетом k_c при $M=O_2$. Эффективность нереагирующей частицы при $M=N$ взята такой же, как в процессе диссоциации O_2
z025	О.П. Шаталов	Рекомендация взята из обзора <i>Baulch D.L. et al., Evaluated Kinetic Data for High Temperature Reactions, v.3, London: Butterworths, 1976.</i>
z028	О.П. Шаталов	При низких температурах рекомендуемая k_c диссоциации O_2 рассчитана по теории одноквантового ступенчатого возбуждения. При высоких температурах рекомендуемые значения основаны на результатах экспериментов с $M=O, O_2, Ag$
z030	О.П. Шаталов	При $T < 6000$ К экспериментальных данных нет; дается рекомендация величин k_c , полученных согласно теории одноквантового ступенчатого возбуждения; при $T = 300$ К расхождение приводимых данных с литературными данными по k_c обратной реакции характеризуется множителем $1.5 \div 4.0$. При $T > 6000$ К величины k_c соответствуют результатам экспериментов на ударных трубах
z031	О.П. Шаталов	При $T < 6000$ К экспериментальных данных нет; дается рекомендация величин k_c , полученных согласно теории одноквантового ступенчатого возбуждения; при $T = 300$ К расхождение приводимых данных с литературными данными по k_c обратной реакции характеризуется множителем $1.5 \div 4.0$. При $T > 6000$ К приводимые величины k_c получены из экспериментов на ударных трубах. Эффективность нереагирующей частицы сравнима с эффективностью N_2 ; это предположение может приводить к погрешности k_c , сравнимой с величиной этой k_c
z032	О.П. Шаталов	При $T < 6000$ К экспериментальных данных нет; дается рекомендация величин k_c , полученных согласно теории одноквантового ступенчатого возбуждения; при $T = 300$ К расхождение приводимых данных с литературными данными по k_c обратной реакции характеризуется множителем $1.5 \div 4.0$. При $T > 6000$ К приведенные величины k_c соответствуют результатам экспериментов на ударных трубах. Эффективность нереагирующей частицы совпадает с эффективностью N ; это предположение может приводить к погрешности k_c , сравнимой с величиной этой k_c
z033	О.П. Шаталов	При $T < 6000$ К экспериментальных данных нет; дается рекомендация величин k_c , полученных согласно теории одноквантового ступенчатого возбуждения; при $T = 300$ К расхождение приводимых данных с литературными данными по k_c обратной реакции характеризуется множителем $1.5 \div 4.0$. При $T > 6000$ К приводимые данные получены из экспериментов на ударных трубах. Эффективность нереагирующей частицы принята равной эффективности Ag ; это предположение может приводить к погрешности k_c , сравнимой с величиной этой k_c

z036	О.П. Шаталов	Данных по диссоциации молекул NO немного. При температурах выше 5000 К диссоциация молекул NO идет в отсутствие колебательного равновесия, поэтому при наличии данных о колебательной температуре молекул NO следует пользоваться выражением для двухтемпературной k_c . Данных об эффективности молекул (кроме NO, O ₂ , N ₂) нет, поэтому рекомендации даны по аналогии с N ₂ . Рекомендации при высоких температурах качественно учитывают зависимость k_c от степени колебательной неравновесности
z038	О.П. Шаталов	Рекомендуемые значения k_c при $100 < T < 600$ К основаны на анализе более 30 экспериментов, выполненных преимущественно в разрядах. Не рассматривались работы, в которых не учитывалась гетерогенная рекомбинация азота на стенках. В остальных диапазонах рекомендация получена пересчетом k_c реакции диссоциации N ₂ через константу равновесия
z039	О.П. Шаталов	Рекомендуемые значения k_c основаны на анализе более ста экспериментальных и теоретических работ, а также получены пересчетом по k_c обратной реакции через константу равновесия
z040	О.П. Шаталов	Рекомендация по аналогии с данными для M=N ₂
z041	А.П. Зуев	Реакция исследовалась подробно; рекомендация основана на анализе более 50 работ. Результаты этих работ хорошо согласуются между собой для M=Ar. Для оценки эффективностей других частиц данных недостаточно, поэтому рекомендация является экспертной оценкой. В пределе больших давлений рекомендация для k_∞ получена в результате измерений за ударной волной при $T > 1600$ К
z045	А.П. Зуев	Рекомендация k_c в области низких давлений основана на анализе 14 работ, выполненных на ударных трубах при $T > 1300$ К. Экстраполяция к комнатной температуре с точностью до множителя 2.3 согласуется с k_c обратной реакции. Константа скорости распада NO ₂ в области высоких давлений измерена при $T = 1540$ К и давлениях до 300 атм с точностью 40 %. Температурная зависимость выбрана в соответствии с теоретической величиной $\Delta H_{\text{No}} = 71.86$ ккал/моль. Центру переходной по давлению области соответствует $p = 300$ атм при $T = 1540$ К и $p = 600$ атм при $T = 2000$ К
z047	О.П. Шаталов	Исследование диссоциации озона выполнялось на различных установках: в ударных трубах, кюветах, при импульсном лазерном пиролизе и т.д. Проанализировано более 40 работ. При $T > 1000$ К отмечается влияние колебательной неравновесности озона на скорость его диссоциации. В области высоких давлений реакция не изучалась
z050	А.П. Зуев	Прямые измерения скорости реакции отсутствуют. Лишь при $T = 1216$ К в экспериментах по термическому распаду N ₂ O ₅ в смеси с Ar за ударной волной получена оценка 2.5×10^9 см ³ /(моль·с). Для обратной реакции измерения выполнены при комнатной температуре. Рекомендация основана на пересчете k_c обратной реакции через константу равновесия. Данные по эффективности других частиц также взяты из анализа информации о скорости обратной реакции. Предполагается, что относительные эффективности различных частиц не зависят от температуры; это предположение не имеет обоснования
z053	А.П. Зуев	Имеется единственная работа, где в диапазоне $3500 < T < 3700$ К получено соотношение констант скорости рассматриваемой реакции (1) NO ₃ + M → NO + O ₂ + M и реакции (2) NO ₃ + M → NO ₂ + O + M : $k_1/k_2 = 2.0$ без оценки погрешности результата. При этом не учитывалась структура радикала NO ₃ . При симметричном s-NO ₃ процесс (1) маловероятен; при асимметричном NO ₃ (O-N-O-O) процесс (1) возможен, однако в области $3500 < T < 3700$ К никакой информации о процессе (2) нет. В связи с этим рекомендацию следует рассматривать как оценку с погрешностью $ \Delta \log k_1 = 1.0$

z054	А.П. Зуев	Область первого порядка по давлению не достигнута экспериментально даже при $p=7$ атм, поэтому результаты всех исследований следует отнести к области второго порядка по давлению. Рекомендация дана на основании анализа трех работ для $M=Ar$. При $T>400$ К энергия активации реакции резко падает, что может быть связано с влиянием колебательной релаксации. Относительные эффективности других партнеров по диссоциации N_2O_4 известны недостаточно хорошо. Для константы скорости в пределе высоких давлений в качестве оценки рекомендуется использовать пересчет k_c обратного процесса через константу равновесия
z057	А.П. Зуев	Наиболее подробно реакция исследовалась при $M=N_2$ во всей переходной области по давлению в статическом реакторе с временной регистрацией N_2O_5 и в проточной системе с диагностикой N_2O_5 методом ионно-молекулярных реакций. В единственной работе на ударной трубе на диапазоне $450 < T < 550$ К реакция исследована при $M=Ar$; эксперимент относится к переходной по давлению области; определение k_c требует неочевидной экстраполяции в область низких давлений. Центру переходной по давлению области при $T=300$ К соответствует $p=0.6$ атм. Данные об эффективностях других M являются предварительными
z060	А.П. Зуев	Прямые экспериментальные измерения k_c отсутствуют. Рекомендация основана на данных о константе скорости обратной реакции и константе равновесия. Эффективности других молекул по отношению к Ar взяты такими же, как и для обратной реакции диссоциации
z062	А.П. Зуев	Реакция подробно изучалась экспериментально. Проанализировано 33 работы. В области температур, близких к комнатной, имеются прямые измерения скорости рекомбинации, при $T>1400$ К использован пересчет k_c обратной реакции через константу равновесия. Предполагается, что относительные эффективности различных частиц в рекомбинации не зависят от температуры. Используемые значения эффективностей получены в экспериментах по рекомбинации при комнатной температуре. Эти величины отличаются (примерно в 2 раза) от эффективностей в области $1600 < T < 3000$ К, полученных в опытах по диссоциации NO
z063	О.П. Шаталов	Проанализировано около 200 работ, посвященных исследованию образования озона. Рекомендуемые константы получены в экспериментах при $T < 1000$ К. При более высоких температурах рекомендация основана на пересчете k_c обратной реакции через константу равновесия. В области высоких давлений (200 атм) величина k_c измерена в среде азота. Не менее 80 % молекул озона при рекомбинации образуются в колебательно-возбужденном состоянии
z064	А.П. Зуев	Скорость измерена лишь при комнатной температуре. Константы скорости в области высоких давлений взяты на основе измерений при давлениях N_2 вплоть до 1000 атм. Погрешность экстраполяции этих результатов в область высоких температур не оценена
z066	А.П. Зуев	Измерений скорости реакции нет. Поскольку для скорости обратной реакции информация ненадежна, рекомендуемые величины k_c , основанные на пересчете через константу равновесия, имеют невысокую точность
z067	А.П. Зуев	Экспериментальные исследования константы скорости описаны в двух работах. Отмечается невысокая точность полученных результатов. Предлагаемые рекомендации получены в результате пересчета k_c обратной реакции через константу равновесия

