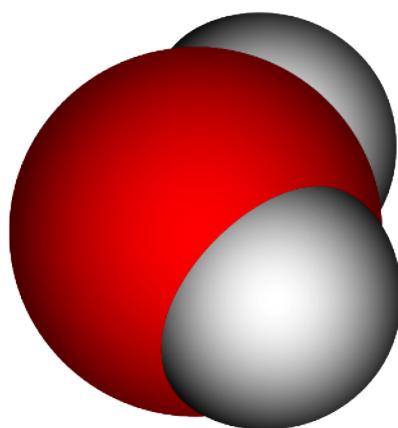


СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ

Версия 0.21.10 beta

Руководство пользователя



2021 г.



Оглавление

1. Общие сведения о программе.....	3
1.1. Назначение программы.....	3
1.2. Системные требования.....	3
1.3. Поддержка.....	3
2. Быстрый старт.....	4
3. Установка, обновление и удаление.....	5
3.1. Portable-версия.....	5
3.2. Версия с инсталлятором.....	5
3.2.1. Первоначальная установка.....	5
3.2.2. Переустановка и обновление.....	6
3.2.3. Удаление.....	6
4. Работа с программой.....	7
4.1. Первый запуск и настройка.....	7
4.2. Выбор вещества.....	8
4.3. Просмотр свойств.....	8
4.4. Расчёт свойств.....	11
5. Определения.....	14
5.1. Основные понятия.....	14
5.2. Основные термодинамические функции.....	14
5.3. Свойства веществ.....	15



1. Общие сведения о программе.

1.1. Назначение программы

Программа «Свойства веществ» содержит базу данных о физико-химических свойствах индивидуальных веществ и позволяет выполнить:

- просмотр свойств веществ (с указанием источника информации);
- расчёт свойств веществ при различных условиях;
- построение графиков свойств по экспериментальным и расчётным данным;
- запись всех данных о свойствах выбранного вещества в файл в формате RTF;
- запись результатов расчётов в файл в формате RTF.

1.2. Системные требования

Программа может работать под операционными системами Windows XP/Vista/7/8/10 32/64 бит.

Программа не требовательна к аппаратным ресурсам и может быть запущена на любом компьютере под любой из указанных выше операционных систем.

1.3. Поддержка

Последнюю версию программы можно скачать с домашней страницы: <https://alsersoft.ru/index.php?page=PropSubst>.

Сообщения об ошибках, отзывы и пожелания можно направлять на адрес support@alsersoft.ru.



2. Быстрый старт.

Для начала работы с программой необходимо её установить, используя инсталлятор, либо распаковать архив с portable-версией.

Установка программы с использованием инсталлятора возможна только от имени пользователя с правами администратора. Процесс установки довольно прост и стандартен, поэтому затруднений возникнуть не должно.

Приступать к работе с программой можно без какой-либо предварительной подготовки. Автор стремился создать максимально простой и интуитивно понятный интерфейс, чтобы пользователь не нуждался в подробном изучении руководства и тратил на различные операции в программе минимум времени. Чтобы пользователь мог работать привычным ему образом, любые действия в программе могут выполняться как с использованием мыши, так и с помощью клавиатуры. Программа имеет многочисленные настройки (**Меню: Настройки** → **Изменить** или **Ctrl+O**). Если программа установлена с помощью инсталлятора, то её настройки сохраняются отдельно для каждого пользователя (каждой учётной записи Windows) в реестре. При использовании portable-версии настройки хранятся в конфигурационном файле, общем для всех пользователей.

3. Установка, обновление и удаление.

3.1. Portable-версия.

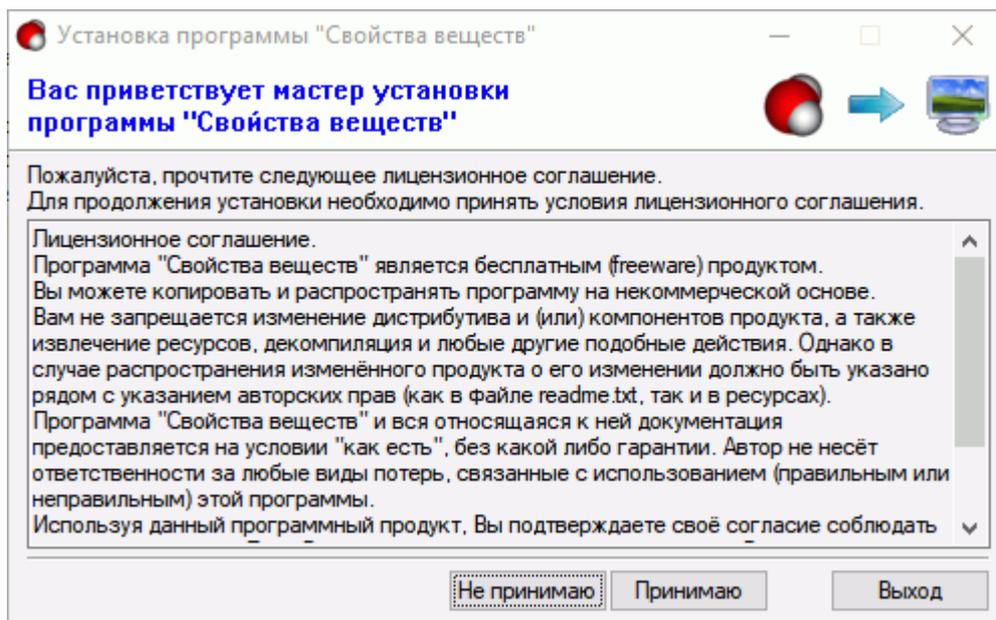
Для установки или обновления portable-версии достаточно распаковать архив в удобное для Вас место, для удаления – удалить файлы программы. Portable-версия не заносит какие-либо данные в реестр.

