

УДК 004.65, 544.33

ЭЛЕКТРОННАЯ БАЗА ДАННЫХ ПО ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМ ЭНЕРГИЯМ ДИССОЦИАЦИИ СВЯЗЕЙ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

В. Е. Туманов¹ [0000-0003-0443-5346], А. И. Прохоров² [0000-0002-2009-4265]

¹ Ногинский филиал ГБПОУ МО «Московский областной медицинский колледж № 3», г. Ногинск

² Институт проблем химической физики Российской академии наук, г. Черноголовка

¹tve@icp.ac.ru, ²aipro@icp.ac.ru

Аннотация

Представленная веб-база данных по экспериментальным гомолитическим энергиям диссоциации связей в органических соединениях предназначена для использования широким кругом химиков теоретиков и практиков в свободном доступе. В работе приведены краткий обзор источников значений энергии диссоциации связей органических молекул, которые вычисляются теоретически, измеряются экспериментально и оцениваются по кинетическим и термодинамическим экспериментальным данным, и их представление в базе данных в интернете. Представлена веб база данных по гомолитическим энергиям диссоциации связей органических соединений. Приводимые значения энергий диссоциации связей вычислены по экспериментальным кинетическим и термодинамическим данным. Приведены описания источников экспериментальных данных, классов органических соединений и методов расчета. Приведена логическая структура базы данных и дано описание основных полей ее таблиц. Представлена главная поисковая форма интерфейса базы данных и приведен пример результата поиска для конкретного органического соединения. Энергии диссоциации связи снижены до температуры 298,15 К, которая обычно отсутствует в большинстве источников. Аналоги настоящей базы уступают последней в учете температурных корреляций. В настоящее время ведутся работы по анализу и анализу опубликованных данных с учетом энтропийных эффектов.

Ключевые слова: электронный справочник, органические соединения, энергия диссоциации связи, база данных, интернет.

ВВЕДЕНИЕ

Энергия диссоциации связи является одной из фундаментальных характеристик органической молекулы. Она играет важную роль в оценке реакционной способности молекулы в химических превращениях и может быть использована при разработке новых соединений. Значения энергии диссоциации связей органических молекул могут быть вычислены теоретически, измерены экспериментально и оценены по кинетическим и термодинамическим экспериментальным данным.

Экспериментальные данные по энергиям диссоциации связи собраны в справочниках [1, 2] и обзорах [3–5].

Вероятно, одно из первых упоминаний о реализации базы данных по экспериментальным значениям энергии диссоциации связей появилось в конце прошлого века Y.-R. Luo (*Molecular Structure & Bond Dissociation Energies*), позже ссылка <http://www.molenergetics.com/construc.htm> была удалена. Использование технологии хранилищ данных для таких электронных ресурсов было предложено в [6].

Использование интернет-технологий привело к созданию большого количества электронных ресурсов по термодинамике и термохимии, которые включают значения энергии диссоциации связей органических молекул [7]. Гомолитические энергии диссоциации связей небольших молекул собраны в наборе данных BDE-db [8]. Далее электронные ресурсы в интернет, представленные в виде таблиц не рассматриваются.

Остановимся на веб базах данных, содержащих значения энергии диссоциации связей органических соединений.

Веб база данных iBonD (Китай) содержит экспериментальные и теоретические значения энергий диссоциации гомолитических и гетеролитических связей [9]. Содержит сведения о более чем 7500 соединений, что соответствует [1].

База данных ИВТАНТЕРМО (Россия) в веб редакции «Термические константы веществ» представлена небольшим числом экспериментальных значений [10].

BDE Estimator (США, Великобритания) – веб-ресурс для вычисления энергий диссоциации связей химических соединений с использованием квантово-химических методов и машинного обучения [11, 12]. Позволяет теоретически оценить энергию диссоциацию связей, возможно, в более чем 200000 соединений.

Несмотря на широкое представление термодимических данных в электронных ресурсах интернета, веб-баз данных, ориентированных непосредственно на энергии диссоциации связей органических соединений, явно недостаточно, что делает разработку и публикацию таких баз данных актуальной научно-практической задачей.