z069	А.П. Зуев	Реакция детально исследовалась в экспериментальных и теоретических работах. Константы скорости прямой и обратной реакций согласованы с помощью константы равновесия. Эффективности O_2 , N_2 в рекомбинации одинаковы. Значения эффективностей других партнеров считаются равными их значениям для обратной реакции
z070	О.П. Шаталов	Результаты экспериментальных работ (проанализировано более 10 работ) не выявили какой-либо температурной зависимости констант во всем исследованном диапазоне температур от 200 до 5000 К
z071	О.П. Шаталов	Экстраполяция рекомендуемой константы в область низких температур дает хорошее согласие по абсолютной величине и по температурной зависимости с константой скорости обратной реакции. Достоверность экстраполяции на область температур выше 5000 К неопределена
z072	О.П. Шаталов	Рекомендация основана на анализе результатов многочисленных экспериментов, согласующихся между собой с точностью до множителя, равного 2
z073	О.П. Шаталов	В качестве рекомендации при $T > 1500$ К использованы значения константы, предложенные в книге <i>Химия горения под ред. У. Гардинера, М.: Мир, 1988</i> . При $T < 1500$ К дана более ранняя рекомендация (<i>Baulch D.L. et al. Evaluated kinetic data, v.2, 1973, p.557</i>), полученная путем пересчета k_c обратной реакции через константу равновесия
z074	О.П. Шаталов	Данные о k_c при высоких температурах отсутствуют. Из-за большой скорости диссоциации озона данную реакцию при $T > 1500$ К в расчетах можно не учитывать
z076	О.П. Шаталов	Результаты работ, выполненных до 1973 г., плохо согласуются между собой; предполагалось, что константа скорости имеет положительную энергию активации. После 1973 г. в области низких температур получена отрицательная температурная зависимость для константы скорости. При $T = 1800 \div 2000$ К скорость реакции была измерена при изучении термического распада N_2O за ударной волной, где, несмотря на узость температурного интервала, также получена отрицательная энергия активации
z077	О.П. Шаталов	Рекомендация основывается на пересчете данных о константе скорости обратной реакции, полученных при низких (300 ÷ 500 К) температурах, через константу равновесия
z079	Н.Л. Александров	Константа скорости прямой ионизации электронным ударом невелика (около 10^{-21} см ³ /с). Константа скорости определена с помощью интегрирования сечений, измеренных в пучковом эксперименте; см. <i>Rapp D., Englander-Golden P., J.Chem.Phys., 1965, v.43, p.1464</i> . Пороговая зависимость сечения ионизации от энергии электронов взята линейной. Полученные данные относятся к ионизации молекул с комнатной колебательной и вращательной температурой, но погрешность этого допущения невелика (см. <i>Evans B., Chang J.S., Yau A.W., Nicholls R.W., Phys.Rev.A, 1988, v.38, p.2782</i>)
z089	Н.Л. Александров	k_c процесса прямой ионизации электронным ударом невелика. Константа определена путем интегрирования сечений, измеренных в пучковом эксперименте: <i>Brook E., Harrison M.F.A., Smith A.C.M., J. Phys. B, 1978, v.11, p.3115</i> . Пороговая зависимость сечения ионизации от энергии электронов взята линейной
z090	Н.Л. Александров	Константа скорости процесса прямой ионизации электронным ударом невелика. k_c определена с помощью интегрирования сечения, восстановленного на основе полуэмпирического подхода. Пороговая зависимость сечения ионизации взята линейной. Полученные данные относятся к ионизации молекул с комнатной колебательной и вращательной температурой; погрешность этого допущения невелика. (<i>Evans B., Chang J.S., Yau A.W., Nicholls R.W., Hobson R.M., Phys.Rev.A, 1988, v.38, p.2782</i>)

z091	Н.Л. Александров	k_c процесса прямой ионизации электронным ударом невелика. Константа определена с помощью интегрирования сечения, восстановленного на основе полуэмпирического подхода. Пороговая зависимость сечения ионизации взята линейной
z092	Н.Л. Александров	k_c процесса прямой ионизации электронным ударом невелика. Для определения k_c диссоциативной ионизации молекулы взята формула, относящаяся к прямой ионизации этой молекулы, где вместо потенциала ионизации использован порог диссоциативной ионизации. Пороговая зависимость сечения ионизации от энергии электрона взята линейной. Полученные данные относятся к ионизации молекул с комнатной колебательной и вращательной температурой; погрешность этого допущения невелика. (Evans B. et al, <i>Phys.Rev.A</i> , 1988, v.38, p.2782)
z093	Н.Л. Александров	k_c определена путем интегрирования сечений захвата электронов колебательно-возбужденными молекулами с номерами $v=3 \div 9$, полученных в работе: Ахманов С.А. (мл.), Клоповский К.С., Осипов А.И., <i>Деп. ВИНТИ N5472-83, М., 1983</i> . Наиболее важны процессы, в которых участвуют молекулы с $v=4 \div 6$. Вкладом электронно-возбужденных молекул можно пренебречь. При выводе аналитической формулы использована зависимость сечения от энергии в виде delta-функции
z097	О.П. Шаталов	Экспериментальные данные, полученные на ударной трубе. Хорошо согласуются с данными, полученными пересчетом k_c обратной реакции через константу равновесия
z098	Н.Л. Александров	Константа скорости определена путем интегрирования сечений захвата электронов колебательно-возбужденными молекулами с $v=1 \div 3$, полученных в работе: Teillet-Billy D., Gauyacq J.P., <i>J.Phys.B</i> , 1984, v.17, p.4041. Наиболее важны процессы, в которых участвуют молекулы с $v=2, 3$. При выводе аналитической формулы использована зависимость сечения от энергии в виде $\sigma(\varepsilon) = B\theta(\varepsilon - E_1)\exp(-\varepsilon/E_2)$
z100	Н.Л. Александров	При выводе аналитической формулы использована зависимость сечения от энергии в виде delta-функции. k_c определена путем интегрирования сечений захвата электронов колебательно-возбужденными молекулами с $v=0, 1, 2$, измеренных экспериментально: Abouaf R., Teillet-Billy D., <i>Chem.Phys.Lett.</i> , 1980, v.73, p.106 (для $v=0$); Allan M., Wong S.F., <i>J.Chem.Phys.</i> , 1981, v.74, p.1687 (отношение сечений $\sigma(v=1,2)$ к $\sigma(v=0)$). Наиболее важен процесс, в котором участвуют молекулы с $v=2$
z103	Н.Л. Александров	Возможно влияние колебательного возбуждения молекул O_2 и N_2 (см. Александров Н.Л., Кончаков А.М., <i>ТВТ</i> , 1984, т.22, с.254; Александров Н.Л., <i>ТВТ</i> , 1988, т.25, с.1012), а также увеличения поступательной температуры тяжелых частиц (см. Александров Н.Л., <i>ЖТФ</i> , 1986, т.56, с.1411) на скорость захвата электронов. В результате k_c может уменьшиться в несколько раз
z104	Н.Л. Александров	Данных по процессу в литературе нет. Приводится оценка по аналогии с реакцией $O_2^+ + O_2 + e \rightarrow O_2 + O_2$
z105	Н.Л. Александров	Константа скорости для $M=N_2$ определена в рамках механизма Блоха – Брэдбери по формуле, предложенной в полуэмпирическом подходе: Александров Н.Л., <i>ЖТФ</i> , 1979, т.49, с.1649. Результаты микроволнового эксперимента для $M=N_2$: Shimamori H., Fessenden R.W., <i>J.Chem.Phys.</i> , 1981, v.74, p.453. Слабая зависимость константы захвата электрона объясняется вкладом в этот процесс ван-дер-ваальсовских молекул
z106	Н.Л. Александров	Данных по процессу в литературе нет. Приводится оценка по аналогии с реакцией $O_2 + N_2 + e \rightarrow O_2^- + N_2$