Если помимо программы «Свойства веществ» Вы используете программу «Расчёт молярных масс» (домашняя страница: <https://alsersoft.ru/index.php?page=MolMass>), то для исключения дублирования файла шрифта **Alser.fon** можно распаковать папки данных программ в одну общую папку, в неё поместить файл шрифта **Alser.fon**, а из папок программ файлы **Alser.fon** удалить. Например, создать папку «Alser», в неё распаковать папки программ («PropSubst» и «MolMass») и в неё же поместить файл **Alser.fon**. Если в архивах программ файлы **Alser.fon** имеют разные даты создания, следует помещать в общую папку более новый файл.

3.2. Версия с инсталлятором.

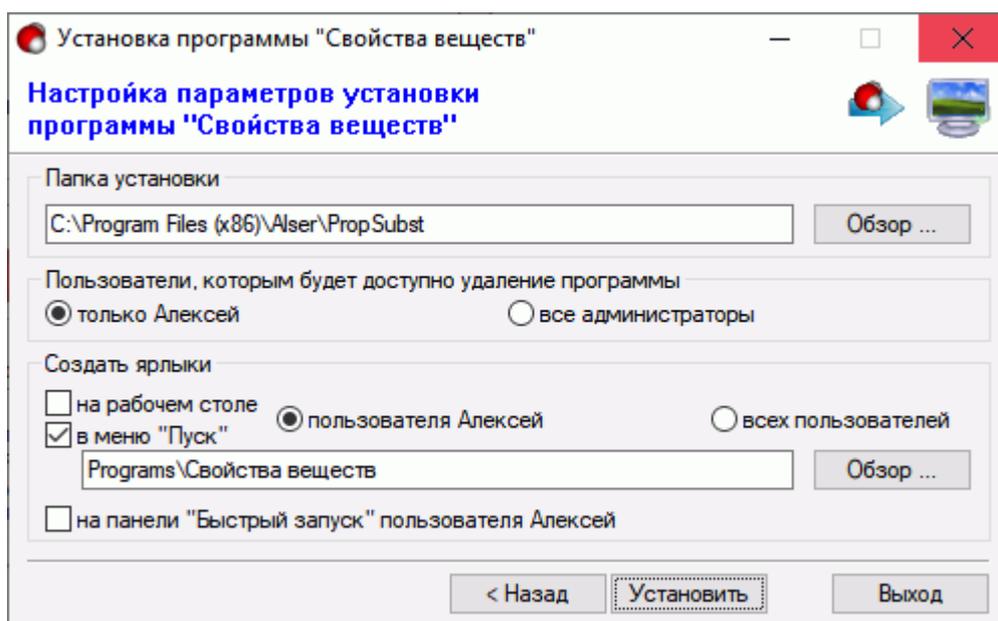
3.2.1. Первоначальная установка.

Для установки программы следует запустить инсталлятор от имени пользователя с правами администратора. Появится окно с лицензионным соглашением, которое необходимо принять для дальнейшей установки:





Далее будут показаны параметры установки, которые можно просмотреть и изменить:



После просмотра и настройки параметров установки следует нажать кнопку **Установить**. После завершения установки будет показано окно с ходом установки, предложением запустить программу и просмотреть файл **ReadMe.txt**:

3.2.2. Переустановка и обновление.

Для переустановки или обновления программы следует запустить инсталлятор от имени пользователя с правами администратора. Появится предупреждение о том, что программа уже установлена, с запросом выполнения переустановки (обновления).

После ответа **Да** появится окно с лицензионным соглашением, которое необходимо принять (см. раздел «Первоначальная установка»). Затем для информации будет показано окно с параметрами первоначальной установки.

После просмотра параметров установки и нажатия кнопки **Установить**, как и при первоначальной установке, будет показано окно с ходом установки, предложением запустить программу и просмотреть файл **ReadMe.txt**.

3.2.3. Удаление.

Для удаления программы следует запустить деинсталлятор от имени пользователя, которому разрешено удаление (при установке программы выбирается, будет ли доступно удаление только пользователю, установившему программу, или всем администраторам). Будет запрошено подтверждение удаления программы. После подтверждения будет задан вопрос, следует ли удалить настройки программы всех пользователей.

Примечание. Невозможно удалить из реестра настройки пользователей, не выполнивших вход в систему. Это является ограничением Windows, а не деинсталлятора.

В случае успешного удаления всех компонентов программы отобразится сообщение об успешном удалении. В случае возникновения ошибок при удалении (например, из-за отсутствия доступа к удаляемому файлу) отобразятся соответствующие сообщения.

