

HCN, HNC
ZCN

HCN, CN^- (р-р H_2O)

1974

($\Delta_f H^\circ$)

1243-IV-ТХВ

Александрова С.А.

Стандартная энтальпия образования цианис-
товодородной кислоты HCN и иона CN^-
в водном растворе: 5 с.

$\text{HCN}(\text{p-p}, \text{H}_2\text{O})$
(ΔG, S)

1971

1243-IV-ТХВ

Александрова С.А.

Изобарный потенциал образования и энтропия цианистоводородной кислоты HCN в водном растворе, 3 с.

НСN (к, ж) ($T_m, T_b,$
 $\Delta H_v, \Delta S_v$)

1971

Мишин Г.

1243-IVTKB

Температура плавления и кипения,
энтальпия и энтропия испарения
тяжелого водорода и дейтерированного
тяжелого водорода, и др.

HCN (ж, ж) (C, ΔHm,
ΔHv, S, P)

1971

1243-IV ТКВ

Гюкарев Б.С.

Теплоемкость, теплота плавления,
теплота испарения, энтропия,
давление паров HCN, Б.С.

НСW (2) (ΔHf)

1971

1243-IVTKB

Шалакин О.Г.

Энтальпия образования цианистого
водорода, 7с.

ННС (г.) (термод. гр.)

1971

1247-IVTKB

Юнман В.С.

Термодинамические функции
ННС(г), д.с.

7431

I864

Bussey and Buignet
1. Ann. chim. phys. 3, 231 (1864)

HCN; p-p, ΔH_f°

CNH

Circ. 500

B

g

7277

1878

HCN m.
NH CN kp.
HCNO
CNI kp.
CN⁻
CNCl v.

}
}
}
}
}

Hf^o

Berthelot

25 .Ann.chim.phys. 5, 433 (1875)

M, W

CNH

Бертело ВР-7296-11 1881

Berthelot M,

Ann. chim. phys, 1881, 23, 252

МСН
(гас)

Теплота
обращения

22

Теплота сгорания МСН

$\Delta H_{298} = -159300$
кал/моль

HCN
(703)

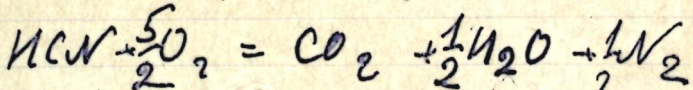
Thomson (Tomson)

1882-
-1886

Thermochemische
Untersuchungen -

Темлота
образова

Barth, Leipzig (1882-1886)



$$\Delta H_{298} = -158500 \frac{\text{cal}}{\text{mole}}$$

H/CN, _{yp}

(Hm)

| BØ-7002-IV | 1902

Pilaty O.,
Steinbock H.

Berichte, 1902, 35,
3101-117

IV-7892

1923

Hara and Shinozaki

1. J. Soc. Chem. Ind. Japan 26, 884
(1923)

C_2H_6 , 1, P

~~HCN~~, 1, Hb

Circ. 500 M, Be

HCN, ac.

BD-7020-IV | 1925

ΔH_{ac}

Bredig J.,
Teichmann L.

1. Z. Electrochem., 1925,

31, 449

HCN π , κ

BD-6962-IV | 1926

(P, ΔH_m)

Perry J.
Porter F.

1. J. Am. Chem. Soc.,
1926, 48, 299-309

7001-12

1926

Sinoseki, Hara, and Mitsukuri
I. Technol. Repts. Tohoku Imp. Univ.
6, 157 (1926)

HCN, 1, kp, (Hb, Hm)

Circ. 500

Be

7195-11^u Badger ~~and~~ Woo S-C, 1932
a. J. Am. Chem. Soc. 54, 3523 (1932)

HCN; r, S°, C_p°

N₂O

CO₂

C₂H₂

CNH

Eq 6 p. 16

10

H.C.W.; D.C.W. (P; T_m) 1684-17
1934

Lewis G. V. and Schutz P. W.
1. J. Am. Chem. Soc. 56, 1002 (1934)

"Vapor pressure of liquid and
solid ...

CNH

Circ. 500

5

7524 - IV

1935

HCN, C_2N_2 , l., (Hb), $CNCl$, g., (Hb)

Cook, Robinson

J. Chem. Soc., 1935, 1004

Be

CNH

IV-7841 1935

A F (N_2O ; HCN ; C_2H_2)

Gordon A.R.

J.Chem.Physics 1935, 3, 259-65

"Calculation of the free
energy of polyatomic molecules
from spectroscopic data".

C.A., 1935, 4227⁹

ЕСТЬ Ф. Н.

10

1

HCN

Bo 2223 a) - $\bar{v}$

1935

$T_m, T_v,$

$\Delta H_v, P_{kp}$

T_{kp}, S_{298}

West C.D.

J. Phys Chem 1935, 39,

N 4, 493-507.

HCN

Bp-1485-II | 1936

Felsing W.A.; Drake G.W.

Cp; Cr;

"J. Amer. Chem. Soc.", 1936, 58,
1714-17.

HCN



815-17

1936

К ДИСС. В ЖИДКОМ аммиаке ~~В.А. Плесков~~

Гурьянова Е.Н., Плесков В.А.

J. Phys. Chem. (U.S.S.R.) 1936, 8,
345-63

"Physicochemical properties of
solutions in ...

CNH

● C.A., 1937, 1280⁶

B

1649 - 12
HCN; H_2S (Cp; C_v)

1936

Felsing W.A., Drake G.W.

J. Am. Chem. Soc. 1936, 58,

1714-17

"The determination of the
heat capacities and the heat-capacity
ratios of gaseous hydrogen cyanide and
of hydrogen sulfides".

CNH

C.A., 1936, 79907

10
+1
E O T B & N

HCV

Gordon A.R

IV-784/2 1937

Y. Chem. Phys., 1937, 5, 30

Cladogram measuring HCV no energetic-
consequence present

My tenth copy HCV Thomsen

23 "Th. Unit." volume 158,6 ; Warfeninger Schütz
Z. phys. chem., 1933, A164, 386 ^{see Thomsen's note} volume 261, 3. One

Slip =
= 3 lines

There were 20 up copies of HCV of me-
thyl also 3,5 ~~th~~ since after, etc. these
unpublished ● & Henry Thomsen (15 lines) so
necessary 261, 1 line, & several other things.

Cladogram

Т.к. *Thymus sylvestris* состоит из C_2H_4 и H_2O в соотношении 1:1.
Есть, то требуется его переработка для H_2O и нужно использовать
и $1/2$ количества для C_2H_4 , то есть 158,4 ккал. Прямой
 $\Delta H_f CO_2 = 84,240$ и $H_2O = 68,313$, тогда $\Delta H_{288} H_2O = 31$ ккал

HCN

Дискок и

1939

~~HCN~~
Giauque W.F., Ruchwein R.A.
JACS 61, 2626

Ср,
ΔH_v

Энтальпия HCN. Ср, теплога испаре-
ния и давление паров
коммерциализации H в газе
в цепи неограниченной длины

Вычисленное
полностью значение $S_{298,10} = 48,23$
совпадает с данными

Gordonia (J. Chem. Phys. 5, 30, 1937)

HCN (net)

Bop-7793-IV | 1939

Glarque W.F.
Ruehrwein R.A.

$\Delta H_f^\circ; C_p^\circ; \Delta H_v^\circ; S^\circ$. "J. Am. Chem. Soc"
1939, 61, 2626-33.

1488 - 17

I948

$T_{kp.}$, $P_{kp.}$, $d_{kp.}$, (H_2 , He, Ne, PH_3 , CS_2 , HCN, CH_3CN ,
 C_2H_5CN)

Bengon S.W.

J. Phys. and Colloid. Chem. I948, 52, I060-74.

"Critical densities and related properties of liquids".

Ch. A., I948, 6I90g

HCN

всё г.к.

830-17

I948

Δ $G(HSeO_4^- , H_3AsO_3, H_3BO_3, H_2CrO_4, HCrO_4, H_2SO_3,$
 $HSO_3^-, H_3PO_4, H_2PO_4^-, HPO_4^{2-}, H_3AsO_4, H_2AsO_4,$
 $HAsO_4, H_2SeO_3, HSeO_3, H_2CO_3, HCO_3, H_4GeO_4,$
 $H_3GeO_4^-, H_4SiO_4, H_3SiO_4^-, HNO_3, HNO_2, HNO_2, HCNO,$
 $\underline{HCN}, HClO_2, HClO, HJO_3, HJO, HBrO, HSO_4^-)$

McGowan J.C.

Chemistry & Industry, I948, 632-634.

Relationship between certain dissociation constants.

C.A., I949, 2074hi

C.A. 1949, 2074hi
C.A. 1949, 2074hi

B

~~580~~

95-IV

7486-IV

1949

S, O, H, N, Cl, OH, C, S₂, O₂, H₂, N₂, Cl₂,

C₂H₂, COS, N₂O, CCl₄, HCl, NO, CO, H₂O, CH₄,

CO₂, H₂S, CS₂, NO₂, SO₂, NH₃, HCN, C₂H₄

(Термодинам. функции)

Ciborowski J.

Roczniki Chem., 1949, 23, 361-79

A simple method of computation of
equilibrium constants.

Ch.A., 1951, 4534b

to. u.

Есть ф. ф. 0

HCN

термод.
свойства

сбаву

Италия, Халверсон

1949

R.F. Stamm, F. Helverson,

У.У. Whalen У.chem. Phys. 1949,

104, 17

Основная масса бабеление

тепло и термодинамические

функции вычисляются,

переход термод. функций

HCN и термодинамические

для решения системы уравнений

выбора

с.л. 1949-2830d

Slip UCN *unpublished* + 31, volume
in Gordon A.R. Y.Ch. Pl. 1937, 5, 30

HCN (Δ Haq)

1681-IV

1951

Horiuchi Y., Tanabe K.

Y. Research Inst. Catalysis, Hokkaido
Univ. 1951, 1, 117-31

" Solubility of prussic acid in water.

B

2

✓

Q

C. a. 1952, 8473 C

HCN (ΔK_{aq})

1682 - IV

1951

Horiuchi J., Tanabe K.