z110	В.Б. Розенштейн	Рекомендация основана на расчете по теории, изложенной в работе: <i>Н.М. Кузнецов, Кинетика мономолекулярных реакций, М.: Наука, 1982</i>
z141	Г.В. Карачевцев	Оценки по модели жестких шаров. Более точные оценки k_c могут быть получены в рамках теории прямых реакций: <i>Голубков Г.В., Иванов Г.К., Теор.эксперим.химия, 1971, т.7, с.247</i>
z142	Г.В. Карачевцев	Оценки по модели жестких шаров. Более точные оценки k_c могут быть получены в рамках теории прямых реакций: <i>Голубков Г.В., Иванов Г.К., Теор. эксперим. химия, 1971., т.7, с.247</i> . В экспериментальной работе <i>Johsen R., Brown H.L., Biond M.A., J. Chem. Phys., 1971, v.55, p.186</i> получено $k_c = 10^{-13}$ [см ³ /с] в диапазоне кинетических энергий ионов $0.04 \div 5$ эв. При этом колебательная температура была равна 300 К
z143	Г.В. Карачевцев	Данные получены с помощью модели Томсона, как оценка по порядку величины. Более точные оценки могут быть проведены в рамках статистической теории: <i>Patric R., Golden D.M., J.Chem.Phys., 1985, v.82, N1, p.75</i>
z144	Г.В. Карачевцев	В экспериментальной работе <i>McKnight L.G., Savina J.M., J.Chem.Phys., 1972, v.57, p.5156</i> получено $k_c = 9 \times 10^{-31}$ см ⁶ /с при $T = 300$ К. В экспериментальной работе <i>Gatland I.R. et al., Phys.Rev., 1975, v.12A, p.1885</i> получено $k_c = 2 \times 10^{-30}$ см ⁶ /с при $T = 300$ К
z145	Г.В. Карачевцев	Величины k_c перезарядки на H ₂ могут быть завышены в большей степени по сравнению с другими процессами
z146	Г.В. Карачевцев	Данные являются оценкой константы по порядку величины. Учитывалось влияние постоянного дипольного момента молекулы на k_c скорости захвата молекулы ионом и на время распада возбужденного комплекса, а также влияние постоянного дипольного момента стабилизирующей молекулы М. Более точные оценки могут быть проведены в рамках статистической теории: <i>Patric R., Golden D.M., J.Chem.Phys., 1985, v.82, p.75</i>
z163	В.М. Григорьева	Оценка k_c реакции основана на экспериментальных данных по k_c реакции $F_2 + O \rightarrow F + FO$: <i>Арутюнов В.С., Бубен С.Н., Чайкин А.М., Кинетика и катализ, 1979, т.20, N3, с.570</i> ; и температурной зависимости константы равновесия. Приведенную величину можно считать оценкой порядка величины k_c реакции. Для низких температур значение k_c пренебрежимо мало, реакция может иметь значение только при высокой температуре
z165	Ю.М. Гершензон	Оценка k_c реакции произведена с помощью величины k_c обратной реакции и температурной зависимости константы равновесия $k_c = \exp(2 - 34000/T)$
z166	В.М. Григорьева	В работе <i>Bernhardt P. A. et al., J. Geophys. Res., 1986, v.91, p.8937</i> принято, что k_c реакции не зависит от температуры в интервале $300 < T < 2000$ К. Ввиду очень слабой температурной зависимости можно считать, что константа не зависит от T вплоть до 5000 К. Обратная реакция обладает большой эндотермичностью
z167	В.М. Григорьева	Полное сечение реакции не зависит от температуры в области $300 < T < 1500$ К: <i>Spence P., Shulz G.J., J.Chem.Phys., 1973, v.58, N 5, p.1800</i>
z168	В.М. Григорьева	Приведены наиболее экзотермичные каналы реакции. k_c реакции измерена при $T = 300$ К: <i>Smith D., Church M.J., Miller T.M., J.Chem.Phys., 1978, v.68, p.1224</i> . Обратные реакции не рассматриваются ввиду их большой эндотермичности

z169	В.М. Григорьева	Приведены наиболее экзотермичные каналы реакции. k_c реакции не измерена, значение ее принято равным значению k_c реакции $SF_6^- + O^+ \rightarrow SF_6 + O$. Обратные реакции не рассматриваются ввиду их большой эндотермичности
z170	В.М. Григорьева	k_c реакции измерена в работе <i>Moseley J.T., Clson R.E., Peterson J.R., Stud.Atom.Phys., 1975, v.5, p.1</i>
z171	Н.Л. Александров	k_c реакции рекомендована в базе двумя экспертами – Григорьевой В.М. и Александровым Н.Л. на основании анализа двух различных литературных источников. Приведенные в них значения k_c совпадают на одном и том же диапазоне температуры, но Александров Н.Л. дает оценку погрешности на поддиапазоне $290 < T < 310$ К. Григорьева В.М. отмечает, что обратная реакция обладает большой эндотермичностью $\Delta H = 3.7$ эв. (<i>Jasumasa I. et al., Gas phase ion-molecule rate constants through, 1982; Мак-Ивен М., Филлипс Л., Химия атмосферы, М.: Мир, 1978</i>)
z172	В.М. Григорьева	Значения k_c реакции, приведенные в <i>Bortner M.H., Krammer R.H., Bauer T., Summary of suggested rate constants, in DNA Reaction Rate Handbook, 1973</i> и <i>Biondi M.A., Comments At.Mol.Phys., D.4, p.85, 1973</i> , отличаются на порядок. В соответствии с рекомендацией <i>Bernhardt P.A. et al., J. Geophys. Res., 1986, v.91, N8, p.8937</i> , приводится большая величина, полученная в работе <i>Biondi</i> $k_c = 2.1 \times 10^{-6}$ см ³ /с. Обратная реакция обладает большой эндотермичностью $\Delta H = 7$ эв
z173	В.М. Григорьева	k_c реакции измерена в <i>Church M.J., Smith D., Int. J. Mass. Spectr. Ion. Phys., 1977, v.23, p.137</i>
z174	В.М. Григорьева	k_c реакции принята равной k_c реакции $SF_5^+ + SF_6^- \rightarrow$ нейтральные продукты. Обратная реакция сильно эндотермична
z175	В.М. Григорьева	Приводится наиболее экзотермичный канал реакции. Верхний предел константы дан в <i>Jasumasa Ikerce et al, Gas phase ion-molecule rate constants through, 1982</i> . В работе <i>Hunton D.E. et al., J.Geophys.Res., 1987, v.92, N8, p.8827</i> k_c измерена при $T = 300$ К, ее величина соответствует верхнему пределу $k_c = 1.1 \times 10^{-11}$. При высоких температурах значение k_c может существенно отличаться. Второй канал $SF_5^- + O \rightarrow SF_5 + O^-$ эндотермичен $\Delta H = 2$ эв, поэтому здесь не рассматривается
z176	Ю.М. Гершензон	Рекомендуемая величина k_c реакции почти точно совпадает с оценкой, приведенной в справочнике <i>De More W.B. et al., Chemical Kinetics and photochemical data for use in stratospheric modeling - Evaluation N7, JPL Publ.85-37, 1985</i> . Константа практически не зависит от температуры
z177	Г.В. Карачевцев	Данные получены с помощью модели Томсона, как оценка по порядку величины. Более точные оценки могут быть проведены в рамках статистической теории: <i>Patric R., Golden D.M., J.Chem.Phys., 1985, v.82, N1, p.75</i> . В экспериментальной работе <i>Gatland I.R. et al., Phys.Rev., 1975, v.12A, p.1885</i> получено значение $k_c = 2.0 \times 10^{-30}$ см ⁶ /с при $T = 300$ К
z178	Г.В. Карачевцев	Приведенные величины k_c представляют собой оценку верхней границы
z184	В.М. Григорьева	Возможен заметный рост k_c реакции с температурой. Приведенное значение k_c соответствует температуре 300 К
z189	Н.Л. Александров	Данных по процессу в литературе нет. Оценка с использованием принципа детального баланса по k_c обратного процесса с $M = Ar$, (см. <i>Caledonia G.E., Chem.Rev., 1975, v.75, p.333</i>) дается в качестве рекомендуемого значения к этому процессу
z190	Н.Л. Александров	k_c процесса измерена при $T = 300$ К проточным методом после свечения (см. <i>Мак-Ивен М., Филлипс Л., Химия атмосферы, М.: Мир, 1978</i>)

