

VIII группа



$C_5H_5FeC_5H_5$

5

X. 1970. 10

1969
10 Б887. Внутреннее вращение и энтропия ферроцена на основании третьего закона термодинамики. H a a - l a n d A r n e. Internal rotation and third law entropy of ferrocene. «Acta chem. scand.», 1969, 23, № 5, 1836—1837 (англ.)

Из данных по колебательному спектру ферроцена с учетом барьера внутреннего вращения 900 кал/моль получено значение энтропии 86,38 э. е., что хорошо согласуется с величиной 87,78 э. е., полученной на основании 3-го закона термодинамики. Однако, учитывая ошибки, вносимые в расчет тем, что не учитывалась ангармоничность и использовались спектры кристаллов, а также неточностью в определении величины барьера внутреннего вращения, автор приходит к выводу, что удовлетворительное согласие величин энтропии, полученных спектроскопически и термодинамически, может быть достигнуто как с учетом, так и без учета величины барьера внутреннего вращения.

Б. Локшин