Целью настоящей работы является представление электронной справочной базы данных по экспериментальным гомолитическим энергиям диссоциации связей органических соединений. Значения энергии диссоциации связей вычислены по экспериментальным термодимическим и кинетическим данным радикальных реакций в жидкой и газовой фазах.

1. ИСТОЧНИКИ ДАННЫХ, КЛАССЫ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ И МЕТОДЫ РАСЧЕТА

Источниками экспериментальных данных являются научные публикации по кинетике реакций радикального отрыва в жидкой и газовой фазах, термического радикального распада и констант равновесия бимолекулярных радикальных реакций. Отобран небольшой набор экспериментальных термодимических данных в качестве реперных, который представлен в Табл. 1 (фрагмент).

Таблица 1. Значения энергии диссоциации связей реперных соединений.

Соединение	Связь	Энергия диссоциации связи, кДж/моль
CH ₄	C-H	440.0±1.1 [13]
RCH ₃	C-H	422.0±2.1 [13]
Me ₃ CH	C-H	400±2.9 [13]
PhH	C-H	474.0±4.0 [13]
PhC•H ₃	C-H	375±4.0 [13]
Вторичные алкилпероксиды	O-H	365.5 [14]
Третичные алкилпероксиды	O-H	358.6 [15]
....		

В базе данных представлены значения энергий диссоциации C-H, O-H, N-H, O-O, C-O, S-H, C-S, S-S, C-I, C-Cl, C-Br, C-F связи органических соединений. Основным методом расчета является метод пересекающихся парабол [16], а также законы Гесса и Кирхгофа [17].

Экспериментальные значения энергий диссоциации связей органических соединений отбирались по следующим методам их определения [18].

Химическое равновесие со стабильным радикалом (СНЕ): использование связи между константой равновесия и энергией Гиббса с учетом зависимости энтальпии реакции от температуры.

Кинетический метод пересекающихся парабол (МІР). Этот метод использует регрессионное соотношение между классическим потенциальным барьером радикальной реакции и классической энтальпией реакции. Данное соотношение при использовании опорной реакции (для которой все параметры известны) в реакционной серии позволяет во многих случаях вычислить энергию диссоциации связей по кинетическим данным исследуемой реакции. Для различных классов реакций были вычислены теоретические ошибки данного метода.

Энергии диссоциации связей вычислялись при той температуре, которая была в эксперименте, после чего значение приводилось к температуре 298,15 К. Важно отметить, что если энтропийный эффект для некоторых классов органических соединений является незначительным [5], то, например, для тиофенолов он имеет существенное значение даже в небольшом интервале температур.

Метод: кислотность-окислительный потенциал (АОР): использование термодинамического цикла.

Метод фотоакустической калориметрии (РАС): термодинамический метод определения энергий диссоциации связей в растворе.

2. СТРУКТУРА БАЗЫ ДАННЫХ

Таблицы базы данных содержат информацию об идентификации молекулы, значения энергии диссоциации связей в молекуле, экспериментальные или полученные после обработки экспериментальных кинетических данных, литературный источник для каждой связи, метод измерения или оценки, классификатор

органических соединений, а также техническую информацию. Логическая структура базы данных (без таблиц технической информации) приведена на Рис. 1. Описание полей таблиц дано в Таблице 2.