z191	Н.Л. Александров	Для k_c процесса с $M=O_2, N_2$ использована формула, аппроксимирующая результаты эксперимента с электронными лавинами при условиях: $4000 < T_i < 20000$ К и $T \ll T_i$ (Мак-Ивен М., Филлипс Л., <i>Химия атмосферы</i> , М.: Мир, 1978)
z192	Н.Л. Александров	Для расчета k_c этого процесса была использована формула, аппроксимирующая результаты эксперимента в дрейфовых трубках для диапазона температуры $375 < T < 600$ К (Мак-Ивен М., Филлипс Л., <i>Химия атмосферы</i> , М.: Мир, 1978)
z193	Н.Л. Александров	Для расчета k_c этого процесса использована формула, аппроксимирующая результаты эксперимента в ударных трубках при условиях: $M=N_2$ и $3000 < T < 6000$ К (Mandl A., <i>J. Chem. Phys.</i> , 1971, v.54, p.4129; 1976, v.64)
z194	Н.Л. Александров	Для расчета k_c использована формула, аппроксимирующая результаты экспериментов в ударных трубках при $3500 < T < 5500$ К (Mandl A., <i>J. Chem. Phys.</i> , 1973, v.59)
z195	Н.Л. Александров	Данных по процессу в литературе нет. В качестве рекомендации дается оценка, полученная по аналогии с оценками констант скоростей группы реакций: $F^- + F \rightarrow F_2 + e$, $F^- + O_2 \rightarrow FO_2 + e$, $F^- + O \rightarrow FO + e$. При оценке константы энергия активации принята равной порогу процесса
z197	Н.Л. Александров	Данных по процессу в литературе нет. Оценка k_c этого процесса проводилась с использованием принципа детального баланса по k_c обратного процесса с $M=N_2$, измеренной в эксперименте на ударной трубе при $3000 < T < 5400$ К (Mandl A., <i>J. Chem. Phys.</i> , 1971, v.54). Аналогичные результаты приведены в Caledonia G. E., <i>Chem. Rev.</i> , 1975, v.75
z198	Н.Л. Александров	Данных по процессу в литературе нет. В качестве оценки приведены k_c аналогичного процесса, где атом Cl заменен на атом F
z199	Н.Л. Александров	k_c определена путем интегрирования сечений, измеренных в пучковом эксперименте Peart B., Forrest R., Dolder K. T., <i>J. Phys. B</i> , 1979, v.12. Пороговая зависимость сечения отрыва от энергии электронов взята линейной
z200	Н.Л. Александров	k_c этого процесса определена путем интегрирования сечений, измеренных в пучковом эксперименте: Peart B., Forrest R., Dolder K. T., <i>J. Phys. B.</i> , 1979, v.12, p.L115. Пороговая зависимость сечения отрыва от энергии электронов взята линейной
z201	Н.Л. Александров	k_c этого процесса определена путем интегрирования сечения, восстановленного на основе полуэмпирического подхода с нормировкой на ион O^- . Пороговая зависимость сечения отрыва от энергии электронов взята линейной
z203	Г.В. Карачевцев	Оценка по формуле Ланжевена. Более точные оценки зависимостей k_c экзотермических ионно-молекулярных реакций от температуры можно получить с помощью статистической теории: Никитин Е.Е., Уманский С.Я. (сб. <i>Химия плазмы</i> , вып.1, ред. Смирнов Б.М., М.: Атомиздат, 1974)
z204	Г.В. Карачевцев	Оценка по модели жестких шаров. Более точные данные можно получить согласно теории прямых реакций: Голубков Г.В., Иванов Г.К., <i>Теор. и экспер. химия</i> , 1971, т.7
z205	Г.В. Карачевцев	В экспериментальной работе Hamdan et al., <i>Chem. Phys. Lett.</i> , 1982, v.89, p.63 было показано, что при $T=300$ К константа скорости процесса для $HCl^+[v=0]$ не превышает 1.0×10^{-13} см ³ /с, а для $HCl^+[v>0]$ константа k_c приблизительно равна 9.0×10^{-10} см ³ /с
z206	Г.В. Карачевцев	Данные получены с помощью модели Томсона. Приведенные данные следует рассматривать как оценки по порядку величины. Более точные оценки могут быть проведены в рамках статистической теории Patric R., Golden D.M., <i>J. Chem. Phys.</i> , 1985, v.82, N1.

z216	Н.Л. Александров	С ростом температуры величина константы может заметно меняться; так, при переходе от $T=300\text{K}$ к $T=515\text{K}$ она уменьшается в $1.5 \div 2$ раза (<i>Smith D., Adams N.G., J.Phys.B, 1987, v.20, p.4903</i>)
z220	Г.В. Карачевцев	При повышении температуры можно считать, что k_c сохраняет указанное значение по порядку величины
z221	Г.В. Карачевцев	Приведенные величины k_c представляют собой верхнюю границу
z224	Ю.М. Гершензон	Рекомендация основана на аналогии с близкими процессами этого типа
z225	Ю.М. Гершензон	Рекомендация основана на пересчете k_c обратного процесса через константу равновесия, взятую по данным ИВТАНТЕРМО
z226	Ю.М. Гершензон	Количественные сведения о константе скорости взяты из рекомендаций NASA для невысоких температур (<i>W.DeMore et al., Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Stratospheric Modeling. Ev. N6, JPL Publ.85-37, 1985</i>)
z227	Ю.М. Гершензон	Рекомендация основана на аналогии с близкими процессами этого типа. Предэкспонент A оценен с точностью до $2 \div 3$ раз, показатель n – с точностью до ± 1
z228	Ю.М. Гершензон	Рекомендация основана на пересчете k_c обратного процесса через константу равновесия, взятую по данным ИВТАНТЕРМО. Погрешность предэкспонента $A = \pm 2.7 \times 10^{+15}$, показателя $n = \pm 1$, энергии активации $E = \pm 500\text{K}$
z229	Ю.М. Гершензон	Рекомендация основана на пересчете k_c обратного процесса через константу равновесия, взятую по данным ИВТАНТЕРМО. Погрешность предэкспонента $A = \pm 7.0 \times 10^{+15}$, показателя $n = \pm 1$
z232	Ю.М. Гершензон	Рекомендация основана на пересчете k_c обратного процесса через константу равновесия, взятую по данным ИВТАНТЕРМО. Погрешность предэкспонента $A = \pm 4.0 \times 10^{+14}$, показателя $n = \pm 1$, энергии активации $E = \pm 1000\text{K}$
z233	Ю.М. Гершензон	Количественные сведения о k_c взяты из рекомендации NASA для невысоких температур (<i>W.DeMore et al., Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Stratospheric Modeling., Ev. N6. JPL Publ. 85-37, 1985</i>). Погрешность предэкспонента $A = \pm 3.4 \times 10^{+14}$, показателя $n = \pm 1.4$
z234	Ю.М. Гершензон	Рекомендация основана на пересчете k_c обратного процесса через константу равновесия, взятую по данным ИВТАНТЕРМО. Погрешность предэкспонента $A = \pm 6.0 \times 10^{+13}$, энергии активации $E = \pm 1500\text{K}$
z235	Ю.М. Гершензон	Количественные сведения о k_c взяты из рекомендаций NASA для невысоких температур (<i>W.DeMore et al., Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Stratospheric Modeling., Ev. N6. JPL Publ. 85-37, 1985</i>). Погрешность величины энергии активации $E = \pm 100\text{K}$
z236	Ю.М. Гершензон	Количественные сведения о k_c взяты из рекомендаций NASA для невысоких температур (<i>W.DeMore et al., Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Stratospheric Modeling., Ev. N6. JPL Publ.85-37, 1985</i>). Погрешность предэкспонента $A = \pm 3.0 \times 10^{+12}$, энергии активации $E = \pm 350\text{K}$
z237	Ю.М. Гершензон	Рекомендация основана на пересчете k_c обратного процесса через константу равновесия, взятую по данным ИВТАНТЕРМО. Погрешность предэкспонента $A = \pm 4.0 \times 10^{+12}$, энергии активации $E = \pm 450\text{K}$
z238	Ю.М. Гершензон	Рекомендация основана на пересчете k_c обратного процесса через константу равновесия, взятую по данным ИВТАНТЕРМО. Погрешность величины энергии активации $E = \pm 1200\text{K}$
z239	Ю.М. Гершензон	Количественные сведения о k_c взяты из рекомендаций NASA для невысоких температур (<i>W.DeMore et al., Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Stratospheric Modeling., Ev. N6. JPL Publ.85-37, 1985</i>). Погрешность величины энергии активации $E = \pm 200\text{K}$