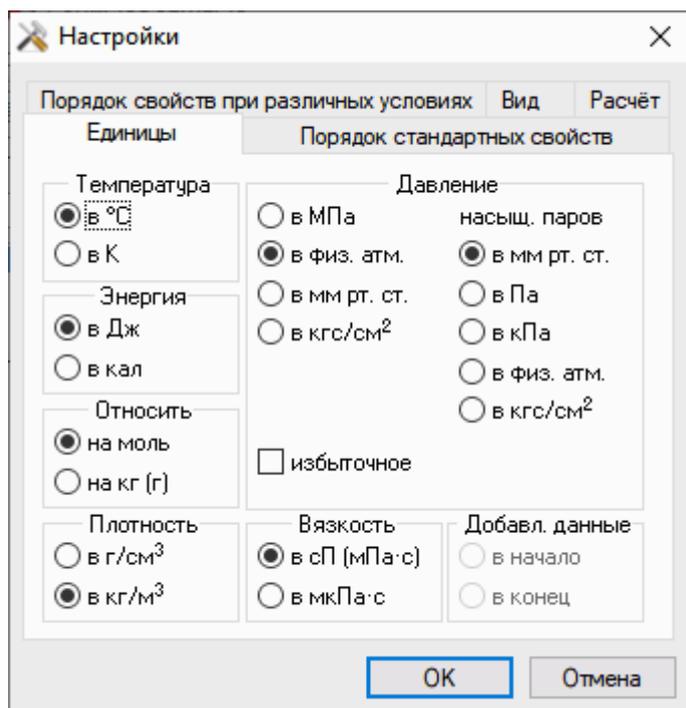


4. Работа с программой.

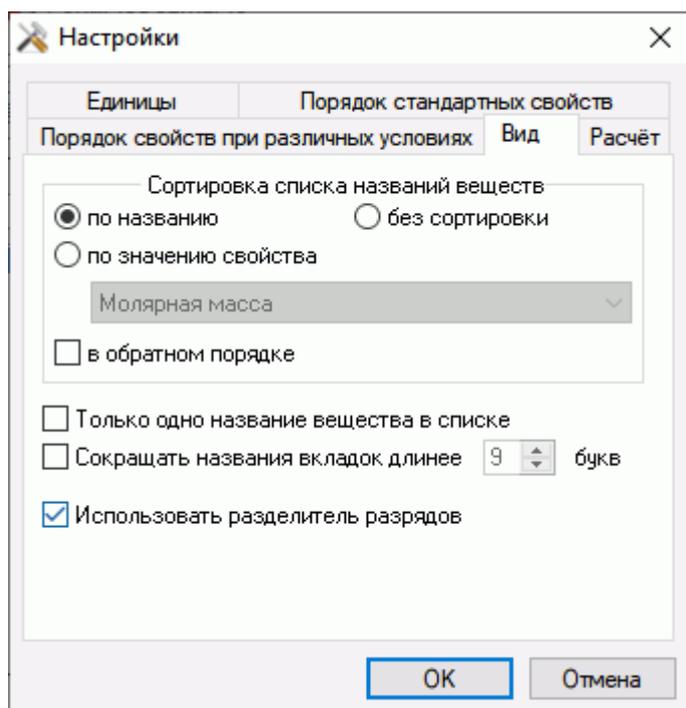
4.1. Первый запуск и настройка.

При первом запуске программы будут установлены настройки по умолчанию. Для удобства дальнейшей работы рекомендуется просмотреть и, при необходимости, изменить настройки. Вход в настройки программы осуществляется через меню (**Настройки** → **Изменить**), с помощью комбинации клавиш **Ctrl+O** или нажатием соответствующей кнопки на панели инструментов. Настройки сгруппированы на пяти вкладках: **Данные**, **Вид**, **Порядок стандартных свойств**, **Порядок свойств при различных условиях**, **Расчёт**.

На вкладке **Данные** настраиваются единицы измерения.

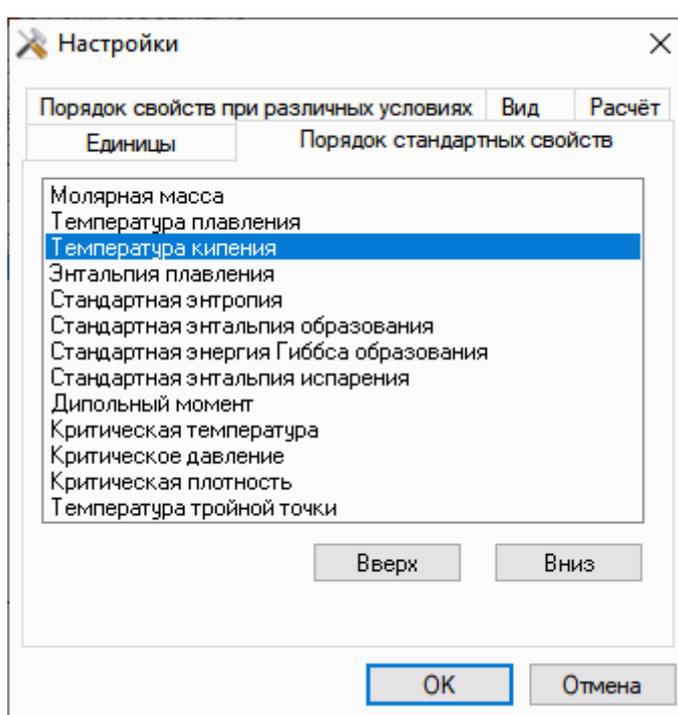


На вкладке **Вид** находятся общие настройки внешнего вида программы.