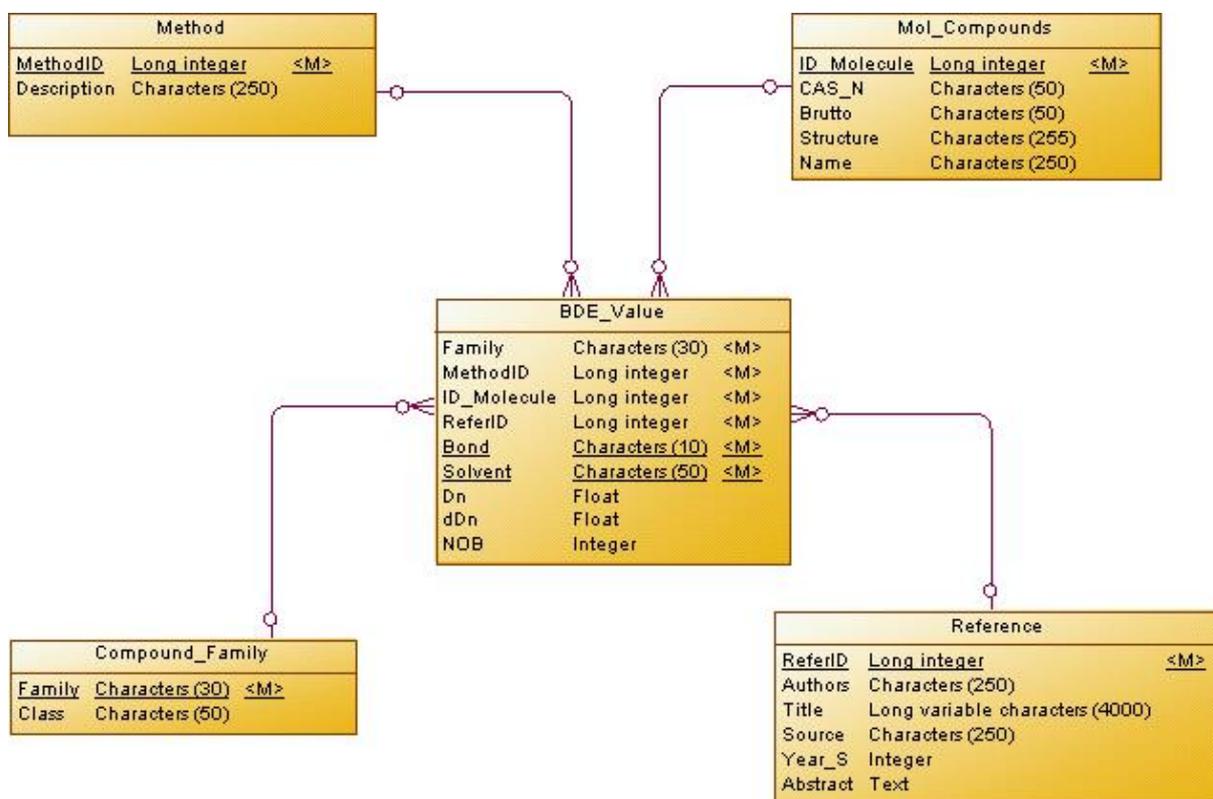


Рис. 1. Логическая структура веб базы данных по энергиям диссоциации органических соединений.

Таблицы технической информации содержат наборы данных, необходимые для пересчета значений энергий диссоциации связей в случаях обоснованного изменения (уточнения) этих значений для опорных соединений. Например, для тиофенола долгое время рекомендуемым значением энергии диссоциации S-H связи считалось значение, равное 330 кДж/моль, в настоящее время это значение равно 349,0 кДж/моль [1].

Таблица 2. Поля таблиц базы данных по энергиям диссоциации связей органических молекул.

Поле	Описание поля
Измерение <i>Mol_Compounds</i> – содержит перечень реагентов молекул	
ID_Molecule	Идентификатор молекулы
CAS_N	Регистрационный номер молекулы
Brutto	Атомарная формула молекулы
Structure	Полулинейная структурная формула
Name	Наименование молекулы
Измерение <i>Compound_Family</i> – содержит классификацию органических молекул	
Family	Класс молекул
SubFamily	Подкласс молекул
Измерение <i>Method</i> – содержит описание методов определения энергии диссоциации связи	
MethodID	Идентификатор метода измерения или оценки
Description	Описание метода
Таблица фактов <i>BDE_value</i> содержит данные о энергии диссоциации связи	
ID_Molecule	Идентификатор молекулы
Bond	Тип связи
Fragment	Фрагмент молекулы
ReferID	Идентификатор первоисточника
MethodID	Идентификатор метода измерения или оценки
Dn	Значение энергии диссоциации связи
dDn	Величина погрешности
NOB	Число связей данного типа в молекуле

Каждая молекула отнесена к определенному классу органических соединений, а для некоторых классов и определенному подклассу. Так, для углеводов определены подклассы n-Alkanes, t-Alkanes, q-Alkanes и Cycloalkanes. Классификация органических соединений, принятая в базе данных, близка к классификации, используемой в [1, 19].