z240	Ю.М. Гершензон	Рекомендация основана на пересчете k_c обратного процесса через константу равновесия, взятую по данным ИВТАНТЕРМО. Погрешность предэкспонента $A = \pm 1.2 \times 10^{+15}$, энергии активации $E = \pm 2000$ К
z241	Ю.М. Гершензон	Рекомендация основана на пересчете k_c обратного процесса через константу равновесия, взятую по данным ИВТАНТЕРМО. Погрешность предэкспонента $A = \pm 3.0 \times 10^{+13}$, энергии активации $E = \pm 500$ К
z242	Ю.М. Гершензон	Рекомендация основана на результатах <i>В.Н. Кондратьев, Константы скорости газозфазных реакций, М., 1970</i>
z245	В.А. Шеверев	Рекомендуемые данные основаны на измерениях в пламени. Константа должна пониматься как эффективная по всевозможным каналам, включая ступенчатую ионизацию
z246	В.А. Шеверев	Константа получена в пучковом эксперименте и описывает отдельный канал реакции
z249	В.А. Шеверев	Значения получены путем экстраполяции данных по перезарядке для энергий ≥ 6 эВ
z252	В.А. Шеверев	Для тушения возбужденных атомов Ва кислородом существенным оказывается вклад реакции $\text{Ba}^+ + \text{O}_2 \rightarrow \text{BaO} + \text{O}$. Константы скорости являются оценочными и получены на основании данных по тушению возбужденных состояний атомов Са и Sr, сходных по структуре термов
z275	В.Б. Розенштейн	Рекомендация основана на расчете по теории, изложенной в работе: <i>Н.М. Кузнецов, Кинетика мономолекулярных реакций, М.: Наука, 1982</i>
z277	В.Б. Розенштейн	Оценка сверху величины k_c получена по элементарной теории столкновений с использованием энтальпии реакции и газокинетических размеров реагирующих частиц
z278	В.Б. Розенштейн	Вероятно, что реакция непростая. Предполагаемый механизм: $\text{Ba}(^1\text{S}) + \text{O}_2(^3\Sigma) \rightarrow \text{BaO}_2^*, \text{BaO}_2^* \rightarrow \text{BaO}(^1\Sigma) + \text{O}(^3\text{P}),$ $\text{BaO}_2^* + \text{M} \rightarrow \text{BaO}_2 + \text{M}$. Абсолютная погрешность величины энергии активации составляет 2100 К
z279	В.Б. Розенштейн	Рекомендация для низких давлений основана на материале 2 работ: <i>NASA Reference Publication, June 1988; Present State of Knowledge of the Upper Atmosphere 1988: An Assessment Report</i>
z280	В.Б. Розенштейн	Рекомендация основана на результатах экспериментальной работы <i>Plane J.M.C., Rajasekhar B., J.Phys.Chem., 1978, v.68, p.1429</i>
z281	В.Б. Розенштейн	Температурная зависимость k_c принята такой же, как и для реакции $\text{Li} + \text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{LiO}_2 + \text{M}$
z282	В.Б. Розенштейн	k_i рассчитана в предположении дисперсионного взаимодействия
z341	Л.Б. Ибрагимова	Рекомендация для константы получена пересчетом k_c обратной реакции
z444	О.П. Шаталов	Прямые данные о протекании этой реакции отсутствуют в литературе. Существуют две работы, в которых реакция привлекалась для интерпретации эксперимента. В типичных условиях горения реакция идет медленно по сравнению с конкурирующей реакцией $\text{CH}_3 + \text{H} + \text{M} \rightarrow \text{CH}_4 + \text{M}$. Данные об обратной реакции отсутствуют
z445	О.П. Шаталов	В литературе нет данных о прямых измерениях k_c и продуктов реакции. Само существование реакции подвергается сомнению. По оценкам 4 работ величина k_c имеет значения от $5.6 \times 10^{+13}$ до $4.0 \times 10^{+12}$ см ³ /моль·с при $296 < T < 2300$ К. Среднее из этих значений рекомендовано для использования
z446	О.П. Шаталов	Механизм реакции не ясен; реакция важна для расчетов процессов воспламенения, т.к. является стадией разветвления цепи. В обратном направлении реакция идет по другим каналам

z447	О.П. Шаталов	k_c неявно зависит от температуры. Рекомендуемое значение равно k_i . В пределе высоких давлений расхождение k_c обратной реакции с k_c обратной реакции, пересчитанной через данную рекомендацию, может достигать порядка величины. Данные о k_0 имеют очень большой разброс, поэтому при необходимости для k_0 следует использовать значение, пересчитанное из k_0 обратной реакции и k_p
z448	О.П. Шаталов	k_c неявно зависит от температуры. В пределе низких давлений и $900 < T < 2500$ К экспериментальные данные о k_c прямой и обратной реакций отсутствуют. Экстраполяция рекомендуемой k_c на этот диапазон может дать ошибку, равную двум порядкам величины. Для k_i в пределе больших давлений аналогичным является диапазон $T > 2000$ К
z449	О.П. Шаталов	Данные о прямой и обратной реакциях получены в различных температурных диапазонах и экстраполяции рекомендаций в перекрывающемся диапазоне температур не согласованы через константу равновесия
z450	О.П. Шаталов	Прямые доказательства наличия этого канала реакции отсутствуют. Рекомендация основана на вычислении разницы между суммарной k_c реакций $\text{CH}_3 + \text{CH}_3$, не приводящих к C_2H_6 , и константой скорости реакции, в которой возникают атомы Н ($\text{CH}_3 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}$). Данных об обратной реакции нет
z451	О.П. Шаталов	При $T < 1500$ К и при $T > 3000$ К экспериментальные данные о прямой и обратной реакциях отсутствуют. Данных в переходной по давлению области и в области высоких давлений нет. В обратном направлении идет другая (быстрая) реакция $\text{CH}_2 + \text{H} \rightarrow \text{CH} + \text{H}_2$
z452	О.П. Шаталов	Информации об обратной реакции нет
z454	О.П. Шаталов	Рекомендуемая k_c соответствует протеканию реакции в пределе низких давлений. Данные о константе в переходной по давлению области (выше 1 атм), в пределе высоких давлений и данные об обратной реакции отсутствуют
z455	О.П. Шаталов	Прямых измерений k_c мало. Данные об обратной реакции отсутствуют
z456	О.П. Шаталов	Данные о k_c получены преимущественно непрямыми методами. Данных о k_c обратной реакции нет
z457	О.П. Шаталов	Рекомендация основана на данных о вкладе продуктов реакции, идущей в обратном направлении по двум каналам: $\text{CO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{CHO} + \text{O}$ и $\text{CO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{CO} + \text{OH}$
z458	О.П. Шаталов	Рекомендация основана на данных двух работ. Продукты реакции стабильны, реакция в обратном направлении не идет
z459	О.П. Шаталов	Данных об обратной реакции нет; в обратном направлении идет другая реакция: $\text{CO} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{OH}$
z460	О.П. Шаталов	Большой разброс литературных данных. Рекомендуемое значение k_c является средним из имеющихся в литературе и совпадает со значением, пересчитанным из k_c обратной реакции и k_p . Константа соответствует пределу низких давлений и применима до давления в несколько атмосфер. Данные в переходной по давлению области и в пределе высоких давлений отсутствуют
z461	О.П. Шаталов	Быстрая беспороговая реакция. Экспериментальные данные имеются при $295 < T < 600$ К, при $T > 600$ К – экстраполированные данные. Наиболее вероятные (но не идентифицированные) продукты реакции: Н и СНО
z462	О.П. Шаталов	При высоких температурах вероятными продуктами реакции являются CO_2 , OH , Н, а при комнатной температуре – CO , OH , Н, что связано с различной скоростью перестройки комплекса H_2CO_2 при различных температурах

z463	О.П. Шаталов	Рекомендация по одной работе, выполненной при комнатной температуре; продукты реакции идентифицированы ненадежно
z464	О.П. Шаталов	Рекомендация по экспериментальным данным, полученным при комнатной температуре
z465	О.П. Шаталов	Реакция – источник затравочных электронов и ионов в пламени
z466	О.П. Шаталов	Кроме высокой скорости, о реакции не известны ни температурная зависимость, ни состав продуктов
z467	О.П. Шаталов	Данные об обратной реакции отсутствуют
z468	О.П. Шаталов	Имеющиеся две работы дают одинаковую энергию активации (41 кДж/моль), но различные величины предэкспонента. Рекомендуется среднее значение
z469	О.П. Шаталов	Данные о реакции имеются при $T < 298$ К; продукты реакции, температурная зависимость k_c неизвестны
z470	О.П. Шаталов	При $T > 1000$ К растет разброс экспериментальных данных; при $T > 2000$ К разброс данных превышает порядок величины. Данных об обратной реакции нет
z471	О.П. Шаталов	k_c неявно зависит от давления. В пределе низких давлений экспериментальные данные имеют большой разброс. Данных об обратной реакции нет; в обратном направлении реакция идет преимущественно по каналу: $\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{CHO} + \text{H}_2$ как в области низких, так и в области высоких давлений. В пределе высоких давлений рекомендация дана по одной работе, выполненной при $393 < T < 473$ К
z472	О.П. Шаталов	Рекомендация основана на оценке, выполненной в единственной работе. Данных об обратной реакции нет
z473	О.П. Шаталов	k_c получена как результат относительных измерений по сравнению с k_c параллельно идущей реакции рекомбинации: $\text{C}_2\text{H}_5 + \text{C}_2\text{H}_5 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_{10}$ при $T < 800$ К. Данных об обратной реакции нет
z474	О.П. Шаталов	Более 80 % продуктов реакции составляют CH_3CHO и H ; k_c оценена по аналогии с реакциями атомов O с CH_3 и C_3H_7
z475	О.П. Шаталов	Реакция хорошо изучена при $T = 800$ К, экстраполяция в области высоких и низких температур носит оценочный характер. Данных об обратной реакции нет
z476	О.П. Шаталов	Пересчет k_c обратной реакции через k_p . k_c неявно зависит от давления; при давлениях порядка атмосферы и выше реакция протекает в пределе высокого давления. В пределе низкого давления экспериментальных данных нет
z477	О.П. Шаталов	Экспериментальные данные о протекании реакции в пределе низкого давления отсутствуют
z478	О.П. Шаталов	В пределе высоких давлений реакция хорошо изучена, и k_i хорошо совпадает с константой, пересчитанной из k_c обратной реакции через k_p . В пределе низких давлений k_0 изучена слабо; данные об обратной реакции для k_0 отсутствуют
z479	О.П. Шаталов	Данных об обратной реакции нет. В обычных условиях горения протекание реакции соответствует пределу высокого давления
z480	О.П. Шаталов	k_c неявно зависит от давления. Реакция хорошо изучена при комнатной температуре в пределе высокого давления. Рекомендация в этой области получена путем согласования с k_c обратной реакции. В области низких давлений данных о реакции нет; в расчетах целесообразно пользоваться пересчетом k_c обратной реакции через k_p
z481	О.П. Шаталов	Экспериментальные данные имеют большой разброс; экстраполяция k_c за температурный диапазон $700 < T < 2000$ К ненадежна