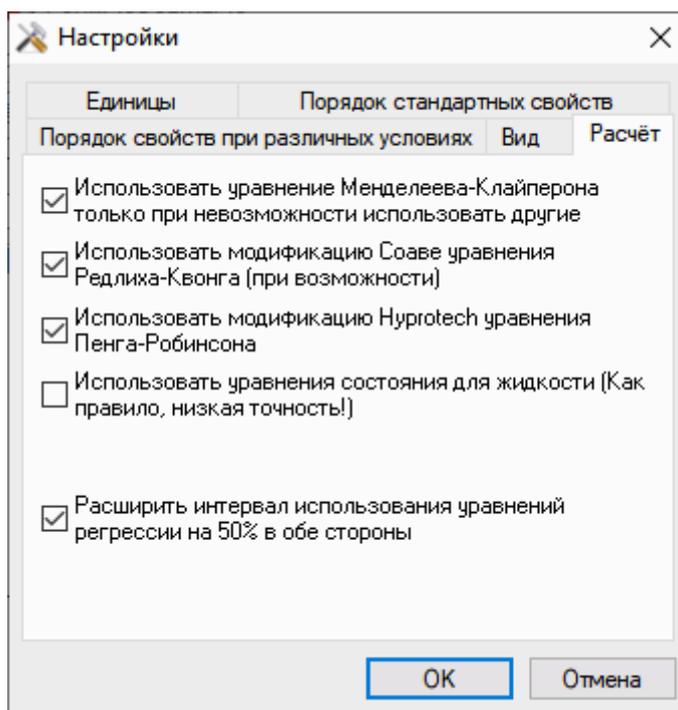




На вкладках **Порядок стандартных свойств** и **Порядок свойств при различных условиях** настраивается порядок отображения свойств.



На вкладке **Расчёт** находятся некоторые настройки расчёта свойств. Большая часть настроек производится непосредственно при расчёте (см. раздел **Расчёт свойств**).



4.2. Выбор вещества.

Вещество выбирается из списка, расположенного в левой части основного окна программы. При этом возможно воспользоваться поиском путём ввода названия (или начала названия) в окно поиска, расположенное над списком веществ. Следует учитывать, что в зависимости от настроек, в списке могут отображаться как все названия, так и только одно название для каждого вещества. Поиск осуществляется только по названиям, отображённым в списке.

4.3. Просмотр свойств.

Свойства веществ расположены в правой части главного окна программы на трёх

вкладках:

- **Стандартные;**
- **При различных условиях;**
- **Описание**, на данной вкладке отображается текстовое описание вещества.

На вкладке **Стандартные** отображаются свойства, не зависящие от условий, либо свойства при стандартных условиях (см. **Определения** → **Стандартное состояние**):

The screenshot shows a window titled "Свойства веществ" (Properties of substances) with a menu bar (Файл, Данные, Расчёт, Настройки, Справка) and a toolbar. The search bar contains "бензол" and the search results list includes "бензол" highlighted. The main panel shows the following data for benzene:

Другое название: бензен
Формула: C_6H_6

Стандартные | При различных условиях | Описание

Молярная масса: $78,1118 \pm 0,0053$ г/моль
Температура плавления: $5,533$ °C
Температура кипения: $80,103$ °C
Энтальпия плавления: $9,843$ кДж/моль
Стандартная энтропия: $269,2$ Дж/(моль·°C)
Стандартная энтальпия образования: $82,93$ кДж/моль
Стандартная энергия Гиббса образования: нет данных
Стандартная энтальпия испарения: $30,77$ кДж/моль
Дипольный момент: 0 Д
Критическая температура: $289,41$ °C
Критическое давление: $48,6$ атм.
Критическая плотность: 302 кг/м³, критический объём: 259 см³/моль
Температура тройной точки: нет данных
Критический коэффициент сжимаемости: $0,272$
Фактор ацентричности Пиггера: $0,208$

Химическая энциклопедия: В 5 т.: т. 1: А - Дарзана/Редкол.: Кнунянц И. Л. (гл. ред.) и др. - М.: Сов. энцикл., 1988. - 623 с.: ил.

Если в активной строке отображается значение свойства, не являющееся производным от других параметров, то в статусной строке отобразится источник данных, откуда взято данное значение. В иных случаях в статусной строке отображается количество веществ и названий в базе. Строка становится активной при наведении на неё курсора мыши.

База данных о свойствах веществ может содержать несколько значений каждого свойства из разных источников. Изначально на вкладке **Стандартные** отображается значение, находящееся в базе первым. Для просмотра всех значений с источниками необходимо выбрать строку щелчком левой кнопки мыши или нажатием клавиши **Ввод**. При этом отобразится таблица со всеми значениями и источниками. Для возврата необходимо нажать клавишу **Esc** или кнопку **Все свойства** под таблицей.

При выборе свойства, являющегося производным от других параметров, отобразится краткое информационное сообщение о способе определения данного значения.

В таблицах вложенных вкладок с названиями свойств вкладки **При различных условиях** отображаются свойства, условия (фазовое состояние, температура, давление) и источники.



Свойства веществ

Файл Данные Расчёт Настройки Справка

Поиск: Свойства вещества "бензол"

Другое название: бензен
 Формула: C₆H₆

Стандартные При различных условиях Описание

Энтальп... Давлени... Теплоём... Плотность Поверхн... Вязкость Показат... Ди...