Shokubai, 1952, No. 8, 24-36

Synthesis of prussic acid. IV. Solubility of
prussic acid in water

B

+2

c.a., 1953, 11915e

1951

HCN

Yano T., Kanai K.

Shokubai (Catalyst) № 7, 1-7 (1951)

[Ch. ibid. 5, 68 (1949); CA, 47, 11915e]

Синтез синильной кислоты.

Равновесие

III. Выведение химических уравнений
и расчеты синтеза

ДЧ

Уравнение: $2CO + NH_3 = HCN + CO_2 + H_2$ IV. Кинетика реакции синтеза
и равновесие

C.A., 1955, 6553 f.

измерены ватты НСВ при 650-700° при 2 атм.
измерены сжигая водород, C_2 , метанол:
метанол. Получены K_p и ΔH реакции
(~~в атмосфере~~). $Q_p = -4,56 \pm 0,31$ (650°)

630-11
 $\text{CH}_4, \text{NH}_3, \text{HCN}, \text{H}_2 (\Delta F, \Delta H, K)$

1952

Maffezzoni U.

Chimica e industria (Milan), 1952, 34,
460-5

The manufacture of hydrocyanic acid
from methane, ammonia and air.

Ch.A., 1953, 2440g

282-IV

I952

H, H₂, Cl, Cl₂, O, O₂, N, N₂, S₂, OH, NO, CO, H₂S, CS₂,
HCN, COS, NH₃, C₂N₂, H₂O, CO₂, NO₂, CH₂, CH₃, SO₂, SO₃,
N₂O, H₂O₂, C, β -C, CH₃COH, CHO, CH₄, C₂H₆, C₂H₄,
C₂H₂, CH₃OH, C₂H₅OH, CH₃NHNH₂ (Cp, H-H, S)

Ribaud G.

Publ. sci. et tech. ministere air (France), I95
No. 266, I69pp.

Thermodynamic constants of gases at high
temperatures. Ch. A., I953, 6722c

10

НСН

Сентек, Орловская.

1955

Сентек А., Орловская М.

Охрана труда, 1954, 8, № 4, 381-385.

Симметричная кислота. Часть II.
Способность симметричной кислоты
к взрыву и её стабилизация.

Обзор. Труды. 19 мая. Часть I см.
ДМХим, 1955, 29182.

Х-55-16-34247.

Бродвей, Хар, Фригман

1956

MCN

Bradley J. C., Harz L., Friedman A. S.

DCN

J. Res. Nat. Bur. Standards, 1956, 56,

TCN

N^o 4, 194-200

~~АИР~~

орунгун

технологический процесс
уменьшения износа
поверхности в состоянии
использования.

Диф

нес.

ж-57-17-56968.

1643-12

1957

HCN, DCN, TCN (C_p^0/R , $(H^0 - E_0^0)/RT$,
 $-(F^0 - E_0^0)/RT$, S^0/R)

Bradley J.C., Haar L., Friedman A.S.

J. Res. Nat. Bur. Standards, 1956,
56, N 4, 197-200 ()

Ideal gas thermodynamic ...

PX., 1957, 56968

CNH

10

1957

HCN + O₂

Cohen L., Simpson P.

HCN +

Combustion and Flame, 1957, 1, 60

+ velocity

Скорость сгорания HCN в воздухе
и смесиСкорость
сгоранияМедь при этом. Максимальная
скорость сгорания HCN в воздухе
55 см/сек, а в смеси - 540.

С.А., 1957, 2012 г.

~~V. H. H.~~ 1+05-14
HCN, O₂, F₂, HF, CO (Δ H), HF, H₂(D)

1957

Stokes C.S., Grosse A.V.

Industr. and Engng. Chem. 1957, 49, N 8, 1311-
1314 ()

Hydrogen cyanide-fluorine-oxygen flame.

PX, 1958, IO60I

CNH

10

✓ E43
Φ

B90-1098-III; 1675-IV

1958

HCN; CCl_4 ; H_2 ; N_2 ; O_2 ; Ar; Ne;

$(\text{CH}_3)_2\text{O}$; H_2O ; $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$; CH_3OH

Clampitt Bert H., German Dale E.

J. Phys. Chem., 1958, 62, N 4, 438-
440 ()

Heats of vaporisation of molecules at
liquid-vapor interfaces.

PX. 1958, N 20,
66759

CNH
act gr. k.

N. Tanaka T. Murayama

1959

HCN

Z. Phys. Chem. (Frankfurt)
21, 146

Скорость (rate) диссоциации
HCN, измеренная из
экспонентного затухания
интенсивности

ICW

Knight H.T., Rink J.P.

энергия
диссоц.

J. Chem. Phys. 1941; 25, 199.

Энергия диссоциации
дикуана и ее значение с
ней величина, опреде-
лене денситометрическим
сним мучей в ударном
волнах (см $C_2 N_2$)

412-11 1961
Cp, $\frac{H_T - H_0}{RT}$, $\frac{S}{R}$, $\frac{F - H_0}{RT}$ (CO_2 , COS , CS_2 ,
 $ClCN$, HCN , H_2O , H_2S , N_2O , NO_2 , SO_2)

McBride B.J., Gordon S.

J.Chem.Phys., 1961, 35, N 6, 2198-2206
(*англ.*)

Thermodynamic functions of several triatomic molecules in the ideal gas. state. -

PX, 1962,
215245.

Еще опущено

HCN

B90-278-IV | 1961

Rank D.H., Eastman D.P.,
Rad B.S., Wiggins T.S.

(Vi, D.)

"J. Opt. Soc. America"
1961, 51, 49, 929-936

I

КСН

W. Rüdorff, у. Pausenwang
Augen Chen 73, 12, 436

1961

Об образении КСН при возмещении
аммиака на углеродсодержащее
тело.

/ Франко-немецкая фабрика химикатов
Тюбинген - Анон /

M49

- *IV*

HCN

(Cp, t.d.f.)

1962

Durand J.L., Brandmaier H.E.

Western States Sect. Combust. Inst.

Paper WSS/CI 6243, 53pp, 1962

The effects of high-order ...

J

F

Mem 8 5-re

CA, 1964, 60, N4, 3553c

1962

HCN(aq)

Thermodynamics of metal-cyanide coordination. I. pK , ΔH° , and ΔS° values as a function of temperature for hydrocyanic acid dissociation in aqueous solution. Reed M. Izatt, James J. Christensen, Russell T. Pack, and Rees Bench (Brigham Young Univ., Provo, Utah). *Inorg. Chem.* 1, 828-31(1962). The thermodynamic dissoen. const. of HCN in aq. soln. was detd. at 10-45°. The pK values obtained with their indicated 95% confidence limits are: 10°, 9.63 ± 0.01 ; 15°, 9.49 ± 0.01 ; 20°, 9.36 ± 0.01 ; 25°, 9.21 ± 0.01 ; 30°, 9.11 ± 0.01 ; 35°, 8.99 ± 0.01 ; 40°, 8.88 ± 0.02 ; 45°, 8.78 ± 0.02 . The ΔH° value for HCN dissoen. in aq. soln. was detd. at 8 and 25° by a thermometric titration procedure. The values obtained with their 95% confidence limits are: 8°, 11.3 ± 0.2 ; and 25°, 10.4 ± 0.2 kcal./mole. ΔS° values of -7.4 and -3.9 e.u. were calcd. from the ΔH° and ΔG° values at 8 and 25°, resp. The ΔG° value at 8° was obtained by extrapolation from ΔG° values at 10-45°.

CA

ΔH°
 ΔS°

C.A. 1963.58.1

Hg

1962

10145-12
B92 - 10145-12

HCN 21 Б183. Некоторые химические равновесия при газовом цианировании металлов. Маколкин И. А., Давыдова Ж. В. «Ж. прикл. химии», 1962, 35, № 7, 1487—1496

Рассмотрены хим. равновесия, протекающие при цианировании металлов в интервале 500—1200° K. В муфеле печи возможно образование HCN по р-циям $\text{CH}_4 + \text{NH}_3 = \text{HCN} + 3\text{H}_2$ и $\text{CO} + \text{NH}_3 = \text{HCN} (\text{газ}) + \text{H}_2\text{O}$, вычислены константы равновесия этих р-ций и процент HCN в смеси (доходит до 25% для (1) при 1200° K). Термодинамич. анализ р-ций, протекающих при распаде HCN по схемам $\text{HCN} = 0,5\text{N}_2 + 0,5\text{H}_2 + \text{C}$, $\text{HCN} = \text{N} + \text{H} + \text{C}$ (1) и $\text{HCN} = 0,5\text{C}_2\text{N}_2 + 0,5\text{H}_2$ (2), приводит к выводу о реальности процессов (1) и (2). Продукты этих р-ций, взаимодействуя с металлами, могут образовывать карбонитридные фазы, что подтверждается термодинамич. вычислениями для карбидов и нитридов Fe, Al, Cr, Si, Mn, Ti. Л. Резницкий

X-1963-21

HCN

1962

2 Б379. Образование цианистого водорода при адиабатическом сжатии смесей метана и аммиака. Циклис Д. С., Бородин М. Д. «Докл. АН СССР», 1962, 147, № 4, 860 (86) стр.

Выяснены условия синтеза HCN (I) по р-ции $\text{CH}_4 + \text{NH}_3 = \text{HCN} + 3\text{H}_2$ (I) при адиабатич. сжатии смесей $\text{CH}_4 + \text{NH}_3 + \text{Ag}$ в условиях быстрого нагрева и закалки. Опыты со смесями $\text{CH}_4 + \text{NH}_3 + \text{N}_2$ дали отрицательные результаты, т-ра сжатия этих смесей оказалась недостаточна велика для образования I. Константа равновесия р-ции (I) рассчитывалась по ур-нию $K = -11896 / (T + 10,141 \lg T - 2,530 \cdot 10^{-3} T + 0,231 \cdot 10^{-6} T^2 - 0,122 \cdot 10^5 T^{-2} - 17,14$. Расчет содержания I в равновесной смеси производился в предположении, что при высоких т-рах даже при высоких давлениях летучести компонентов будут мало отличаться от их парц. давлений. Наибольший выход I — до 20 об.% — получен при сжатии смеси состава (в об.%) 8,8 CH_4 , 2,5 NH_3 и 88,7 Ag до 2500—3000 кг/см². Л. Резницкий

X. 1964.2

1963

HCV

Edwards R. B.

p

Contract W-7405-eng-48. 15/p.