3. ИНТЕРФЕЙС БАЗЫ ДАННЫХ

На Рис. 2 показана главная электронная форма для организации поиска в базе данных. Она состоит из двух окон: первое представляет поисковое дерево для выбора органической молекулы, второе – поисковое окно по полям, идентифицирующим молекулу. На Рис. 3 показан результат поиска с выбором по дереву соединений.

INSTITUTE OF PROBLEMS OF
CHEMICAL PHYSICS
SCIENCE INTELLIGENCE SYSTEM IN PHYSICAL CHEMISTRY OF RADICAL REACTIONS

Tree of compounds by type

- CHN Compounds
- CHNO Compounds
- CHNS Compounds
- CHO Compounds
- CHOP Compounds
- CHP Compounds
- CHS Compounds
- CHSi Compounds
- Elementorganics
- Halogens
- Hydrocarbons
- Molecules_2
- Small Molecules

Database "Bond Dissociation Energies of organic compounds"

[Main page](#) | [Back](#)

– Quick Search Form –

CAS Registry Number:

Bond Type(C-H, O-H,...):

Atomic Formula:

with Fragment:

[Search Information](#)

Рис. 2. Главная электронная форма базы данных по энергиям диссоциации связей органических молекул.



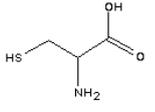
CHS Compounds

- Chlorosulfoacids
- CycloCHS
- Disulfides
- Sulfides
- Sulfites
- Sulfoacids
- Sulfone acids
- Sulfones
- Sulfoxides
- Thiols
 - C1H4S1
 - C1H2S1
 - C2H6S1
 - H2S1
 - C2H4O1S2
 - H2S2
 - C3H8S1
 - C3H8S1
 - C3H7N1O2S1
 - C3H7N1O2S1
 - C4H10S1
 - C4H10S1
 - C4H10S1
 - C4H10S1
 - C5H11N1O2S1
 - C5H12S1
 - C6H6S1
 - C6H12S1
 - C6H5Cl1S1
 - C6H5Cl1S1
 - C7H8S1

Database "Bond Dissociation Energies of organic compounds"

[Main page](#) | [Search](#) | [Back](#)

Molecule:

	Name:	L-Cysteine; Propanoic acid, 2-amino-3-mercapto-, (R)-; beta-Mercaptoalanine;
	Formula:	C ₃ H ₇ N ₁ O ₂ S ₁
	CAS Registry Number:	52-90-4

Bond dissociation energy:

Semistructural Formula	Bond	Value, kJ/mol	Error, kJ/mol	Reference	Method
H-SCH ₂ CH(NH ₂)C(O)OH	S-H	360	0	2005Den/Tum	

References:

2005Den/Tum) **Denisov E.T., Tumanov V.E.** Estimation of the bond dissociation energies of kinetic characteristics of liquid-phase radical reactions, [Russian Chemical Reviews, 2005, 74\(9\) 825-858](#)

Рис. 3. Результат поиска энергии диссоциации S-H-связи в конкретном соединении.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленная веб база данных по экспериментальным энергиям диссоциации связей в органических соединениях предназначена для использования широким кругом химиков теоретиков и практиков в свободном доступе. Основная часть данных получена из экспериментальных кинетических данных. Аналоги настоящей базы данных уступают последней в учете температурных корреляций.

Значения энергий диссоциации связей приведены к температуре 298,15 К, что, как правило отсутствует в большинстве источников.

В настоящее время проводится работа по анализу и экспертизе публикуемых данных с учетом энтропийных эффектов.

Планируется дополнить базу данных информацией о теплоемкости соединений, а также функционалом для расчета значений энергии диссоциации связей на заданную температуру в определенном интервале температур.