Значение, кг/м ³	Фаза	Температура, °C	Давление, атм.	Источник
889,5	ж.	10	атмосферное	Рабинович В. А., Хавин С
879,0	ж.	20	атмосферное	Рабинович В. А., Хавин С
868,5	ж.	30	атмосферное	Рабинович В. А., Хавин С
889,6	ж.	10	атмосферное	Физико-химические свс
879,0	ж.	20	атмосферное	Физико-химические свс
873,7	ж.	25	атмосферное	Физико-химические свс
868,4	ж.	30	атмосферное	Физико-химические свс
857,6	ж.	40	атмосферное	Физико-химические свс

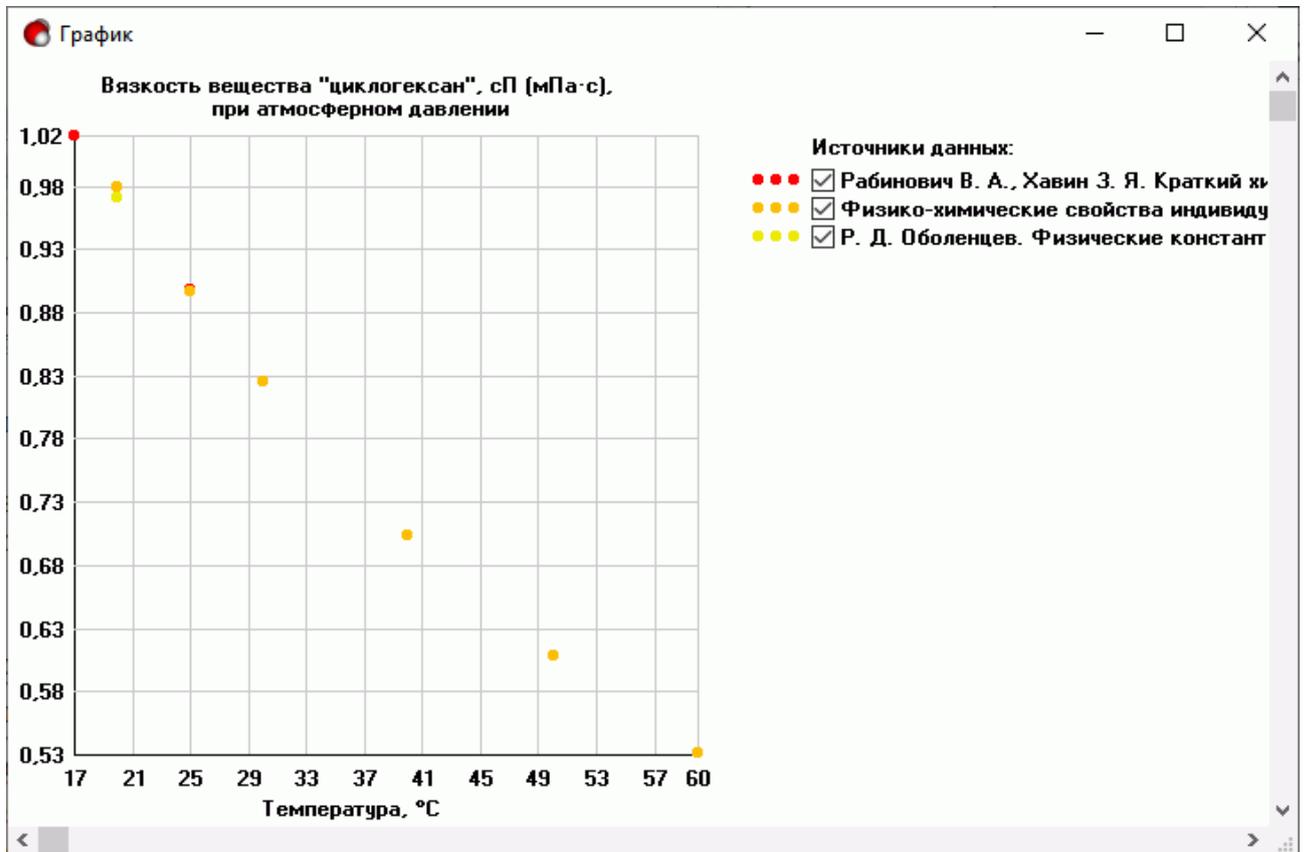
Рассчитать Добавить Удалить Вверх Вниз Изменить

База содержит 373 вещества, 453 названия

Все имеющиеся в базе свойства по выбранному веществу и их источники можно выгрузить в RTF-файл, выбрав соответствующий пункт в меню **Файл** или нажав на соответствующую кнопку панели инструментов.



Имеющиеся данные о свойствах при различных условиях можно расположить на графике. Данные при атмосферном давлении и давлении насыщенных паров располагаются на разных графиках. Построение графиков вызывается выбором соответствующих пунктов в меню **Файл** или нажатием на соответствующие кнопки панели инструментов.



4.4. Расчёт свойств.