The vapor pressures of 30 inorganic liquids between one atmosphere and the critical point.

(cc. N_2) I

NSA-1964.18.3

1963

КСВ

Moran T. F., Hamill W. K.

J. Chem. Phys., 1963, 39, 1413 (N. 6)

РК+

Экспериментальные средние реакции по-
-переломный димер, определены с
помощью мал-спектрометрии.

Оценено спектры в пропуск КСВ
(λ - 109 до - 181 нм (мол) и
нев. сд. преломления.

1964
 CO_2 ; Ar; Kr; HCN; NH_3 ; CH_3Cl ; CH_2Cl_2 ;

$\text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}$; $\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}$; $\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2$; C_2HCl_3 ; $\text{C}_2\text{H}_3\text{CN}$;

CH_4 ; C_2H_2 ; C_2H_6 ; C_2H_4 ; $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$ (Cp)

Senftleben H.

Z. Angew. Phys., 1964, 17(2), 86-7

New values of thermal...

J

Есть оригинал.

1966

KCN

K_a

32417v Dissociation constants of hydropseudohalic acids. J. H. Boughton and R. N. Keller (Univ. of Colorado, Boulder). *J. Inorg. Nucl. Chem.* 28(12), 2851-9(1966)(Eng). By means of potentiometric titrn. with HCl of solns. of pseudohalide salts at several ionic strengths and temps., pQ_a and K_a° values (Q_a is molar equil. quotient and K_a° dissoen. const.) were obtained for HCN, HN_3 , HOCN, and HSCN. From pH studies, HSeCN is shown to be a very strong acid. The dissoen. const. for the above acids in the order given stand in the approx. ratio of $1:10^5:10^6:10^9:10^{10}$. Approx. ΔG° , ΔH° and ΔS° values were calcd. and these are esp. useful in the cases of those acids for which directly measured thermodynamic values are unavailable. 32 references.

RCJX

+3

C. A. 1967-66. 8



1966

HCN

HN_3
 HOCN
 HSCN
 HSeCN
 K. G.

111111u Halogenoid complexes. Raymond N. Keller (Univ. of Colorado, Boulder). AD 631282. Avail. CFSTI \$3.00 cy, 10 pp.(1966)(Eng). A summary is given of work involving the chemistry of the following halogenoid or pseudohalide ions: N_3^- , SeCN^- , NCO^- , and azidodithiocarbonate (SC-SN_3^-). The emphasis of the research was to det. to what extent the pseudo-halide ions could act as ligands in coordination complexes and the general nature of the resulting compds. Dissoen. consts. were obtained for the acids HCN, HN₃, HOCN, HSCN, and HSeCN. From U.S. Govt. Res. Develop. Rept. 41(11), 22(1966). TCVL

+4

C. A. 1967. 66. 24



1968

H-CN

Davis D. D.
Okabe H.

D.

M. Chem. Phys., 49(12),
5526.

(see CN) I

HCN

Berkowitz J., и др.
J. Chem. Phys.,
50, N4, 1497

1969

ΔH_f

Фотомониторинг HCN. Срод-
ство к электрону и
температура образования
CN.

I

(Сил. CN) III

НСН

Вар - 113 - XIV

1969

5 Б1016. Физические свойства углеводородов. Часть 36. Нитрилы. Gallant Robert W. Physical properties of hydrocarbons. Part 36. Nitriles. «Hydrocarbon Process.», 1969, 48, № 7, 135—141 (англ.)

На основании лит. данных выбраны значения т. кип. и замерзания и крит. постоянных и составлены диаграммы нек-рых физ.-хим. св-в пианистого водорода, ацетонитрила, пропионитрила и бутиронитрила, причем в ряде случаев использованы известные методы оценки св-в. Приведены диаграммы следующих св-в: давление паров (от -20 до 240°), теплоты парообразования (от -40 до 310°), теплоемкость паров ($0-1000^\circ$), теплоемкость жидкостей (от -40 до 160°), плотность жидкостей (от -40 до 310°), вязкость паров ($0-500^\circ$), вязкость жидкостей (от -40 до 160°), поверхностное натяжение (от -40 до 160°), теплопроводность паров ($0-500^\circ$) и теплопроводность жидкостей (от -40 до 160°) всех рассмотренных веществ. Часть 35 см. реф. 5Б1015. В. Байбуз

физ. св-ва

Х. 1970.5

(+1)



HCN

1940

P

(10459n) Gas chromatographic and vapor pressure studies of some isotopic hydrogen cyanides. Appleton, Gerry T. (Univ. Tennessee, Knoxville, Tenn.). 1970, 151 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 70-20,293. From ~~Diss. Abstr. Int. B~~ 1970, 31(5), 2590.

C.A. 1971. 75.2

MCN

1970

Breant M., et al.

J. Electroanal. Chem.

1970, 24, ~2-3, 409

Kguss,

козр.

сольватация

(Cu. AgCl)I

1970

HCN

XII

86

 ΔH

ST

p

200

16 Б710. Термодинамика протонизации в водных растворах. Часть XII. ΔH° , ΔS° и ΔC_p° диссоциации синильной к-ты при 10,25 и 40°. Christensen James J., Johnston H. Dee, Izatt Reed M. Thermodynamics of proton ionization in aqueous solution. Part XII. ΔH° , ΔS° , and ΔC_p° values for hydrocyanic acid dissociation at 10,25, and 40. «J. Chem. Soc.», 1970, A, № 3, 454—455 (англ.)

Методом термометрич. титрования измерены энтальпии ионизации ΔH° HCN при 10,25 и 40°: $11,33 \pm 0,04$; $10,43 \pm 0,03$; $9,57 \pm 0,03$ ккал/моль, соотв. Вычислено изменение энтропии ΔS° для процесса ионизации при тех же т-рах: $-4,05 \pm 0,15$; $-7,19 \pm 0,11$ и $-10,26 \pm 0,10$ э. е., соотв., а также изменение теплоемкости при 25° $\Delta C_p^\circ = -60 \pm 4$ кал/моль·град. Все величины относятся к бесконечно разбавленным растворам. Часть XI см. РЖХим, 1969, 24Б960.

И. Васильев

X. 1970. 16

HCN (mc)

Gopala R.R.V.
Narasimha S.K.

1980

Cp
p
 ΔH_v

L. phys. Chem. (BRD),
72(4-6), 241.



(see CD4) I

HCN (ж)

Rao R.V.,
Swamy K.N.

1970

термод.
данные

Z. Phys. Chem., 1970,
72 (4-6), 241.



C_2H_2 , HCN (перуог. св-ва) 14 1971
Chaturvedi G.C., Rao C.N.R. XIV-3353
Spectrochim. Acta, 1971, A27, N10,
2097-100 (anal.)

Normal vibrations of the electro-
nically excited states of hydro-
gen cyanide and acetylene

10 7
(см. оригинал) CA, 1971, 75, N26, 156666

HCN

1971

расчет

14 Б22. Изучение энергетических и конформационных характеристик HCN, HNC и CN⁻. Сравнение результатов расчета методами МО ССП и PMX с самосоогласованием по заряду. Loew Gilda Harris. Energy-conformation studies of HCN, HNC and CN⁻: a comparison of results from EH—SCC and SCF molecular orbital calculations. «Theor. chim. acta», 1971, 20, № 3, 203—215 (англ., рез. нем.)

С целью выяснения возможностей расширенного метода Хюккеля (PMX) с самосоогласованием по заряду (ССЗ) осуществлен расчет HCN, HNC и CN⁻ этим методом, и результаты сопоставлены с данными расчетов методами МО ССП. Показано, что PMX с ССЗ правильно предсказывает молек. геометрии (для HCN линейная в основном и угловая в возбужденном состоя-

X. 1971. 14

42



нии), большую энергетич. устойчивость HCN, по сравнению с HNC, неплохо передает первые потенциалы ионизации, дипольные моменты, зарядовые распределения и молек. энергии связи (в сравнении с более точными расчетами). Однако метод не годится для определения полной энергии молекул и относит. энергий состояний, отвечающих одной и той же конфигурации молекул.

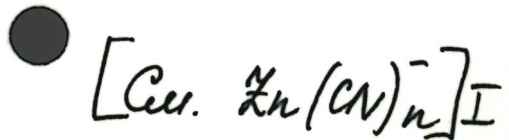
А. П. Клягина

HCN

Perusson H.

1941

Acta chem. scand.,
Kgl. 1941, 25, ~ 2, 543.



93100k Electronic structure of the hydrogen cyanide dimer and trimer. Johansson, Allan; Kollman, Peter; Rothenberg,

1972

Steve (Dep. Inorg. Chem., Helsinki Univ. Technol., Helsinki, Finland). *Theor. Chim. Acta* 1972, 26(1), 97-100 (Eng). The electronic structure and energy of dimerization and trimerization of HCN are computed with an STO-3G basis and the results found to be in good agreement with the exptl. ΔE . Unlike CNDO/2, this small ab initio basis predicts the correct geometry for the dimer of HCN. The charge redistribution effects found in this H-bond involving a C-H proton donor and sp hybridized acceptor are similar to those found in previous H-bonded studies.

HCN

ΔH_{dimer}

ΔH_{trimer}

C. A. 1972

77.14

H-CN

Jean Drowart
Paul Goldfinger.

1972

948

(Do)

"Ann Rev. Phys. Chem"

1962, 13, 459-78

"High Temp. Chem"

HCN

1972

13 Б728. Термодинамический расчет плазмохимических реакций. Pfoegg Gerhard, Lauterbach Hubert. Thermodynamische Berechnung plasmachemischer Reaktionen. «Wiss. Z. F.-Schiller-Univ. Jena. Math. naturwiss. R.», 1972, 21, № 3, 565—579 (нем.)