Основная часть работы выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты 15-07-08645-а и 09-07-00297-а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Yu-Ran L. Comprehensive Handbook of Chemical Bond Energies. Boca Raton: CRC Press, 2007. 1655 p. <https://doi.org/10.1201/9781420007282>
2. Гурвич Л.В., Караченцев Г.В., Кондратьев В.Н., Лебедев Ю.А., Медведев В.А., Потапов В.К., Ходеев Ю.С. Энергии разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. М.: Наука, 1974. 351 с.
3. Денисов Е.Т., Туманов В.Е. Оценка энергий диссоциации связей по кинетическим характеристикам радикальных жидкофазных реакций // Успехи химии. 2005. Т. 74. № 9. С. 905–938.
<http://dx.doi.org/10.1070/RC2005v074n09ABEH001177>
4. McMillen J.F., Golden D.M. Hydrocarbon Bond Dissociation Energies // Ann. Rev. Chem. 1982. V. 33. P. 493–532.
<https://doi.org/10.1146/annurev.pc.33.100182.002425>
5. Blanksby S., Ellison G. Bond dissociation energies of organic molecules // Accounts of chemical research. 2003. V. 36. No. 4. P. 255–263.
<https://doi.org/10.1021/ar020230d>
6. Туманов В.Е., Денисов Е.Т. База данных по энергиям диссоциации связей углеводородов и их производных // Нефтехимия. 2003. Т. 43. № 1. С. 65–67.
7. Thermochemical databases for pure substances and solutions including alloys, oxides, sulfides, ceramics, aqueous, nuclear and inorganic systems. URL: https://www.crct.polymtl.ca/thermo_databases.html other
8. John P.S., Guan Y., Kim Y., Kim S., Paton R.S. BDE-db: A collection of 290,664 Homolytic Bond Dissociation Enthalpies for Small Organic Molecules. figshare. 2019. Dataset. <https://doi.org/10.6084/m9.figshare.10248932.v1>
9. iBonD 2.0. URL: <http://ibond.nankai.edu.cn/>

10. *Иориш В.С., Юнгман В.С.* База данных «Термические константы веществ» [Электронный ресурс].

URL: <http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html/welcome.html>

11. *John P.C., Guan Y., Kim Y., Kim S., Paton R.S.* Prediction of organic homolytic bond dissociation enthalpies at near chemical accuracy with sub-second computational cost // *Nat. Commun.* 2020. V. 11. P. 2328.

<https://doi.org/10.1038/s41467-020-16201-z>

12. *John P.C., Guan Y., Kim Y., Etz B.D., Kim S., Paton R.S.* Quantum chemical calculations for over 200,000 organic radical species and 40,000 associated closed-shell molecules // *Sci Data* 2020. Data 7, 244. <https://doi.org/10.1038/s41597-020-00588-x>

13. *Tsang W.* Heats of Formation of Organic Free Radicals by Kinetic Methods. // In: *Martinho Simões J.A., Greenberg A., Liebman J.F. (eds) Energetics of Organic Free Radicals. Structure Energetics and Reactivity in Chemistry Series (SEARCH series).* 1996. V. 4. Springer, Dordrecht. https://doi.org/10.1007/978-94-009-0099-8_2

14. *Денисов Е.Т.* Оценка энергии диссоциации O–H-связи фенолов на основании кинетических измерений // *Журнал физической химии.* 1995. Т. 69. № 4. С. 623–631.

15. *Денисов Е.Т., Денисова Т.Г.* Кинетические параметры реакций $RO_2^{\bullet} + RH$ в рамках параболической модели переходного состояния // *Кинетика и катализ.* 1993. Т. 34. № 2. С. 199–206.

16. *Денисов Е.Т.* Новые эмпирические модели реакций радикального отрыва // *Успехи химии.* 1997. Т. 66. № 10. С. 953–971.

<http://dx.doi.org/10.1070/RC1997v066n10ABEH000364>

17. *Benson S.W.* Thermochemical Kinetics, 2nd ed.; Wiley-Interscience: New York, 1976.

18. *Денисов Е.Т., Денисова Т.Г.* Энергии диссоциации N–H-связей в ароматических аминах (обзор) // *Нефтехимия.* 2015. Т. 22. № 2. С. 91–109.