В программе реализован расчёт свойств при различных условиях разными методами:

Свойство	Используемые для расчёта свойства уравнения
Энтальпия испарения	<ul style="list-style-type: none">• Питцера;• Ватсона;• Редлиха-Квонга (только в модификации Соаве);• Пенга-Робинсона.
Давление насыщенных паров	<ul style="list-style-type: none">• Различные эмпирические (Антуана и т. п.);• Ли-Кеслера;• Тека-Стила;• Редлиха-Квонга (только в модификации Соаве);• Пенга-Робинсона.
Теплоёмкость	<ul style="list-style-type: none">• Различные эмпирические (полиномы и т. п.);• регрессии (по имеющимся в базе данным). <p><i>Примечание: в программе приводятся значения изобарной теплоёмкости</i></p>
Плотность	<ul style="list-style-type: none">• Менделеева-Клайперона (состояния идеального газа);• Редлиха-Квонга (оригинальное и в модификации Соаве);• Пенга-Робинсона;• Ганна и Ямады;• Рекета в модификации Ганна и Ямады;



	<ul style="list-style-type: none"> • регрессии (по имеющимся в базе данным).
Поверхностное натяжение	<ul style="list-style-type: none"> • Соответственных состояний; • регрессии (по имеющимся в базе данным).
Вязкость	<ul style="list-style-type: none"> • Регрессии (по имеющимся в базе данным).
Показатель преломления	<ul style="list-style-type: none"> • Регрессии (по имеющимся в базе данным).
Диэлектрическая проницаемость	<ul style="list-style-type: none"> • Регрессии (по имеющимся в базе данным).
Температура кипения при заданном давлении	<ul style="list-style-type: none"> • Различные эмпирические (Антуана и т. п.); • Ли-Кеслера; • Тека-Стила; • Редлиха-Квонга (только в модификации Соаве); • Пенга-Робинсона.

Выполнить расчёт требуемого свойства можно несколькими способами.

1. Перейти на вкладку со свойством, которое нужно рассчитать, и нажать кнопку **Рассчитать**. Способ неприменим для расчёта температуры кипения при заданном давлении, т. к. вкладки с таким свойством нет, соответствующие данные находятся на вкладке **Давление насыщенных паров**.

2. Выбрать расчёт соответствующего свойства через меню.

3. Нажать соответствующую кнопку на панели инструментов.

Если данных о выбранном веществе в базе недостаточно для расчёта ни по одному из уравнений, кнопка **Рассчитать** и пункт в меню будут неактивны, а кнопка на панели инструментов отображаться не будет.

Далее в открывшемся окне необходимо задать параметры расчёта, после чего нажать кнопку **Рассчитать**. Результаты расчёта можно сохранить в RTF-файл, нажав кнопку **Сохранить**.



Расчёт свойства "плотность" вещества "циклогексан"

Температура, °C: = 25 от до с шагом

Давление, атм.: атмосферное насыщенных паров =
 от до с шагом

Фазовое состояние: автоопределение задать вручную тв. ж. г.