(Kr) В связи с недостаточной корректностью экстраполирования эксперим. термодинамич. функций состояния в область плазменных т-р, расчеты равновесий при этих т-рах следует проводить методами статистич. термодинамики с использованием спектральных данных по молек., атомным и ионным постоянным. Обсуждены пути и условия таких расчетов. Рассчитаны равновесия в системе H—C—N и графически представлены ее фазовые границы, а также изобары и изотермы максимальной равновесной концентрации HCN в области т-р 2000—6000° K и давл. до 10^6 атм. А. Гузей

X. 1973. № 13

HCN

1973

P, Cp;

$H_T - H_0$

Boerger, Ilka. etal.
Chem.Tech. (Leipzig)
1973, 25(3), 152-6.

• (see H; I)

HCN

Bep - 7896-X

1973

Hurley A.C.

Advan Quantum

Chem. 1973, 7, 315-34

~~1979 p.~~

Кв. мех.
расчет.

ΔH_f

● (cut dia; I)

(HCN)₂

Johansson Allan
Kollman Peter
Rothenberg Steve.

1973

(4H)

"Theor. chim acta"

1972, 26, N 1, 97-100.

Электр. строение димера и
тримера молекулы HCN.

РЖ.Х. 1973. N 1594

(HCN)₃

Johansson Allan
Kollman Peter
Rothenberg Steve.

1973

(ΔH)

"Theor. chim. acta"

1972, 26, N 1, 97-100.

Электр. строение димера и
тримера молекулы HCN

Р.ж.Х. 1973. N 1594

1973

НСН

14 Б735. Индексы связей и теплоты образования некоторых нитрилов. Moffat J. B., Tang K. F. Bond indices and heats of formation of some nitriles. «J. Mol. Struct.», 1973, 15, № 3, 359—365 (англ.)

Получено ур-ние для расчета теплот образования нитрилов по значениям индексов связей, введенных Зренсоном (РЖХим, 1971, 11Б42). Статистич. методом линейного регрессионного анализа показано, что имеется хорошая корреляция между теплотами образования нитрилов и индексами связей для этих соединений. Получено также выражение для расчета теплот образования углеводородов через индексы связей и проведено сравнение вычисленных и эксперим. значений теплот образования нек-рых углеводородов. Рассчитаны и табулированы групповые параметры для оценки теплот образования углеводородов и нитрилов. В. Ф. Байбуз

4Н4

Х. 1973 N 14



(+8)

CN

ацетонитрил CH_3CN

акрилонитрил

дицианоацетилен

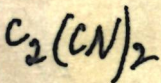
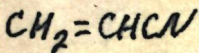
CH_4

C_2H_6

C_2H_4

C_2H_2

H_2



1973

30807.8160

Ex-Ch/XHB-z,
Ch, TE $(\text{HCN})_2$

Kp: -bo 41197

4-1329

Mettee Howard D. Vapor-phase dissocia-
 tion energy of $(\text{HCN})_2$. "J. Phys. Chem.",
 1973, 77, N 14, 1762-1764 (АНГЛ.)

0931 НИИ

921 921

ВИНИТИ

40807.8791
TC, Ch, Ph

407710⁰²

1974

НСН (англ.)

2260

Eaker Charles W., Hinze Juergen.

Semiempirical MC-SCF theory. I. Closed
shell ground state molecules.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1974, 96, N 13,
4084-4089

(англ.)

0102.003

135 136

2154

ВИНИТИ

40411.8151

Ph, TE, Ch

HCN (ANS)

C2

92073

1974

2018

Hashimoto Masao, Isobe Taro. The INDO and CNDO/2 SCF LCAO MO calculation of intermolecular forces and their pairwise additivity. "Bull. Chem. Soc. Jap.", 1974, 47, N 1, 40-44

(англ.)

0003 444

067 067

013

90

75

ВИНИТИ

DCN

(T_{tr})

22 Б593. Структурный фазовый переход в твердом DCN. Dietrich O. W., Mackenzie G. A., Pawley G. S. The structural phase transition in solid DCN.

«J. Phys. C: Solid State Phys.», 1975, 8, № 7, L98—L102 (англ.)

Методом упругого и неупругого когерентного рассеяния нейтронов (трехосный крист. спектрометр, $\lambda_0 = 2,39$ А, монохроматор и анализатор — кристаллы пи-рографита, графитовый фильтр) исследован в области т-р 78—220° К монокристалл DCN (I). В результате экспериментов по кристаллизации из жидк. и газ. фаз удалось получить тетрагон. монокристалл I с мозанч. расхождением $\sim 2^\circ$. Небольшой размер кристалла не позволил провести полное изучение динамики решетки I. По расщеплению дифракц. максимумов на нейтронограммах, обусловленному образованием доменов с разной ориентацией ромбич. низкот-рной решетки по

2. 1975 N 22

отношению к тетрагон. высокот-рой, установлено, что фазовый переход в I ($T_c = 160,0^\circ \text{K}$) является переходом первого рода и происходит в узком диапазоне т-р ($\sim 0,5^\circ$). Гистерезис не обнаружен, образование и исчезновение доменов происходит обратимо. Определена т-рная зависимость периодов решетки I ниже и выше T_c . Малый ($\sim 10^\circ$) и обратный по знаку по сравнению с KN_2PO_4 изотопич. эффект указывает на относительно слабое влияние водородной связи на фазовый переход в I. Обнаружена нестабильность решетки I по отношению к фоновым с волновым вектором, примерно параллельным [110], выражающаяся в «смягчении» фононов при приближении к T_c . Эта «мягкая мода» соответствует изменению симметрии кристалла I при фазовом переходе.

С. Ш. Шильштейн

1975

DCN

10 E814. Структурный фазовый переход в твердом DCN. Dietrich O. W., Mackenzie G. A., Pawley G. S. The structural phase transition in solid DCN. «J. Phys. C: Solid State Phys.», 1975, 8, № 7, L98—L102 (англ.)

(Температура)

Проведено нейтронографич. исследование фазового перехода (ФП) в твердом состоянии в дейтерированном HCN. В точке ФП ($T_c = 160,0^\circ \text{K}$) происходило скачкообразное изменение структуры, указывающее на существование ФП 1-го рода. Измерение неупругого рассеяния нейтронов в точке (110) зоны Бриллюэна выявило существование центрального пика, который связывается с конденсацией ТА-моды норм. колебаний.

И. Разумовский

10

Ф. 1975 № 10

1975

DCN

(Tr)

53198n Structural phase transition in solid deuterium cyanide. Dietrich, O. W.; Mackenzie, G. A.; Pawley, G. S. (Phys. Dep., DAEC Res. Estab., Roskilde, Den.) *J. Phys. C* 1975, 8(7), L93-L102 (Eng). Neutron scattering measurements on DCN have shown that the structural phase change from a tetragonal to an orthorhombic form at 160°K is a 1st-order transition. A transverse acoustic phonon mode, which has the symmetry of the phase change, was obsd. at very low energies and showed "softening" as the transition temp. was approached from above.

C.A. 1975. 23 NY

HCN

1975

Horvath A. Z.

Tm, Te, ΔH_f

физ. св. ва

физ. св. ва неорганических
соединений. Единицы СИ
London Edward A, 1975,
xiii, 1466 pp, ill.

(св Br₂;

HCN

1975

Iwasaki Hiroji
Date Kaoru.

(P, ν -T
Pcr, Tcr)

Koatsu Gasu 1975
12(8) 374-80 (japan)

(cu NH₃; T)

HCN

1976

Borisov Yu. A.

s H guceous

Zh. Strukh Khim

1976, 17(6) 979-84 (russ)

(see Lig, III)

1976

DCN

№ 15 Б465. Структурный фазовый переход в твердой DCN. Dietrich O. W., Mackenzie G. A., Pawley G. S. The structural phase transition in solid DCN. «Mol. Cryst. and Liquid Cryst.», 1976, 32, № 1—4, 21—25 (англ.)

(T_{tr})

Методом упругого и неупругого когерентного рассеяния нейтронов (трехосный крист. спектрометр с пирографитом в кач-ве монохроматора и анализатора) исследован фазовый переход ($T_k = 160^\circ \text{K}$) в тв. DCN (I). Кристаллизация I производилась из расплава или газ. фазы в кварцевом контейнере, помещенном в криостат, предназначенный для нейтронных экспериментов. Вырастить монокристаллы I, достаточно большие и совершенные для проведения полного исследования динамики решетки, не удалось, поэтому проведено измерение упругого рассеяния и нескольких фононных групп



2. 1976 № 15

на отдельном кристаллите с мозаичностью около 2° . В низкот-рной фазе I наблюдалась доменная структура, обусловленная разной ориентацией орторомбич. осей по отношению к тетрагон. осям высокот-рной фазы I. Измерения т-рной зависимости параметров решетки показали, что в узком интервале ($<1^\circ \text{K}$) происходит резкое изменение периодов a и b , что указывает на то, что превращение в I является переходом 1-го рода. Малая величина изотопич. эффекта при T_k ($\sim 10^\circ$) и обратный по сравнению с дифосфатом калия знак свидетельствуют об относительно слабой роли Н-связи в фазовом переходе в I. Обнаружено заметное ($\sim$ на 25%) уменьшение частоты для моды колебаний с волновым вектором, параллельным $[110]$, при охлаждении от 225 до 178°K , однако, дальнейшего «смягчения» этой моды при приближении к T_k не наблюдалось.

С. Ш. Шильштейн

1976

DCN

8 E744. Структурные фазовые переходы в твердом DCN. Dietrich O. W., Mackenzie G. A., Pawley G. S. The structural phase transition in solid DCN. «Mol. Cryst. and Liquid Cryst.», 1976, 32, № 1—4, 21—25 (англ.)