<https://doi.org/10.7868/S0028242115020070>

19. *Domalski E.S., Hearing E.D.* Estimation of Thermodynamic Properties of Organic Compounds in the Gas, Liquid, and Solid Phases at 298.15 K // In: *Jochum C., Hicks M.G., Sunkel J. (eds) Physical Property Prediction in Organic Chemistry.* Springer, Berlin, Heidelberg. 1988. https://doi.org/10.1007/978-3-642-74140-1_10

ELECTRONIC DATABASE ON EXPERIMENTAL BOND DISSOCIATION ENERGIES OF ORGANIC COMPOUNDS

V. E. Tumanov¹ [0000-0003-0443-5346], A. I. Prokhorov² [0000-0002-2009-4265]

¹ Noginsky branch of GBPOU MO "Moscow Regional Medical College № 3", Noginsk

² Institute of Problems of Chemical Physics of RAS, Chernogolovka

¹tve@icp.ac.ru, ²aipro@icp.ac.ru

Abstract

The presented web database on experimental homolytic bond dissociation energies in organic compounds is intended for use by a wide range of theoreticians and practitioners in free access. The paper provides a brief overview of the sources of the dissociation energies of bonds of organic molecules, which are calculated theoretically, measured experimentally and estimated from kinetic and thermochemical experimental data, their presentation in the Internet database. A web database on homolytic bond dissociation energies of organic compounds is presented. The reported bond dissociation energies are calculated from experimental kinetic and thermochemical data. Descriptions of experimental data sources, classes of organic compounds and calculation methods are given. The logical structure of the database and the description of the main fields of its tables are given. The main search form of the database interface is presented and an example of a search result for a specific organic compound is given. Bond dissociation energies are calculated at a temperature of 298.15 K, which is usually absent in most sources. The analogs of the present base are inferior to the latter in taking into account temperature correlations. Currently, work is underway to analyze and analyze the published data taking into account the entropy effects.

Keywords: *electronic directory, organic compounds, bond dissociation energy, database, internet.*

REFERENCES

1. Yu-Ran L. Comprehensive Handbook of Chemical Bond Energies. Boca Raton: CRC Press, 2007. 1655 p. <https://doi.org/10.1201/9781420007282>
2. Gurvich L.V. Energii razryva himicheskikh svyazey. Potencialy ionizatsii i sredstvo k elektronu / L.V. Gurvich, G.V. Karachencev, V.N. Kondrat'ev, Yu.A. Lebedev, V.A. Medvedev, V.K. Potapov, Yu.S. Hodeev. M.: Nauka, 1974. 351 s.
3. Denisov E.T., Tumanov V.E. Estimation of the bond dissociation energies from the kinetic characteristics of liquid-phase radical reactions // Russian Chemical Reviews. 2005. V. 74. No. 9. P. 825–858.
<http://dx.doi.org/10.1070/RC2005v074n09ABEH001177>
4. McMillen J.F., Golden D.M. Hydrocarbon Bond Dissociation Energies // Ann. Rev. Chem. 1982. V. 33. P. 493–532.
<https://doi.org/10.1146/annurev.pc.33.100182.002425>
5. Blanksby S., Ellison G. Bond dissociation energies of organic molecules // Accounts of chemical research. 2003. V. 36. No. 4. P. 255–263.
<https://doi.org/10.1021/ar020230d>
6. Tumanov V.E., Denisov E.T. A bond energy database for hydrocarbons and related compounds // Petroleum chemistry. 2003. V. 43. No. 1. P. 62–64.
7. Thermochemical databases for pure substances and solutions including alloys, oxides, sulfides, ceramics, aqueous, nuclear and inorganic systems.
URL: https://www.crct.polymtl.ca/thermo_databases.html other
8. John P.S., Guan Y., Kim Y., Kim S., Paton R.S. BDE-db: A collection of 290,664 Homolytic Bond Dissociation Enthalpies for Small Organic Molecules. figshare. 2019. Dataset. <https://doi.org/10.6084/m9.figshare.10248932.v1>
9. iBonD 2.0. URL: <http://ibond.nankai.edu.cn/>
10. Iorish V.S., Ungman V.S. Baza dannyh "Termicheskie konstanty veshchestv".
URL: <http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html/welcome.html>
11. John P.C., Guan Y., Kim Y., Kim S., Paton R.S. Prediction of organic homolytic bond dissociation enthalpies at near chemical accuracy with sub-second computational cost // Nat. Commun. 2020. V. 11. P. 2328.
<https://doi.org/10.1038/s41467-020-16201-z>