Округление результатов: автоматически до значащих цифр

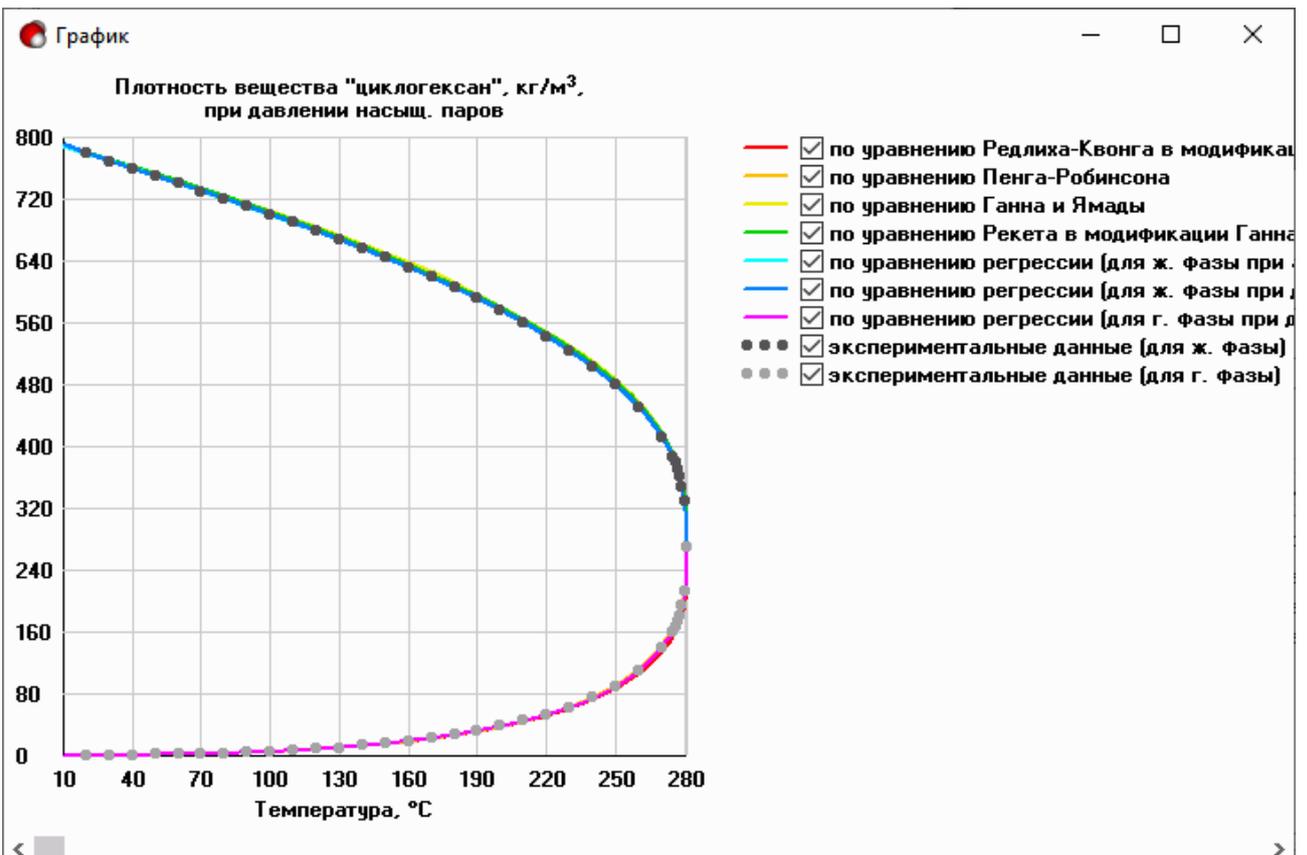
Результаты расчёта, кг/м³

Температура	Давление	Фаза	Значение 1	Значение 2	Значение 3	Значение 4	Значение 5	Значение 6	Значение
25	0,127759	ж.			775,0	775,1	773,7	774,2	
25	0,127759	г.	0,4423	0,4424					0,440

Значения получены:

- 1 - по уравнению Редлиха-Квонга в модификации Соаве
- 2 - по уравнению Пенга-Робинсона
- 3 - по уравнению Ганна и Ямады
- 4 - по уравнению Рекета в модификации Ганна и Ямады
- 5 - по уравнению регрессии (для ж. фазы при атм. давл. с пересчётом)
- 6 - по уравнению регрессии (для ж. фазы при давл. насыщ. паров)

В случае, если был задан расчёт значений в диапазоне температур или давлений, возможно построение графика. Для вывода графика необходимо нажать кнопку **График**.





Случаи ввода неполных или некорректных данных, при которых невозможно проведение расчёта (и, соответственно, построения графика), перечислены в таблице:

Причины невозможности расчёта	Действие программы
1. Заданы не все необходимые для расчёта условия.	Выдаётся сообщение о том, какое условие необходимо задать.
2. Введено значение параметра, не имеющее физического смысла (температура ниже абсолютного нуля, отрицательное или нулевое абсолютное давление).	Выдаётся сообщение о недопустимости значения параметра.
3. При расчёте свойства, характеризующего фазовое равновесие, введена температура выше критической.	Выдаётся сообщение о недопустимости значения температуры, значение исправляется на критическое.
4. Совпадают значения начала и конца диапазона изменения параметра.	Выдаётся сообщение о недопустимости совпадения значений.



5. Определения.

Определения даны кратко и рассчитаны людей, имеющих понятия о физической химии.

5.1. Основные понятия.

Изотермический процесс – процесс при постоянной температуре.

Кипение – процесс парообразования во всей толще жидкости (фазовый переход из жидкого состояния в газообразное).

Критическое состояние – состояние двухфазной системы, в котором сосуществующие в равновесии фазы становятся тождественными по всем своим свойствам. Критическое состояние является граничной (предельной) точкой двухфазного равновесия, за пределами которой система превращается в гомогенную. Критическое состояние существует для равновесия жидкость – пар всех чистых веществ (однако критическая точка может быть реально недостижима из-за термической нестабильности вещества).

Литр – кубический дециметр. Такое определение литра дано на двенадцатой Генеральной Конференции по мерам и весам в 1964 году, такое же определение существовало до 1901 года. С 1901 до 1964 года действовало определение третьей Генеральной Конференции по мерам и весам, согласно которому литр – это объём 1 кг воды при температуре наибольшей плотности (3,98 °С), составляющий примерно 1,000028 дм³.



Множество экспериментальных значений плотностей веществ определены в г/л именно в период с 1901 до 1964 года, т. е. когда литр по определению не был равен кубическому дециметру.

Моль – количество вещества, содержащее столько же структурных элементов, сколько содержится атомов в 12 граммах углерода ¹²С. Структурными элементами могут быть молекулы, атомы, ионы, элементарные и другие частицы, в том числе условные (например, эквиваленты). Число в структурных элементов в 1 моле (атомов в 12 граммах углерода ¹²С) называется **числом Авогадро** и равно $(6,02214129 \pm 0,00000027) \cdot 10^{23}$ моль⁻¹ [1].

Стандартное состояние – состояние, выбираемое в качестве точки отсчёта для оценки термодинамических величин. Необходимость выбора стандартного состояния обусловлена невозможностью определения абсолютных значений многих термодинамических величин. В термодинамике под стандартным состоянием вещества обычно понимают его состояние при атмосферном (101325 Па) давлении и температуре 25 °С (298,15 К), а значения термодинамических величин при данных условиях называют стандартными. При невозможности зафиксировать оба значения давление имеет приоритет (пример: стандартная энтальпия испарения – энтальпия испарения при стандартном давлении, при этом температура соответствует температуре кипения при стандартном давлении).