z482	О.П. Шаталов	При $p < 1$ атм продуктами реакции являются CH_3 , CHO ; при $p > 1$ атм продукты – $\text{C}_2\text{H}_3\text{O}$, H
z483	О.П. Шаталов	Данных о реакции недостаточно. Продуктом является $\text{C}_2\text{H}_4\text{OH}$
z484	О.П. Шаталов	Данных о реакции мало; данных об обратной реакции нет.
z485	О.П. Шаталов	Один из каналов диссоциации этилена. Данные только в пределе низкого давления. Данных об обратной реакции нет.
z486	О.П. Шаталов	Рекомендация по одной экспериментальной работе и из общих соображений о величине предэкспонента. Данных об обратной реакции нет
z487	О.П. Шаталов	k_c неявно зависит от давления; в пределе низких давлений k_o не согласуется с данными, пересчитанными по k_c обратной реакции, что связано с отсутствием точных данных о теплоте образования радикала C_2H_3 . В пределе высоких давлений и в переходной по давлению области данные имеются в одной работе; согласие с константой, пересчитанной по k_c обратной реакции, удовлетворительное
z488	О.П. Шаталов	В литературе имеются данные о k_c в пределе низких давлений при низких температурах; согласие с k_c , пересчитанной по k_c обратной реакции через k_p , неудовлетворительное. В пределе высоких давлений данных мало; согласие с пересчитанной k_c обратной реакции хорошее
z489	О.П. Шаталов	В литературе имеются результаты косвенных измерений k_c . Рекомендация основана на пересчете k_c обратной реакции через k_p
z490	О.П. Шаталов	Рекомендация основана на результатах косвенных измерений. Продукты реакции неизвестны
z491	О.П. Шаталов	Реакция идет как реакция присоединения в пределе высокого давления; продукт: $\text{C}_2\text{H}_2\text{OH}$
z492	О.П. Шаталов	Экспериментальные данные имеются при $T = 298$ К. Данных об обратной реакции нет.
z493	О.П. Шаталов	Имеются данные о двух каналах протекания реакции ацетилена с атомарным кислородом
z494	О.П. Шаталов	Прямые измерения k_c при высоких температурах не проводились
z495	О.П. Шаталов	Рекомендация основана на данных одной работы при $300 < T < 525$ К. Данных об обратной реакции отсутствуют
z496	О.П. Шаталов	Экспертная оценка. Продукты реакции неизвестны.
z497	О.П. Шаталов	Рекомендация основана на одной работе и оценке У.Гардинера (<i>Химия горения, под ред. Гардинера У. (мл), М.: Мир, 1988</i>). Данных об обратной реакции нет
z498	О.П. Шаталов	k_c неявно зависит от давления; есть данные в пределе высокого и низкого давления. Данных об обратной реакции нет. Радикал CH_3CO нестабилен, распадается термическим путем
z499	О.П. Шаталов	Состав продуктов идентифицирован ненадежно; данных об обратной реакции нет. Справочные данные (<i>Химия горения, под ред. Гардинера У. (мл), М.: Мир, 1988</i>)
z500	О.П. Шаталов	В литературе имеются данные при комнатной температуре. Состав продуктов идентифицирован ненадежно. Данных об обратной реакции нет
z501	О.П. Шаталов	k_c неявно зависит от давления; реакция исследована при низких и высоких температурах. Данных об обратной реакции нет
z502	О.П. Шаталов	Данные о реакции получены в одной работе при комнатной температуре косвенным методом. Состав продуктов неизвестен
z513	О.П. Шаталов	Рекомендация справочника – <i>Химия горения, под ред. У. Гардинера (мл), М.: Мир, 1988</i>

z514	О.П. Шаталов	Экстраполированные данные. Экстраполяция от $T < 298$ К (<i>Химия горения, под ред. У. Гардинера (мл), М.: Мир, 1988</i>)
z515	О.П. Шаталов	Экспертная оценка по двум работам, указанным в справочнике <i>Химия горения, под ред. У. Гардинера (мл), М.: Мир, 1988</i>
z516	О.П. Шаталов	Экспертная оценка по результатам косвенных измерений.
z517	О.П. Шаталов	Оценка с учетом относительной эффективности партнера по столкновению в сравнении с Ar
z518	О.П. Шаталов	Оценка с учетом относительной эффективности партнера по столкновению в сравнении с H_2
z519	В.И. Димитров О.П. Шаталов	Рекомендация по <i>Baulch D. L., v. 1, 1972</i> с учетом 5 более поздних экспериментальных работ
z520	О.П. Шаталов	Есть два канала диссоциации этилена. В обратном направлении идет реакция: $C_2H_3 + H \rightarrow C_2H_2 + H_2$
z521	О.П. Шаталов	Реакция идет как реакция отщепления: продукты $\rightarrow C_2H + H_2O$
z522	В.И. Димитров	Пересчет k_c обратной реакции через константу равновесия
z532	О.П. Шаталов	Рекомендация основана на экстраполяции термической константы скорости реакции $I[<2>P<3/2>] + H_2 \rightarrow HI + H$, измеренной в работе <i>Sullivan J.H., J.Chem.Phys., 1959, v.30, p.1292</i> , а также использовании представлений теории переходного состояния с учетом высокой эффективности колебательной энергии в преодолении энергетического барьера эндотермических реакций
z533	О.П. Шаталов	Рекомендация по <i>Baulch D.L., v.1, 1972</i> с учетом 4 более поздних экспериментальных работ
z534	О.П. Шаталов	Рекомендация по <i>Baulch D.L., v.1, 1972</i> с учетом 3 более поздних экспериментальных работ
z535	О.П. Шаталов	Рекомендация по <i>Baulch D.L., v.1, 1972</i> с учетом 14 более поздних экспериментальных работ
z536	О.П. Шаталов	Результат численного моделирования и сравнения с косвенными данными 6 экспериментальных работ (<i>Димитров В.И., Рекомендации по кинетическим коэффициентам скорости элементарных процессов в системе Н-О, Центр АВОГАДРО, М., 1989</i>)
z537	В.И. Димитров	Оценка k_c по результатам квантовомеханических расчетов (<i>Димитров В.И., Рекомендации по кинетическим коэффициентам скорости элементарных процессов в системе Н-О, Центр АВОГАДРО, М., 1989</i>)
z538	В.И. Димитров	Обработка экспериментальных данных, приведенных в двух обзорах: <i>Гардинер У., 1988; Baulch D.L., v.1, 1972</i> и в отчете <i>Димитров В.И., Центр АВОГАДРО, 1989</i>
z539	В.И. Димитров	Рекомендация по <i>Baulch D.L., v.1, 1972</i> с учетом одной более поздней работы
z540	О.П. Шаталов	Оценка k_c с учетом относительной эффективности нереагирующей частицы в сравнении с $M = Ar$
z541	О.П. Шаталов	Обработка экспериментальных данных, приведенных в <i>Baulch D.L., v.1, 1972</i> , и результатов одной более поздней работы.
z542	О.П. Шаталов	Обработка данных, приведенных в <i>Baulch D.L., v.1, 1972</i> , и результатов шести экспериментальных работ
z543	О.П. Шаталов	Оценка k_c с учетом относительной эффективности нереагирующей частицы в сравнении с H_2
z544	В.И. Димитров	Оценка k_c с учетом относительной эффективности нереагирующей частицы в сравнении с $M = H_2O$
z544	О.П. Шаталов	Экспертная оценка k_c по результатам трех экспериментальных работ
z545	О.П. Шаталов	Обработка результатов 14 экспериментальных работ