Фазовый переход при $T_c = 160^\circ \text{K}$ в дейтерированном HCN исследован методом рассеяния нейтронов. Установлено, что при $T = T_c$ происходит скачкообразное изменение параметров решетки a и b низкотемпературной орторомбич. фазы, что указывает на принадлежность превращения к переходам 1-го рода. Измерение интенсивности неупругого рассеяния в точке (110) вдоль направления [110] выявило центральный пик ($\omega = 0$) в температурном интервале, примыкающем к T_c , связываемый с мягкой модой норм. колебаний. И. Разумовский

(T_{tr})

ф 1976 № 8

DCN

1976

(Ttr)
84: 128981x The structural phase transition in solid deuterated hydrogen cyanide. Dietrich, O. W.; MacKenzie, G. A.; Pawley, G. S. (Phys. Dep., DAEC Res. Establ., Roskilde, Den.). *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 1976, 32(1-4), 21-5 (Eng). Neutron scattering measurements on DCN have shown that the structural phase transition from a tetragonal to an orthorhombic form at 160°K is a first order transition. A transverse acoustic phonon mode, which has the symmetry of the transition was obsd. at very low energies and showed "softening" as the transition was approached from above.

C.A. 1976 84 N18

CAN⁺

1977

CAN⁺

Rosenstock H. M. et al

J. Phys. Chem. Ref. Data,
1977, 6. Suppl. N1, p1-223

T.G. cb-ba

OTT 6577

1978

 HNC^+

89: 121650h Hydrogen isocyanide(+) radical cation studied by charge-exchange mass spectrometry. Bieri, Gerhard; Jonsson, Bengt Orjan (Dep. Phys., Royal Inst. Technol., Stockholm, Swed.). *Chem. Phys. Lett.* 1978, 56(3), 446-9 (Eng). The fragment ion with m/e 27 from CH_3NH_2 or CH_3NC has the HNC⁺ configuration rather than the tautomeric HCN⁺ structure. This was deduced from its recombination energy of 12.5 ± 0.2 eV, which was detd. from a comparative investigation of charge-exchange reactions studied in a double mass spectrometer.

Confined

 ΔH

C.A., 1978, 89, N14

HCN
HF

1978

7 Б1683. Теплота смешения HCN и HF в жидкой фазе. Collister J. L., Pritchard H. O. The heat of mixing of hydrogen cyanide and hydrogen fluoride in the liquid phase. «Can. J. Chem.», 1978, 56, № 21, 2788—2789 (англ.)

По изменениям t -ры жидкости сделана приближенная оценка теплоты смешения (ΔH) жидк. HCN и HF при их исходной t -ре -10° и объемных соотношениях компонентов от 1:9 до 9:1. Расчет ΔH сделан в предположении аддитивности теплоемкости и плотности р-ров. Взаимодействие носит резко выраженный экзотермич. характер. Максимум тепловыделения, $\Delta H = -721$ ккал/моль, наблюдается при объемном отношении HCN/HF=6/4; погрешность определения — около $\pm 20\%$.

Д. А. Федосеев

ΔH_{mix}

⊕ 12

22.10.49, HF

HCN

OTTUCK 6389

1978

H₂S

(A_H⁺, K_p)
 ΔS, ΔG

89: 31158z The equilibrium $\text{H}_3\text{S}^+ + \text{HCN} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{CN}^+ + \text{H}_2\text{S}$ and the relative proton affinities of HCN and H₂S. Freeman, C. G.; Harland, P. W.; McEwan, M. J. (Dep. Chem., Univ. Canterbury, Christchurch, N. Z.). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* 1978, 27(1), 77-82 (Eng). The reaction $\text{H}_3\text{S}^+ + \text{HCN} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{CN}^+ + \text{H}_2\text{S}$ was studied at 300 K in a flowing afterglow system from both the forward and reverse directions. Equil. was readily attained under most reaction conditions enabling a value for the equil. const. $K = 5.2 \pm 1.0$ to be detd., and hence $\Delta G^\circ_{300\text{K}} = -4.1 \pm 0.5 \text{ kJ mol}^{-1}$. The forward and reverse rate coeffs. are $k_f = 1.9 \times 10^{-9}$ and $k_r = 3.4 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Using an est. of the entropy change, ΔS° , for the reaction, the relative proton affinities of H₂S and HCN were detd. (PA (H₂S) < PA (HCN) by 2.5 kJ mol⁻¹).

(+1) 

G.A., 1978, 29, NY

$\frac{HCN}{C_2N}$

ommuch 8628 1979

Dewar M. J. S., et al.

(2Hf) J. Chem. Soc. Faraday
Trans. II, 1979, 75 (6)

829-40

HCN

1979

Лебедева Т. Н., изд.

(Р над раст.)

Ж. прикл. химии,
1979, 52 (7), 1498-501

(см. NH_3 ; I)

HCN

ommuch 6628

1978

ΔH

Meot-Ner, M.
(Mautner)

J. Amer. Chem. Soc.,
1978, 100 (15), 4694-99.

Solvation of the Proton by
HCN and CH_3CN ...

DCN

1979

5 Б876. Изучение DCN методом рассеяния нейтронов. Mackenzie G. A., Pawley G. S. A neutron

scattering study of DCN. «J. Phys.», 1979, C12, № 14, 2717—2735 (англ.)

С целью получения информации о структурном механизме фазового перехода методом когерентного неупругого рассеяния нейтронов (трехосный спектрометр с фиксированным значением энергии падающих на образец нейтронов 5 и 13,7 Мэв, съемка монокристалла в криостате при t -ре 162—227 К) проведено измерение поперечной акустич. (мягкой) воды в направлении (110) с поляризацией вдоль (110) в кристалле

фазов.
переход

Х.1980.Н5

DCN, к-рая непосредственно связана с особенностями структуры этого фазового перехода (высокот-рная тетрагон→низкот-рная ромбич. модификация), наблюдаемого при 160 К. По мере приближения к т-ре фазового перехода (225→160 К) наблюдается эффект уменьшения частоты моды в средн. на 25%. Величина частоты при этом примерно на порядок меньше частоты др. акустич. мод. системы. Измеренные в образце др. акустич. моды в рассеивающей плоскости (a^*b^*) являются т-рно независимыми, а оптич. моды из-за малого размера образца, дающего слабый сигнал (интенсивность) рассеянного излучения, вовсе не наблюдаются. Проведенные измерения энергии фононов акустич. мод достаточно хорошо соответствуют теор. представлениям, основанным на простой динамич. модели с использованием силовых констант взаимодействия соседних атомов структуры.

И. Д. Датт

HCN

1979

Silv' B.

Cher. n. J. Chim. phys. et phys. chim. Biol.,
1979, 76, n° 1, 21-25.

●
(en. CO₂; III)

HCN

1980

18 Б1488. Влияние ионной силы на константу диссоциации цианистого водорода. Gáspár Vilmos, Beck Mihály. A hidrogén-cianid disszociációs állandójának ionerősség-függése. «Magy. kém. folyóirat», 1980, 86, № 4, 177—179 (венг.)

(Kc)

При 25° в водн. р-рах с ионной силой (I) 0—5,0 (NaClO_4) с использованием электрода, селективного по отношению к иону CN^- , и СЭ исследована диссоциация HCN. Для расчета pK использована линеаризованная форма кривой Тт. Установлено, что при $I=0$; 1,0 и 5,0 значения pK соотв. равны 9,21; 8,88 и 8,78. По резюме

2 1980 ~ 18

HNC
HCN

[om. 24973]

1980

Maese N.N., Woods R.C.,

спектр.
эксперим.,
 $\Delta_f H;$

J. Chem. Phys., 1980,
73 (9), 4521-4527.

HCN

1980

92: 116928n Evaluation of the strength of individual bonds in some cyano-containing compounds. Kazin, I. V.; Kyskin, V. I.; Gedymin, V. V.; Kaganyuk, D. S. (USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1980, 54(1), 40-4 (Russ). The method of Kaganyuk (1975) of evaluation of effective at. charges is used to calc. bond energies, enthalpies of formation and enthalpies of combustion. Results are tabulated for HCN, FCN, ClCN, BrCN, ICN, MeCN, CF₃CN, PF₂CN, NF₂CN, LiCN, and BCN:

$D_0, \Delta H_f.$
 $\Delta H_{comb}.$

C.A. 1980, 92 n 14

HCN, DCN

М 14367

1982

23 Б827. Давление пара некоторых изотопнозамещенных синильных кислот. Appleton Gerry T., Van Hook W. Alexander. Vapor pressures of some isotopic hydrogen cyanides. «J. Chem. and Eng. Data», 1982, 27, № 3, 363—365 (англ.)

С помощью кварцевого манометра измерено давл. насыщ. пара HCN(I), DCN(II) и HC¹⁵N(III) над тв. и жидк. фазами. Для жидк. фазы результаты представлены в виде ур-ния $\ln p$, $\text{Торр} = A + B/T + CT$. Интервал т-р, коэф. A , B и C составляют для I: 260—297, $19,7777 \pm 0,239$, $-3624,28 \pm 33,1$ и $-(3,4169 \pm 0,43) \cdot 10^{-3}$, для II: 261—304, $21,5607 \pm 0,130$, $-3885,10 \pm 18,3$ и $-(6,4797 \pm 0,23) \cdot 10^{-3}$, для III: 260—275, $34,8783 \pm 3,371$, $-5664,22 \pm 450,0$ и $-(31,371 \pm 6,31) \cdot 10^{-3}$. Ввиду меньшей точности измерений давл. пара над тв. фазой описывается двучленным ур-нием. $\ln P$. $\text{Торр} = A + B/T$. Ин-

Р;
X. 1982, 19, N 23

тервал т-р, коэф. A и B составляют для I: 237—256, $22,5361 \pm 0,054$, $-4558,69 \pm 13,4$, для II: 227—259, $21,6205 \pm 0,016$, $-4342,41 \pm 3,9$, для III: 227—259, $22,2661 \pm 0,023$, $4504,12 \pm 5,8$. Из данных по давл. паратв. I, II, III делается вывод только о знаке изотопного эффекта, $a_1 = \ln P_I/P_{II}$ и $a_2 = \ln P_I/P_{III}$: a — положит. Для жидк. I, II и III в виде графиков приведена т-рная зависимость a_1 и a_2 . Эксперим. a_1 и a_2 сопоставлены с вычисленными из спектроскопич. данных.

В. В. Чепик

~~HEA~~

HNC

Оттиск 13992

1982

15 Б665. Теплота образования изоцианистого водорода из измерений методом спектроскопии двойного ионно-циклотронного резонанса. Pau Chin-Fong, Nehre Warren J. Heat of formation of hydrogen isocyanide by ion cyclotron double resonance spectroscopy. «J. Phys. Chem.», 1982, 86, № 3, 321—322 (англ.)