*В то же время ИЮПАК (международный союз теоретической и прикладной химии) не определяет значение температуры стандартного состояния, а в качестве давления стандартного состояния с 1982 г. рекомендует использовать 1 бар (100 кПа). Но тем не менее значения **стандартных термодинамических величин** – термодинамических величин веществ в стандартном состоянии – практически во всех источниках приводятся для атмосферного давления и температуры 25 °С, и именно эти условия принимаются за стандартные. Используется также понятие **нормальные условия** – атмосферное давление (101325 Па) и температура 0 °С (273,15 К).*

Тройная точка – точка, при которой в равновесии находятся три фазы вещества (твёрдая, жидкая и газообразная).

5.2. Основные термодинамические функции.

Внутренняя энергия – функция состояния термодинамической системы, представляющая собой совокупность всех видов энергии частиц в системе.

Энтальпия – функция состояния термодинамической системы, связанная с внутренней



энергией уравнением $H=U+PV$, где U – внутренняя энергия, P и V – соответственно давление и объём системы.

Энтропия – функция состояния термодинамической системы, определяемая уравнением $dS=\delta Q/T$, где dS – бесконечно малое изменение энтропии в обратимом элементарном *изотермическом процессе* (дифференциал энтропии), δQ – количество теплоты, полученное системой в этом процессе, T – температура, K .

Энергия Гиббса – функция состояния термодинамической системы, определяемая уравнением $G=H-TS$, где H – энтальпия, T – температура, K , S – энтропия.

5.3. Свойства веществ

Вязкость – свойство жидкостей и газов оказывать сопротивление перемещению одной их части относительно другой. **Динамическая вязкость** равна отношению касательного напряжения к скорости деформации. Отношение динамической вязкости к плотности называется **кинематической вязкостью**.

Давление насыщенных паров – давление паров, находящихся в равновесии с жидкостью или твёрдым телом. Давление насыщенных паров жидкости при данной температуре соответствует давлению, при котором жидкость кипит при данной температуре.

Дипольный момент – векторная величина, характеризующая асимметрию распределения положительных и отрицательных зарядов. Дипольный момент численно равен произведению расстояния между «центрами тяжести» положительных и отрицательных зарядов на их величину и направлен (условно) от отрицательного заряда к положительному (в химической литературе встречается условно принятое направление от положительного заряда к отрицательному).

Диэлектрическая проницаемость (относительная) – безразмерная величина, характеризующая свойства диэлектрической среды. Она показывает, во сколько раз взаимодействие между зарядами в среде меньше, чем в вакууме, численно равна отношению ёмкости конденсатора, между пластинами которого помещена среда, к ёмкости того же конденсатора в вакууме.

Коэффициент сжимаемости – отношение реального объёма к объёму идеального газа при тех же условиях.

Критические параметры – параметры, соответствующие *критическому состоянию*.

Молярная масса – масса одного моля вещества. Выраженная в г/моль, численно совпадает с массой молекулы вещества, выраженной в атомных единицах массы (а. е. м.).

Плотность – масса единицы объёма вещества.

Поверхностное натяжение – сила, отнесённая к единице длины контура, ограничивающего поверхность раздела фаз, действующая тангенциально поверхности и препятствующая её самопроизвольному увеличению. Поверхностное натяжение определяется также как работа, затрачиваемая на образование единицы площади поверхности раздела фаз.

Показатель преломления (коэффициент рефракции) – отношение скоростей света в граничащих средах. Для жидкостей и твёрдых тел показатель преломления обычно определяется относительно воздуха, для газов – относительно вакуума. Зависит от длины волны, обычно определяется для D-линии спектра натрия (589 нм). Для газов зависит от давления, обычно приводится к атмосферному.

Приведённый параметр – безразмерная величина, равная отношению значения параметра при данных условиях к критическому значению параметра.

Стандартные параметры – параметры, соответствующие *стандартному состоянию*.

Температура кипения – температура, при которой происходит кипение вещества, находящегося в жидком состоянии при постоянном давлении. Температура кипения равна температуре конденсации (обратного перехода).

Температура плавления – температура, при которой происходит фазовый переход вещества из твёрдого кристаллического состояния в жидкое, равна температуре кристаллизации (обратного перехода).



Температура тройной точки – температура, соответствующая *тройной точке*.

Теплоёмкость – отношение количества теплоты, переданное системе, к соответствующему изменению температуры. Изменение температуры будет зависеть от условий процесса. Различают **изобарную** (при постоянном давлении) и **изохорную** (при постоянном объёме) теплоёмкость.

Фактор ацентричности Питцера – безразмерный параметр, характеризующий сложность молекулы как в отношении геометрии, так и в отношении полярности, определяемый по уравнению: $\omega = -\lg P_{r, T_c=0,7} - 1$, где $P_{r, T_c=0,7}$ – *приведённое* давление насыщенных паров вещества при *приведённой* температуре, равной 0,7.

Энергия Гиббса образования – изменение энергии Гиббса при образовании единицы количества вещества из простых веществ.

Энтальпия испарения – изменение энтальпии системы в процессе (или количество теплоты, необходимое для) фазового перехода единицы количества вещества из жидкого состояния в газообразное.

Энтальпия образования – изменение энтальпии системы (или количество поглощённой системой теплоты) при образовании единицы количества вещества из простых веществ.

Энтальпия плавления – изменение энтальпии системы в процессе (или количество теплоты, необходимое для) фазового перехода единицы количества вещества из твёрдого кристаллического состояния в жидкое.