z547	В.И. Димитров	Обработка экспериментальных данных, приведенных в <i>Baulch D.L., v.1, 1972</i> , и результатов 9 более поздних работ
z548	О.П. Шаталов	Оценка k_c с учетом относительной эффективности нереагирующей частицы в сравнении с $M=N_2$
z549	О.П. Шаталов	Рекомендация по <i>Baulch D. L., v. 1, 1972</i> с учетом 2 более поздних экспериментальных работ
z550	О.П. Шаталов	Авторская оценка k_c методом численного моделирования
z551	В.И. Димитров О.П. Шаталов	Пересчет k_c обратной реакции через k_p и экстраполяция на низкотемпературный интервал
z552	В.И. Димитров О.П. Шаталов	Обработка данных, приведенных в <i>Baulch D.L., v.1, 1972</i> , и результатов пяти более поздних экспериментальных работ
z553	В.И. Димитров О.П. Шаталов	Обработка результатов двух экспериментальных работ
z554	О.П. Шаталов	Обработка данных, приведенных в <i>Baulch D.L., v.1, 1972</i> , и результатов пяти более поздних экспериментальных работ
z555	О.П. Шаталов	Оценка k_c по анализу термодинамических данных, приведенных Димитровым В.И., Азатьяном В.В. в сб.: <i>Вопросы газодинамики, Новосибирск, ИТПМ СО АН СССР, 1975</i>
z556	О.П. Шаталов	Оценка k_c по анализу квантовомеханических расчетов, приведенных Димитровым В.И., Азатьяном В.В. в сб.: <i>Вопросы газодинамики, Новосибирск, ИТПМ СО АН СССР, 1975</i>
z557	В.И. Димитров О.П. Шаталов	Оценка k_c по результатам анализа продуктов реакции и экстраполяция низкотемпературных экспериментальных результатов
z558	О.П. Шаталов	Аппроксимация экспериментальных данных и экстраполяция на высокотемпературный интервал
z560	В.Я. Басевич О.П. Шаталов	Оценка k_c при моделировании процесса с учетом низкотемпературных экспериментальных данных
z561	В.Я. Басевич О.П. Шаталов	Экстраполяция экспериментальных данных, полученных при $T=2380$ К на ударных трубах
z562	В.Я. Басевич О.П. Шаталов	Аппроксимация экспериментальных данных и экстраполяция
z563	В.Я. Басевич О.П. Шаталов	Экстраполяция данных, полученных при комнатной температуре
z564	В.Я. Басевич О.П. Шаталов	Экстраполяция данных, полученных при $T=409$ К
z565	В.Я. Басевич О.П. Шаталов	Экстраполяция данных, полученных при $T=1270$ К
z566	В.Я. Басевич О.П. Шаталов	Расчет по теории РРКМ при $T=317$ К и экстраполяция
z567	В.Я. Басевич О.П. Шаталов	Экстраполяция оценки k_c по результатам анализа продуктов реакции
z568	В.Я. Басевич О.П. Шаталов	Данные из экспериментов на ударных трубах
z569	В.Я. Басевич О.П. Шаталов	Оценка k_c по результатам модельных расчетов
z570	В.Я. Басевич О.П. Шаталов	Теоретическая оценка
z571	В.Я. Басевич О.П. Шаталов	Оценка k_c по результатам анализа продуктов реакции
z572	В.Я. Басевич О.П. Шаталов	Оценка верхней границы значения k_c
z573	В.Я. Басевич О.П. Шаталов	Экстраполяция данных, приведенных в работе <i>Galwert J.C., Fu Su, Botteenheim Y.W., Straus O.P., Atmospheric Environment, 1978, v.12, p.197</i>

z574	В.Я. Басевич О.П. Шаталов	Оценка k_c по аналогии с k_c реакции $O + CO + M \rightarrow CO_2 + M$
z575	В.Я. Басевич О.П. Шаталов	Оценка k_c по расходу реагентов
z576	В.Я. Басевич О.П. Шаталов	Результат анализа экспериментальных работ, выполненных с 1962 по 1988 год (Л.Б.Ибрагимова, Диссоциация и рекомбинация молекул CO_2 , Хим. физика, N3, 1990). Рекомендация относится к области низких давлений при $p < (10 \cdot T \cdot k_i / k_0)$ атм, где k_i – константа скорости реакции в пределе высоких давлений
z577	В.Я. Басевич О.П. Шаталов	Оценка с учетом относительной эффективности партнера по столкновению по сравнению с Ar. Рекомендация относится к области низких давлений при $p < (10 \cdot T \cdot k_i / k_0)$ атм, где k_i – константа скорости реакции в пределе высоких давлений
z578	В.Я. Басевич О.П. Шаталов	Результат анализа 4 экспериментальных и 3 теоретических работ, проведенного в Baulch et al., Evaluated kinetic data for high temperature reactions, v.3, 1976
z586	Л.Б. Ибрагимова О.П. Шаталов	Результат анализа 6 экспериментальных и 3 теоретических работ, проведенного в Baulch et al., Evaluated kinetic data for high temperature reactions, v.3, 1976
z586	Л.Б. Ибрагимова	Оценка с учетом относительной эффективности партнера по столкновению в сравнении с CO
z587	Л.Б. Ибрагимова О.П. Шаталов	Рекомендация по экспериментальной работе Appleton J.P., Steinberg M., Ziquornik D.J., J.Chem.Phys., v.52, N5, 1970
z588	Л.Б. Ибрагимова	Результат анализа 3 экспериментальных работ. Рекомендация по Hanson R.K., Proc. 9th Int. Shock Tube Symp., 1973, Stanford Univ., p.365
z589	Л.Б. Ибрагимова	Результат пересчета k_c обратной реакции через k_p
z590	Л.Б. Ибрагимова О.П. Шаталов	Рекомендация по экспериментальной работе Hanson R.K., Proc. 9th Int. Shock Tube Symp., 1973, Stanford Univ., p.365. Приведена верхней границы k_c
z591	Л.Б. Ибрагимова	Рекомендация по обзору Westley F., Herron J.T., Cvetanovic R.J., Compilation of chemical kinetic data for combustion Chemistry, US Dep. commer. Nat. Bur. Stand., Nat. Stand. ref. data ser., 1987, N73, part 1. Оценка верхней границы константы скорости
z592	Л.Б. Ибрагимова О.П. Шаталов	Оценка верхней границы константы скорости с учетом относительной эффективности третьего тела в сравнении с He. Приведена оценка верхней границы k_c
z593	Л.Б. Ибрагимова	Продукты реакции идентифицированы ненадежно. Возможны другие продукты – $C_2 + CO_2$. Оценка нижней границы k_c . Рекомендация дана по обзору Westley F., Herron J.T., Cvetanovic R.J., Compilation chemical kinetic data for combustion Chemistry, US Dep. commer. NBS, Nat. stahd. ref. data ser. 1987, N 73, part 1
z594	Л.Б. Ибрагимова	Результат измерений за фронтом ударной волны при температурах выше 1600 K
z595	Л.Б. Ибрагимова	Результат измерений при $T = 1540$ K и давлениях до 300 атм. Температурная зависимость выбрана в соответствии с величиной теплового эффекта реакции
z595	Л.Б. Ибрагимова О.П. Шаталов	Пересчет от константы скорости обратной реакции
z596	Л.Б. Ибрагимова О.П. Шаталов	Рекомендация обзора Baulch (1980) по результатам измерений и теоретического анализа
z601	Л.Б. Ибрагимова	Результат измерений в среде азота
z603	А.П. Зуев	По результатам обзора Baulch (1982) и более поздних исследований

z604	А.П. Зуев	Оценка на основании косвенных данных
z605	А.П. Зуев	Сопоставление экспериментальных данных с теорией мономолекулярного распада
z606	А.П. Зуев	Результаты получены из экспериментов струевым методом с селекцией ионов и экстраполированы от $T=300$ К
z607	А.П. Зуев	По данным экспериментов струевым методом с селекцией ионов
z608	А.П. Зуев	Экстраполяция единственного известного экспериментального результата, полученного струевым методом с селекцией ионов, от $T=300$ К. Имеет место большая эндотермичность процесса образования продуктов
z609	А.П. Зуев	Оценка верхней границы значения $k_c(T)$
z610	А.П. Зуев	Экстраполяция экспериментальных результатов, полученных струевым методом с селекцией ионов, от $T=300$ К
z664	Г.В. Карачевцев	Экстраполяция единственных экспериментальных результатов, полученных методом ионного циклотронного резонанса
z679	Г.В. Карачевцев	Экстраполяция экспериментальных результатов, полученных струевым методом с селекцией ионов, от $T=300$ К. При высоких температурах можно ожидать появления продуктов $\text{СНО}^+ + \text{ОН}$
z680	Г.В. Карачевцев	Экспериментальные данные, полученные методом дрейфовой трубки и методом ионного циклотронного резонанса
z681	Г.В. Карачевцев	Данные, полученные методом послесвечения в потоке; возможно образование продуктов: $\text{СО}_2^+ + \text{О}$
z682	Г.В. Карачевцев	Экспериментальные данные, полученные методом дрейфовой трубки. Величина $k_c(T)$ может также зависеть от колебательного состояния молекулы N_2
z683	Г.В. Карачевцев	Осреднение по экспериментальным результатам, полученным методом послесвечения в потоке
z684	Г.В. Карачевцев	Оценка верхней границы значения константы скорости реакции, запрещенной по орбитальной симметрии. Оценка дана по экспериментальным результатам

Благодарность

В работе над созданием проекта системы АВОГАДРО, разработкой, реализацией и наполнением начальных версий системы и всех ее компонентов, в том числе и баз рекомендуемых данных, активное участие принимали С.А. Лосев (Главный конструктор проекта «Система АВОГАДРО»), О.П. Шаталов, Л.Б. Ибрагимова, Е.Г. Колесниченко, Э.А. Ковач, М.Ю. Погосбекян. Научным руководителем проекта был академик Г.Г. Черный.

Слова благодарности экспертам БРД, которые провели большую работу по оценке данных и проявили большой интерес к созданию упорядоченного набора констант скорости физико-химических процессов. В эту группу входили А.П. Зуев, Н.Л. Александров, В.Б. Розенштейн, Г.В. Карачевцев, В.М. Григорьева, Ю.М. Гершензон, В.А. Шеверев, В.И. Димитров, В.Я. Басевич.