С помощью спектрометра двойного ИЦР для порога отщепления дейтрона от DCNH^+ получена величина, превышающая на $14,8 \pm 2$ ккал/моль соотв-щий порог отщепления протона (т. е. сродство к протону HCN). При пренебрежении небольшим изотопным эффектом эта разность является прямой мерой относит. термодим. устойчивостей HCN и CNH. По резюме

ΔH_f ;

(H) 

X, 1982, 19, N 15.



+

$\text{HNC} \rightarrow \text{HCN}$

1985

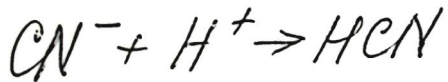
14 Б1086. Расчеты молекулярномеханических характеристик вдоль внутренней координаты реакции. A molecular mechanical calculation along the intrinsic reaction coordinate. Cho Seikichi. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1985, 58, № 11, 3405—3406 (англ.)

Рассчитаны колебат. х-ки (частоты и формы нормальных колебаний) вдоль внутр. координаты реакции (ВКР) $\text{HNC} \rightarrow \text{HCN}$ с использованием рассчитанной ранее Пв потенциальной энергии этой р-ции неэмпирич. методом ССП. Построены графики изменения частот при движении вдоль ВКР. В ходе р-ции частота ν_2 , отвечающая вал. кол. связи CN, остается почти неизменной, тогда как частота ν_1 достигает в окрестности переходного состояния миним. значения, а частота ν_3 принимает мнимое значение.

В. И. Фаустов

ν_i , см⁻¹-пост.

X. 1986, 19, N 14



1986

Ewig Carl S., Van Wazer
John R.

ΔH_{298}° ; J. Phys. Chem. 1986, 90
(18), 4360-3.

●
(see. $\text{HO}^- + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}_2\text{O}$; I)

HCN

1985

14 Б1298. Столкновительное уширение линии перехода с $J=1 \leftarrow 0$ молекулы HC^{15}N азотом, кислородом, гелием и воздухом. Collisional broadening of the $J=1 \leftarrow 0$ transition of HC^{15}N by nitrogen, oxygen, helium, and air. Colmont J. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 114, № 2, 298—304 (англ.)

Измерена ширина линии вращат. перехода с $J=1 \leftarrow 0$ основного колебат. состояния молекулы HC^{15}N при 88055,01 МГц, обусловленная столкновениями молекул HC^{15}N с молекулами N_2 , O_2 , воздуха и атомами гелия, при различных давл. Измерения для системы $\text{HC}^{15}\text{N} + \text{N}_2$ выполнены при т-рах 234—295 К. Для параметра полуширины линии для системы $\text{HC}^{15}\text{N} + \text{N}_2$ при т-рах 295, 267, 247 и 234 К получены значения 6,58; 7,31; 7,95 и 8,42 МГц/Торр соотв., а для систем HC^{15}N с гелием, кислородом и воздухом при т-ре 295 К параметры полуширины равны 2,01; 3,89 и 6,01 МГц/Торр соотв. Т-рная зависимость параметра полуширины для системы $\text{HC}^{15}\text{N} + \text{N}_2$ описывается ф-лой $\alpha(T) = \alpha(T_0) (T/T_0)^{-n}$ с $n = 1,04 \pm 0,16$.

Е. В. Алиева

м.п., 21;

X. 1986, 19, N 14

HNC
DNC

1986

14 Б1204. Спектры электронного поглощения HNC и DNC. Electronic absorption spectra of HNC and DNC. Krishnamachari S. L. N. G., Venkatasubramanian R. «Spectrosc. Lett.», 1986, 19, № 1, 55—60 (англ.)

Исследованы электронные спектры поглощения продуктов, полученных при импульсном Фт, дейтерированных тиазола (I) и оксазола (II). Из сравнения с аналогичными данными для продуктов Фт легких I и II и изоксазола (III) и тиофена (IV) («Spectrosc. Letters», 1984, 17, 401) и с учетом квантовохим. расчетов энергии изомеризации HCN, перехода $X^1\Sigma^+ \rightarrow A^1A''$, геометрии и колебат. частот HNC в этих состояниях, сделан вывод, что наблюдаемые в обл. 2500—3050 Å спектры продуктов Фт I—IV относятся к изомерной форме HNC(DNC). В спектре продуктов Фт дейтерированного II обнаружена прогрессия с началом 0,0 при 3042,2 Å, определена частота $\nu(\text{CN})$, равная 987 см^{-1} . Аналогичное колебание в спектре продуктов Фт легкого II лежит при 1005 см^{-1} , в основном электронном состоянии HCN данное колебание имеет частоту 2061 см^{-1} .

Г. М. Курамшина

Di, Me, N;

X. 1986, 19, N 14

Ommuck 14367

1982

97: 28886v Vapor pressures of some isotopic hydrogen cyanides. Appleton, Gerry T.; Van Hook, W. Alexander (Chem. Dep., Univ. Tennessee, Knoxville, TN 37996 USA). *J. Chem. Eng. Data* 1982, 27(3), 363-5 (Eng). Vapor pressures are reported for solid and liq. phases (approx. 230-300 K) of HCN, DCN, and HC^{15}N with a precision of about 0.8% for the solid and 0.2% for the liqs. The data are discussed in the context of the theory of isotope effects in condensed phases.

HC^{15}N
(K, M)

(P)

C.A. 1982, 97, N4

HCN
HCN⁺

meopen.
pacem

1982

97:188521a Hydrogen cyanide/hydrogen isocyanide versus HCN⁺/HNC⁺ - on the origin of stability reversal when passing from the neutral molecules to the cation radicals. Frenking, G.; Schwarz, H. (Inst. Org. Chem., Tech. Univ., D-1000 Berlin, Fed. Rep. Ger.). *Naturwissenschaften* 1982, 69(9), 446-7 (Ger). The reversal in the stability obsd. in interstellar space where HCN is more stable than HNC but HNC⁺ is more stable than HCN⁺ was studied by ab-initio MO calcs. The calcs. for ionization of the parent mols. indicate greater stability is achieved for HNC⁺ by localization of a lone-pair orbital at the C atom.

(+3)  HCN⁺, HNC, HNC⁺

C.A. 1982, 97, N 22

HCN(aq)

[Om. 15667]

1982

8 Б1590. Влияние ионной силы на константу диссоциации цианистого водорода. The influence of the ionic strength on the dissociation constant of hydrogen cyanide. G á s p á r V., Beck M. T. «Acta chim. Acad. sci. hung.», 1982, 110, № 4, 425—427 (англ.)

K_p ;

При 298 К потенциометрич. методом изучено влияние ионной силы I (0,1—5,0 М NaClO₄) на константу диссоциации (K_d) HCN в водн. р-рах. Установлено, что при $I=0,00$; 0,10; 1,00 3,00 и 5,00 значения pK_d соотв. равны 9,21, 9,06; 8,88; 8,81 и 8,78. А. С. Соловкин

X. 1983, 19, N8

HCN

[Dm. 15667] 1982

/ '98: 114688j The influence of the ionic strength on the dissociation constant of hydrogen cyanide. Gaspar, Vilmos; Beck, Mihaly T. (Inst. Phys. Chem., Kossuth Lajos Univ., H-4010 Debrecen, Hung.). *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* 1982, 110(4), 425-7 (Eng). The dissociation const. of HCN was detd. potentiometrically by using cyanide-selective and glass electrodes at 298 K and ionic strength 0.1-5.0 mol dm⁻³ (NaClO₄). The dissociation const. strongly increases with increasing ionic strength. There is a good agreement between the Debye-Hueckel theory and exptl. results.

Agucci;

C.A. 1983, 98, N14

HCN

1982

Грибов Л. А., Тавелозен-
ко А. И. и др.

Иометр. Оптика и спектро-
структ. скопия, 1982, 53, N5,
812-816.

(см. CO₂; III)

DCN

1982

Грибов Л. А., Тавлюженко

А. И. и др.

полн. Оптика и спектро-
структ. Скочин, 1982, 53, N 5,
812-816.

(ссыл. CO₂ ; III)

HCN

HCN

[Ommuck 15579]

1982

Nagata T., Kondow T.,
et al.,

фено-
гуакоу-
ацне

Chem. Phys., 1982,
72, N3, 281-285.

(mores)

HCN

[Ommuck 13992] 1982

96; 58804p Heat of formation of hydrogen isocyanide by ion cyclotron double resonance spectroscopy. Pau, Chin Fong; Hehre, Warren J. (Dep. Chem., Univ. California, Irvine, CA 92717 USA). *J. Phys. Chem.* 1982, 86(3), 321-2 (Eng). The threshold for deuteron abstraction from protonated DCN was detd. by pulsed ion cyclotron double resonance spectroscopy to be 14.8 ± 2 kcal/mol higher in enthalpy than the corresponding value for proton abstraction (i.e., proton affinity of HCN). Ignoring small effects, which arise from differences in isotopic substitution, this difference is a direct measure of the relative thermochem. stabilities of HCN and HNC.

$\Delta_f H^\circ$

C.A. 1982, 96, v 8

HCN

1983

Parushin E. B.

расчет
термод.
св-в
без м.п.

Deposited Dec. 1983,
VINITI 3580-83, 30pp.

( C₂H₄ ; $\frac{I}{\cancel{III}}$)

C:H:N

1984

12 Б4395 Деп. Термодинамический анализ процесса получения цианистого водорода и ацетиленов при пиролизе газоконденсата в азотной плазме. Приймак А. Д., Пархоменко В. Д., Валибеков Ю. В., Трусов Б. Г., Полак Л. С.; Ред. ж. «Химия высок. энергий» АН СССР. М., 1983. 17 с., ил. Библиогр. 9 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 21 марта 1984 г., № 1561—84 Деп.)