12. John P.C., Guan Y., Kim Y., Etz B.D., Kim S., Paton R.S. Quantum chemical calculations for over 200,000 organic radical species and 40,000 associated closed-shell molecules // *Sci Data* 2020. Data 7, 244. <https://doi.org/10.1038/s41597-020-00588-x>

13. Tsang W. Heats of Formation of Organic Free Radicals by Kinetic Methods. // In: Martinho Simões J.A., Greenberg A., Liebman J.F. (eds). *Energetics of Organic Free Radicals. Structure Energetics and Reactivity in Chemistry Series (SEARCH series)*. 1996. V. 4. Springer, Dordrecht. https://doi.org/10.1007/978-94-009-0099-8_2

14. Denisov E.T. Evaluation of the dissociation energies of the O-H-bond in phenols on the basis of kinetic measurements // *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 1995. V. 69. P. 563–571.

15. Denisov E.T., Denisova T.G. Kinetic parameters of the reactions $RO_2^{\bullet} + RH$ in the framework of the parabolic model of transition state // *Kinetics and Catalysis*. 1993. V. 34. P. 173–179.

16. Denisov E.T. New empirical models of radical abstraction reactions // *Russ. Chem. Rev.* 1997. V. 66. No. 10. P. 859–876.
<http://dx.doi.org/10.1070/RC1997v066n10ABEH000364>

17. Benson S.W. *Thermochemical Kinetics*, 2nd ed.; Wiley-Interscience: New York, 1976.

18. Denisov E.T., Denisova T.G. Dissociation Energies of N—H Bonds in Aromatic Amines // *Petroleum Chemistry*. 2015. V. 55. No. 2. P. 85–103.
<https://doi.org/10.1134/S0965544115020073>

19. Domalski E.S., Hearing E.D. Estimation of Thermodynamic Properties of Organic Compounds in the Gas, Liquid, and Solid Phases at 298.15 K // In: Jochum C., Hicks M.G., Sunkel J. (eds). *Physical Property Prediction in Organic Chemistry*. Springer, Berlin, Heidelberg. 1988. https://doi.org/10.1007/978-3-642-74140-1_10

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



ТУМАНОВ Владимир Евгеньевич – преподаватель естественно-научных дисциплин Ногинского филиала ГБПОУ МО «Московский областной медицинский колледж № 3», г. Ногинск, учитель физики ЧОУ «Православная классическая гимназия им. Константина Богородского», к. х. н. Сфера научных интересов – научные базы данных, хемометрика, термохимия, математическое моделирование.

Vladimir Evgen'evich TUMANOV – lecturer of natural sciences at the Noginsk branch of the Moscow Regional Medical College No. 3, Noginsk; Physics teacher, ChOU «Orthodox Classical Gymnasium. Konstantin Bogorodsky», Candidate Chem. Sci. Research interests include scientific databases, chemometrics, thermochemistry, mathematical modeling.

email: tve@icp.ac.ru,

ORCID: 0000-0003-0443-5346



ПРОХОРОВ Андрей Иванович – зам. начальника административно-организационного отдела Института проблем химической физики РАН. Сфера научных интересов – научные базы данных, хемометрика, термохимия, математическое моделирование.

Andrey Ivanovich PROKHOROV – Deputy Head of the Administrative and Organizational Department of the Institute of Problems of Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences. Research interests include scientific databases, chemometrics, thermochemistry, mathematical modeling.

email: aipro@icp.ac.ru,

ORCID: 0000-0002-2009-4265

Материал поступил в редакцию 12 октября 2021 года