Литература

1. Лосев С. А., Шаталов О. П. Разработка автоматизированного банка данных в области физико-химической газодинамики // Химическая физика. 1987. Т. 6, № 12. С. 1677–1695.
2. Сергиевская А. Л. SQL-технология в базах физико-химических данных // Тезисы докл. II Все-союзного совещания Базы физико-химических и технологических данных для оптимизации металлургических технологий, Курган, 1991. С. 16–17.
3. Информатика в физико-химической газодинамике (под ред. С.А. Лосева, О.П. Шаталова) // Труды Института механики МГУ, 1992, 80 с.

4. Сергиевская А. Л. Реализация базы данных ПРОЦЕСС системы АВОГАДРО на вычислительных средствах РС с сохранением SQL-технологии // Материалы 9-й Всесоюзной конф. Химическая информатика. Черноголовка: 1992. С. 61–61.
5. Ковач Э. А., Лосев С. А., Сергиевская А. Л. Опыт создания автоматизированной системы научных исследований в области физико-химической газодинамики // Известия Академии Наук СССР. Металлы. 1993. № 4. С. 70–76.
6. Лосев С. А., Ковач Э. А., Сергиевская А. Л. Информационно-математическое моделирование исследований в области физико-математических наук // В сб.: Эволюционная информатика и моделирование. М.: Гос. ИФТП. 1994. С. 29–46.
7. Сергиевская А. Л., Ковач Э. А., Лосев С. А. Опыт информационно-математического моделирования в физико-химической кинетике. М.: Изд-во Моск. ун-та. 1995. 311 с.
8. Лосев С. А., Ковач Э. А., Сергиевская А. Л., Погосбекян М. Ю., Соколова И. А. Информационная система обеспечения исследований в физико-химической газовой динамике с интеллектуализацией обработки данных и моделей // Информационный бюллетень РФФИ. 1996. Т. 4. № 7. С. 53–53.
9. Колесниченко Е. Г., Лосев С. А., Сергиевская А. Л. Новые возможности получения и накопления научной информации в рамках научной информационной системы // Современные проблемы механики. Тезисы докл. конф., посвященной 40-летию Ин-та механики МГУ. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1999. С. 121.
10. Ковач Э. А., Сергиевская А. Л. Концептуальное проектирование проблемно-ориентированной научной информационной системы // Труды конференции «Новые информационные технологии в науке, образовании и бизнесе». Украина, Крым. 2000. С. 23–25.
11. Сергиевская А. Л., Колесниченко Е. Г., Лосев С. А. Опыт разработки научной информационной системы // Теплофизические свойства веществ. Труды 12-й Российской конференции по теплофизическим свойствам веществ. Москва: 2008. С. 160–165.
12. База данных по термодинамическим свойствам веществ. IVTANTERMO. <https://thermo.jiht.ru/ru/>
13. Иориш В. С., Белов Г. В. О качестве информации в базах данных по термодинамическим свойствам веществ // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2007. Т. 5. <http://chemphys.edu.ru/issues/2007-5/articles/53/>
14. NIST Chemical Kinetics Database Standard Reference Database 17, Version 7.1 (Web Version), Release 1.6.8.
15. Losev S. A., Sergievskaya A. L., Titova N., Starik A. Modeling of thermal nonequilibrium multicomponent kinetics in gas dynamics and combustion // 32nd AIAA Thermophysics Conference. AIAA Paper 1997-2532. 1997. <https://doi.org/10.2514/6.1997-2532>
16. Колесниченко Е. Г., Сергиевская А. Л., Лосев С. А., Шаталов О. П., Погосбекян М. Ю., Левашов В. Ю. и др. Проект создания открытой научной информационной системы по физико-химической газодинамике // Электронная конференция «Российские Интернет-ресурсы по химии, биологии и медицине; их развитие и применение в образовании, науке и малом наукоемком бизнесе», 2002 г.
17. Колесниченко Е. Г., Лосев С. А., Сергиевская А. Л., Варламов В. В., Чесноков В. В. Фактографические базы данных как компоненты научной информационной системы // Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции. Труды Всероссийской научной конференции «Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции». Из-во С.-Пб. Ун-та, 2003 г., С. 263–267.
18. Сергиевская А. Л. Информационно-математическое моделирование в естественно-научных исследованиях. Дисс. д.т.н. Москва, 1997. 245 с.

References

1. Losev S. A., Shatalov O. P., Development of an automated data bank in the field of physical and chemical gas dynamics, *Chemical Physics*, 1987, vol. 6, no. 12, pp. 1677–1695 [in Russian].
2. Sergievskaya A. L., SQL technology in physical-chemical databases, Abstracts of the report of the II All-Union Conference on Physical-Chemical and Technological Data Bases for Optimization of Metallurgical Technologies, Kurgan, 1991, pp. 16–17 [in Russian].
3. *Computer science in physical and chemical gas dynamics* (Ed. by S. A. Losev, O. P. Shatalov), Proceedings of the Institute of Mechanics of Moscow State University, 1992, 80 p. [in Russian].
4. Sergievskaya A. L., Implementation of the PROCESS database of the AVOGADRO system on PC computing facilities with the preservation of SQL technology, *Proceedings of the 9th All-Union Conf. Chemical Informatics*, Chernogolovka, 1992, pp. 61–61 [in Russian].
5. Kovach E. A., Losev S. A., Sergievskaya A. L., Experience in creating an automated system for scientific research in the field of physical and chemical gas dynamics, *Bulletin of the USSR Academy of Sciences. Metals*, 1993, no. 4, pp. 70–76 [in Russian].
6. Losev S. A., Kovach E. A., Sergievskaya A. L., Information and mathematical modeling of research in the field of physical and mathematical sciences, In the collection: *Evolutionary informatics and modeling*, Moscow: St. IFTP, 1994, pp. 29–46 [in Russian].
7. Sergievskaya A. L., Kovach E. A., Losev S. A., *Experience of information-mathematical modeling in physical and chemical kinetics*, M.: Moscow University Press, 1995, 311 p. [in Russian].
8. Losev S. A., Kovach E. A., Sergievskaya A. L., Pogosbekyan M. Yu., Sokolova I. A., Information system for supporting research in physical and chemical gas dynamics with intelligent data and model processing, *Information Bulletin of the Russian Foundation for Basic Research*, 1996, vol. 4, no. 7, pp. 53–53 [in Russian].
9. Kolesnichenko E. G., Losev S. A., Sergievskaya A. L., New possibilities of obtaining and accumulating scientific information within the framework of a scientific information system, *Modern problems of mechanics. Abstracts of the report of the conference dedicated to the 40th anniversary of the Institute of Mechanics of Moscow State University*, Moscow: Publishing house of Moscow University, 1999, P. 121 [in Russian].
10. Kovach E. A., Sergievskaya A. L., Conceptual design of a problem-oriented scientific information system, *Proceedings of the conference "New information technologies in science, education and business"*, Ukraine, Crimea, 2000, pp. 23–25 [in Russian].
11. Sergievskaya A. L., Kolesnichenko E. G., Losev S. A., Experience in developing a scientific information system, *Thermophysical properties of substances. Proceedings of the 12th Russian conference on thermophysical properties of substances*, Moscow, 2008, pp. 160–165 [in Russian].
12. *Database of thermodynamic properties of substances. IVTANTERMO* [in Russian].
<https://thermo.jiht.ru/ru/>
13. Iorish V. S., Belov G. V., On quality of information in thermodynamic databases, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2007, vol. 5 [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2007-5/articles/53/>
14. *NIST Chemical Kinetics Database Standard Reference Database 17, Version 7.1* (Web Version), Release 1.6.8 [in Russian].
15. Losev S. A., Sergievskaya A. L., Titova N., Starik A., Modeling of thermal nonequilibrium multicomponent kinetics in gas dynamics and combustion, 32nd AIAA Thermophysics Conference. AIAA Paper 1997-2532. 1997 [in Russian]. <https://doi.org/10.2514/6.1997-2532>
16. Kolesnichenko E. G., Sergievskaya A. L., Losev S. A., Shatalov O. P., Pogosbekyan M. Yu., Levashov V. Yu., et al., Project for the creation of an open scientific information system on physical and chemical gas dynamics, *Electronic conference "Russian Internet resources on chemistry, biology and medicine; their development and application in education, science and small science-intensive business"*, 2002 [in Russian].

17. Kolesnichenko E. G., Losev S. A., Sergievskaya A. L., Varlamov V. V., Chesnokov V. V., *Fact-graphic databases as components of a scientific information system*, Electronic libraries: advanced methods and technologies, electronic collections. Proceedings of the All-Russian scientific conference "Electronic libraries: advanced methods and technologies, electronic collections", Publishing house of St. Petersburg University, 2003, pp. 263–267 [in Russian].
18. Sergievskaya A. L., Information and mathematical modeling in natural science research, Diss. Doctor of Engineering Sciences, Moscow, 1997, 245 p. [in Russian].

Статья поступила в редакцию 30 мая 2025 г.