Проведено исследование термодинамики равновесного состава системы C:H:N. Получены результаты определения оптим. условий пиролиза газоконденсата в азотной плазме по т-ре, давл. и соотношениям C:H и C:N. На основе термодинамич. расчетов установлены минимально возможные энергозатраты на выход целевых продуктов, (ацетилена и цианистого водорода). Предложен пример расчета термодинамики разл. жидк. углеводородов в азотной плазме и проанализированы основные вопросы получения цианистого водорода и ацетилена плазмой. способом. Автореферат

X. 1984, 19, N 12

HCN⁺

(DM. 27359)

1985

HCN⁽²⁾

Boeck G., Köhler M.-J.,
Weiss C.,

Wiss. Z. Wilhelm-Pieck-
Univ., Rostock, 1985, Heft 9,
32-35.

Dr G,
Kb. sex.
paneth

(Ом. 22032)

1985

НСН (аф)

Белванцев В. И., Пелле-
вский В. И. и др.,

Кр;

Ал. Кеотам. химии,
1985, 30, N 9, 2231-
2236. ●

HCN

1987

16 Б3246. Определение константы диссоциации циановодородной кислоты. The determination of the dissociation constant of hydrocyanic acid / Başaran Betül // Chim. acta turc.— 1987.— 15, № 3.— С. 399—406.— Англ.

При 25° С потенциометрич. методом в водн. р-рах NaClO₄ с ионной силой 1,0 определена константа диссоциации HCN, равная $(1,12 \pm 0,01) \cdot 10^{-9}$. По резюме

Kc

X. 1989, N 16

HCN

1987

Yan Wenxing, Sun Ya-
ping.

S, Cp, Cv; Yingyong Kexue
Xuebao 1987, 5(1),
49-55.

($\text{C}_{22}\text{H}_4(\text{H})$; I)

HCN = HNC

om. 29891

1988

109: 43707x MBPT and coupled-cluster investigation of isomerization reactions: $\text{HCN} \langle = \rangle \text{HNC}$, $\text{BH}_3\text{CN}^- \langle = \rangle \text{BH}_3\text{NC}^-$, and $\text{HCNBH}_3 \langle = \rangle \text{HNCBH}_3$. Urban, Miroslav; Bartlett, Rodney J. (Quantum Theory Proj., Univ. Florida, Gainesville, FL 32611 USA). *J. Am. Chem. Soc.* 1988, 110(15), 4926-31 (Eng). Heats of isomerization of title processes and binding energies of BH_3 to HCN , HNC , and CN^- were investigated by using the 4th-order MBPT and CC methods. Correlation effects are essential in the quant. calcn. of reaction heats of isomerization for $\text{H}(\text{CN})$ and $\text{H}(\text{CN})\text{BH}_3$ and in binding energies of BH_3 toward HCN and HNC . Correlation effects are less important in reactions with the CN^- anion. Calcd. isomerization energies are 64, 42, and 9 kJ/mol for $\text{H}(\text{CN})$, $\text{BH}_3(\text{CN}^-)$, and $\text{H}(\text{CN})\text{BH}_3$ isomerizations, resp. The binding energies of BH_3 to HCN and HNC are 71 and 124 kJ/mol, resp., and the binding energies of BH_3 to CN^- and NC^- are 250 and 209 kJ/mol, resp. Geometries of $\text{H}(\text{CH})\text{BH}_3$ and $\text{BH}_3(\text{CN})^-$ isomers were detd. by the combination of MBPT(4) and gradient SCF methods.

Δ H up mepy.

(42)

C.A. 1988, 109, N 6

HCN-

1990.

114: 192928a Theoretical study of the isomerism of 1,2-hydrogen shift in HAB molecules and HAB⁺ ions with 10 valence electrons. Musaev, D. G.; Yakobson, V. V.; Charkin, O. P. (Inst. Nov. Khim. Probl., Chernogolovka, USSR). *Mol. Strukt.* 1990, 18-24 (Russ). Edited by Krasnov, K. S. Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst.: Ivanovo, USSR. The potential energy surfaces for 1,2-hydrogen shift isomerization of HAB mols. and HAB⁺ ions, where AB = CN⁻, CP⁻, SiN⁻, SiP⁻, BO⁻, BS⁻, AlO⁻, AlS⁻, N₂, CO, CS, SiO, and SiS, are calcd. by the SCG method by using 3-21GTO basis sets. The geometrical parameters and relative energies of the isomers, as well as the potential barriers for isomerization are also calcd. The results are compared with data for isomerization of analogous LiAB mols.

parent

un.

(42) ~~17~~

C.A.-1991, 114, N20

HCN^+

[OM. 34043]

1990

HNC^+

Petrie S., Freeman C.F.,
et al.,

(ΔH_f)

J. Amer. Chem. Soc.,
1990, 112, 7121-7126

HCN

1991

теоретическое
исследование

116: 67705r Theoretical study of isomerization of cyanic acid $\leftrightarrow$ isocyanic acid in the presence of lithium(1+), sodium(1+) and copper(1+) cations. Musaev, D. G.; Geskin, M.; Yakobson, V. V.; Charkin, O. P. (Inst. Nov. Khim. Probl., Chernogolovka, USSR). Zh. Neorg. Khim. 1991, 36(11), 2889-94 (Russ). The cation effect is studied on the potential energy surface, isomerization energy and barrier for $\text{HCN} \leftrightarrow \text{CNH}$ reaction using nonempirical methods for calcg. the mol. complexes $\text{L}^+.\text{NCH}$ ($\text{L} = \text{Li}, \text{Na}, \text{Cu}$). The isomerization energy changes within several kcal and the barrier increases from ~ 35 kcal to ~ 43 , ~ 48 , and ~ 72 kcal for $\text{Na}^+.\text{NCH}$, $\text{Li}^+.\text{NCH}$, and $\text{Cu}^+.\text{NCH}$, resp.

(73)

C.A. 1992, 116, n8



$\text{Na}^+.\text{NCH}$
 $\text{Li}^+.\text{NCH}$
 $\text{Cu}^+.\text{NCH}$

CNH

1991

Sana Michel, Leroy G.

J. Mol. Struct. Theochem.

M. R.,

1991. 226, N 3-4. C: 307-

325.

$\Delta_f H$

(Cm. ● LiH; ~~III~~)

HCN

1992

18 Б3181. Диссоциация цианистого водорода в водных растворах, содержащих различные ионные среды. Изучение комбинированным методом потенциометрии и ЯМР углерода-13. On the dissociation of hydrogen cyanide in aqueous solutions containing different ionic media. A combined potentiometric and carbon-13 NMR study / Bányai István, Blixt Johan, Glaser Julius, Tóth Imre // Acta chem. scand.— 1992.— 46, № 2.— С. 138—141.— Англ.

(Кс)

С помощью метода, комбинирующего потенциометрию и ЯМР ^{13}C , определены pK_a HCN при 25°C в водн. р-рах, содержащих соли в конц-ии а) 1 М NaClO_4 , б) 3 М LiClO_4 и в) 1 М NaClO_4 и 3 М LiClO_4 . Найденные pK_a равны, соотв., 9,09; 10,00 и 10,11. Обсуждаются преимущества комбинир. подхода по сравнению с методом, использующим только потенциометрию. С помощью полученных результатов и теории специфич. вз-вия рассчитаны pK_a HCN в водн. р-рах, содержащих др. ионные среды, и предсказано большинство pK_a , опубликованных в лит-ре. Нек-рые из последних расходятся с расчетными данными, и вероятно, ошибочны.

В. Я. Беспалов

Х. 1992, № 18

HCN(aq)

1992

18 Б3154. Изучение методом ЯМР углерода-13 динамики системы цианистый водород — вода. Dynamics in the hydrogen cyanide — water system. A carbon-13 NMR study / Bányai István, Blixt Johan, Glaser Julius, Tóth Imre // Acta chem. scand.— 1992.— 46, № 2.— С. 142—146.— Англ.

Методом ЯМР ^{13}C определены константы скорости протонного обмена в водн. р-рах HCN при 25°C . Обмен подчиняется ур-нию $dx/dt = k_0x + k_1x[\text{OH}^-] + k_2x[\text{CN}^-]$, где $x = [\text{HCN}]$ и в 1 М NaClO_4 (соотв., 3 М LiClO_4) $k_0 = 38,7$ (32,9) с^{-1} , $k_1 = 3,5 \cdot 10^9$ ($3,3 \cdot 10^8$) и $k_2 = 3,1 \cdot 10^6$ ($2,0 \cdot 10^6$) $\text{М}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$. В фосфатном буфере ур-ние следует дополнить членами $k_{p0}x[\text{PO}_4^{3-}] + k_{p1}x[\text{HPO}_4^{2-}] + k_{p2}x[\text{H}_2\text{PO}_4^-]$, где $k_{p0} = 1,3 \cdot 10^9$, $k_{p1} = 3,7 \cdot 10^5$ и $k_{p2} = 1,7 \cdot 10^3$ $\text{М}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$ в 1 М NaClO_4 . Параметры активации р-ции $\text{HCN} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{CN}^- + \text{H}_3\text{O}^+$ найдены равными $\Delta H^\ddagger = 45 \pm 4$ кДж/моль и $\Delta S^\ddagger = -64 \pm 12$ Дж/(град·моль). В. Я. Беспалов

X. / 992, N 18

HCN

1992

16 Б3022. Стандартные энтальпии образования цианида водорода и трицианофосфина, рассчитанные неэмпирическим методом молекулярных орбиталей. The standard enthalpies of formation of hydrogen cyanide and tricyanophosphine by ab initio molecular orbital calculation /Gardner Peter J. //Thermochim. acta .—1992 .—205 .—С. 65—73 .—Англ.

Неэмпирическим методом МО рассчитаны станд. энтальпии образования цианида водорода и трицианофосфина. Полученные для 298,15 значения $\Delta_f H^\circ(\text{HCN}, g) = 137 \pm 10$ кДж·моль⁻¹ и $\Delta_f H^\circ[\text{P}(\text{CN})_3, g] = 493 \pm 15$ кДж·моль⁻¹ сравнены с имеющимися эксперим. данными. Предложено разрешение дискуссии, касающейся величины $\Delta_f H^\circ[\text{P}(\text{CN})_3, g]$. В. Ф. Байбуз

 (ΔH_f)
 Δ
(H)

 $\text{P}(\text{CN})_3$

X. 1993, № 16

HCN

1992

117: 199500a The standard enthalpies of formation of hydrogen cyanide and tricyanophosphine by ab initio molecular orbital calculation. Gardner, Peter J. (R. Holloway Bedford New College, Univ. London, Egham/Surrey, UK TW20 0EX). *Thermochim. Acta* 1992, 205, 65-73 (Eng). The heats of formation at 298.15 K for HCN and $P(CN)_3$, in gaseous state, were calcd. by the ab initio method. The calcd. values agree with the best available literature (exptl.) data.

$\Delta_f H$, meop.
pavem

(4) $P(CN)_3$

C.A. 1992, 117, N20

HCN

1992

17 Б3036. Гетеро-тримеры HF и HCN: значительное влияние изомерии на термодинамику. Hetero-trimers of HF and HCN: substantial isomerism effects on thermodynamics /Slanina Zdeněk //Thermochim. Acta. —1992 .—198 ,№ 1 .—С. 53—60 .—Англ.

Системы $2\text{HF}-\text{HCN}$ и $\text{HF}-2\text{HCN}$ рассмотрены как равновесные смеси трех изомерных структур. С использованием сумм по состояниям рассчитаны равновесные молярные доли изомеров и т. наз. вклады изомерии в энтальпию, энтропию и C_p . Показано, что в обеих изомерных системах имеет место взаимный обмен энергий относит. устойчивости. Вклад изомерии в C_p для системы $2\text{HF}-\text{HCN}$ может достигать значит. величины (до 45% всей теплоемкости).

В. Ф. Байбуз

(Kp)

X. 1993, № 17

HCN

1996

125: 258226f The total atomization energy and heat of formation of HCN(g). Martin, Jan M. L. (The Institute of Chemistry, The Hebrew University of Jerusalem, Givat-Ram, 91904 Jerusalem, Israel). *Chem. Phys. Lett.* 1996, 259(5,6), 679-682 (Eng). An exhaustive ab initio convergence study, using coupled cluster methods and basis sets of up to [7s6p5d4f3g2h/5s4p3d2f1g] quality, of the total atomization energy of HCN(g), both directly and via the isogyric reaction $2 \text{HCN} = \text{C}_2\text{H}_2 + \text{N}_2$, leads to a best est. of $\sum D_0 = 303.08 \pm 0.25$ kcal/mol, in between thermochem. and spectroscopic exptl. values. The best est. for $\Delta H^\circ_f = 31.04 \pm 0.25$ kcal/mol, or 129.9 ± 1 kJ/mol.

 $(\Delta_f H^\circ)$ C. A. 1996, 125, N 20

HCN(2)

1996

20Б143. Полная энергия атомизации и теплота образования HCN(g). The total atomization energy and heat of formation of HCN(g) / Martin Jan M. L. // Chem. Phys. Lett.— 1996.— 259, № 5-6.— С. 679-682.— Англ.

Неэмпирическим методом связанных кластеров с учетом одно-, двух- и трехкратных возбуждений и с использованием корреляционно-согласованных поляризационных базисов (вплоть до $[7s6p5d4f3g2h/5s4p3d2f1g]$) рассчитана полная энергия атомизации HCN в газовой фазе как непосредственно, так и с помощью изогирической реакции $2\text{HCN} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_2 + \text{N}_2$. Наиболее точное рассчитанное значение этой величины, равное $303,08 \pm 0,25$ ккал/моль, лежит между соответствующими термодим. и спектроскопическими значениями. Для теплоты образования молекулы получено значение, равное $31,04 \pm 0,25$ ккал/моль.

Н. С.

$\Delta_f H$

21

X. 1997, № 20

МСН (сд)

1996

5Б323. Термодинамика цианида. III. Энтальпии и энтропии ионизации воды и цианида водорода. Cyanide thermodynamics. III. Enthalpies and entropies of ionization of water and hydrogen cyanide / Solis Jose S., May Peter M., Hefter Glenn // Austral. J. Chem.— 1996.— 49, № 6.— С. 651—657.— Англ.

С помощью калориметрич. титрования определены изменения энтальпии, связанные с ионизацией воды и цианида водорода при $t = 25^\circ\text{C}$ как ф-ции ионной силы в р-рах NaCl и NaClO_4 . Изменения энтальпии более положительны в NaCl по сравнению с NaClO_4 , и это различие становится более заметным с увеличением ионной силы. Этот эффект объяснен большей сольватацией Cl^- по сравнению с CN^- в водн. р-рах. Полученные значения энтальпий ионизации в сочетании с лит. данными по константам устойчивости использованы для расчета энтропий ионизации H_2O и HCN как ф-ций ионной силы. Библи. 53. В. Ф. Байбуз

ΔH

X.1997, №5

HCN

1996

125: 258217d Cyanide thermodynamics. III. Enthalpies and entropies of ionization of water and hydrogen cyanide. Solis, Jose S.; May, Peter M.; Hefter, Glenn (Dep. Chem., Murdoch Univ., Murdoch, 6150 Australia). *Aust. J. Chem.* 1996, 49(6), 651-657 (Eng). The heats (enthalpy changes) assocd. with the ionization of water and of hydrogen cyanide have been detd. by titrn. calorimetry at 25°C as a function of ionic strength up to 5 M in both NaCl and NaClO₄ media. The enthalpy changes for both reactions exhibit a 'medium effect' with ΔH being more pos. in NaCl than in NaClO₄ and with the difference becoming more pronounced with increasing ionic strength. This is attributed to the greater solvation of Cl⁻ cf. CN⁻ in aq. soln. The present ΔH values are similar to previous literature values at infinite diln. The present ΔH values were combined with literature stability const. data to calc. the corresponding entropies for the ionization of H₂O and HCN as a function of ionic strength.

(ΔH_{ioniz}
 ΔS_{ioniz})

C. A. 1996, 125, N 20

МСН (29)

1996

У 18Б373. Эмпирическая модель для определения плотности и вязкости синильной кислоты / Трусов Н. В., Дмитриев Н. М., Гринь Г. И. // Изв. вузов. Химия и хим. технол.— 1996.— 39, № 6.— С. 14-17.— Рус.

Методами математической статистики обработаны эксперим. данные различных исследователей и выведены эмпирические уравнения зависимости плотности и вязкости синильной к-ты от ее конц-ии и температуры.

X. 1997, N 18

1997

F: HNC

P: 3

22Б1409. Инфракрасная спектроскопия поглощения HNC в интервале от 2,6 до 3,1 мкм. Infrared absorption spectroscopy of HNC in the region 2,6 to 3,1 Mm / Northrup F. J., Bethardy G. A., Glen Macdonald R. // J. Mol. Spectrosc. - 1997. - 186, 2. - С. 349-362. - Англ.

ФЖХ, 1998, №22

F: HCN

P: 3

1997

22Б178. Двойное многочастичное разложение поверхности потенциальной энергии для основного состояния HCN, основанное на реалистичных дальнедействующих силах и точных неэмпирических расчетах. Double many-body expansion potential energy surface for ground-state HCN based on realistic long range forces and accurate ab initio calculations / Varandas A. J. C., Rodrigues S. P. J. // J. Chem. Phys. - 1997. - 106, 23. - С. 9647. - Англ.

Проведено двойное многочастичное разложение поверхности потенциальной энергии (ППЭ) основного состояния HCN (I) с использованием реалистичных дальнедействующих сил и данных точных неэмпирических расчетов ППЭ в окрестности реакции $I \leftrightarrow \text{'CNH (II)}$. Проанализированы топологические характеристики полученной глобальной ППЭ и рассчитаны колебательные частоты в минимумах, характеризующих поверхности изомеров I и II.

ЖХХ, 1998, №22.

HNC⁺
HNC

(Om 39397)

1998

(M.X.)



⑦ CF₃⁺
C.A. 1998,

129: 250930t Thermochemistry of HNC, HNC⁺, and CF₃⁺. Hansel, A.; Scheiring, Ch.; Glantschnig, M.; Lindinger, W.; Ferguson, E. E. (Institut für Ionenphysik, Leopold Franzens Universität Innsbruck, A-6020 Innsbruck, Austria). *J. Chem. Phys.* 1998, 109(5), 1748-1750 (Eng), American Institute of Physics. In the course of mechanistic studies on HCN⁺ isomerization in reaction with CO and CO₂, the authors have fortuitously detd. the heats of formation of HNC and HNC⁺ with good precision. The uncertainty is the uncertainty in the heat of formation of HCN, ± 1 kcal mol⁻¹. This appears to be the first precise exptl. detn. of these energies. Several prior theor. calcns. have produced reasonable energy values. The authors also obsd. the reaction of HCN⁺ with

CF₄ to be slightly endothermic, which allows the detn. of an upper limit on the threshold energy for CF₄ - CF₃⁺ + F of 14.28 eV, in excellent agreement with several prior detns. but in sharp disagreement with the most recent detn.

129, N19

HNC

[Om. 40515]

2000

Paul F. Wenthold⁺,

Δ 5/4

J. Phys. Chem., 2000,
A104, 5612-16.

HNC

2000

132: 326537e Experimental Enthalpy of Formation of Isonitrile from Collision-Induced Dissociation Threshold Energy Measurements. Wenthold, Paul G. (Department of Chemistry, Purdue University, est Lafayette, IN 47907-1393 USA). *J. Phys. Chem. A* 2000, 104(23), 5612-5616 (Eng), American Chemical Society. The enthalpy of formation of HNC was detd. by using collision-induced dissociation threshold measurements with protonated nitriles. The av. value obtained using five different nitrile precursors is 49.7 ± 2.9 kcal/mol, which agrees with the previously reported exptl. value after accounting for revisions in the proton affinity scale. While the main dissociation pathway for all ions is found to be simple cleavage, the protonated propionitrile and acrylonitrile ions also dissociate by formation of HCNH^+ formed by intramolecular proton transfer.

($\Delta_f H^\circ$)

C.A. 2000, 132, N24

HCN
HNC

[Om 41 620]

2002

Barber R.J. et al;

J. Chem. Phys., 2002,
117, N24, 11239-11243

Temperature de  pendant par-
tition functions and equi-

librium constant for
HCN and HNC.

