

C-N-H-O - collection

1991

114: 151595w Enthalpies of combustion of 2,4,6-trimethylbenzonitrile, 2,4,6-trimethylbenzonitrile N-oxide, 2,6-dimethylbenzonitrile, 2,4,6-trimethoxybenzonitrile, and 2,4,6-trimethoxybenzonitrile N-oxide: the dissociation enthalpies of the (N-O) bonds. Acree, W. E., Jr.; Tucker, Sheryl A.; Zvaigzne, Anita I.; Yang, Mengyan; Pilcher, G.; Ribeiro da Silva, Maria D. M. C. (Dep. Chem., Univ. North Texas, Denton, TX 76203-5068 USA). *J. Chem. Thermodyn.* 1991, 23(1), 31-6 (Eng). The std. ($p^\circ = 0.1$ MPa) molar enthalpies of combustion at 298.15 K were measured by static-bomb calorimetry and the std. molar enthalpies of sublimation at 298.15 K were measured by microcalorimetry. From the std. molar enthalpies of formation of the gaseous compds., the molar dissocn. enthalpies of the (N-O) bonds were derived: $D(N-O)$ /(kJ/mol): trimethylbenzonitrile N-oxide, (222.2 ± 4.6) ; trimethoxybenzonitrile N-oxide, (232.8 ± 3.8) .

(ΔH_f° , $\Delta_c H^\circ$,
memorandum)

C.A. 1991, 114, N16

C-N-H-O

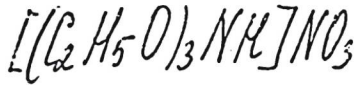
1991

ЗТБ3147. Исследование фенолов [с помощью] ДТА. IV. Нитро- и аминифенолы. A DTA study of phenols IV. Nitro- and amino-phenols / Buckman N. G., Hill J. O., Magee R. J. // J. Therm. Anal.— 1991.— 37, № 1.— С. 95—110.— Англ.; рез. нем.

Методами ДТА и термич. микроскопии изучено термич. поведение 8 нитрофенолов, 8 аминифенолов, а также пр-ных п-фенилазобензоилхлорида, п-нитробензоилхлорида, и 3,5-динитробензоилхлорида, полученных нагреванием смесей фенола и хлорангидрида. Т-ры пиков ДТА соответствуют след. превращениям: т. пл. исходных в-в фенолов и хлорангидрида, т-ре образования пр-ного в-ва, т. пл. и т. разл. пр-ного в-ва. Эксперим. данные интерпретированы в рамках перв. электронных эффектов и втор. стерич. эффектов, а также образования Н-связей между исходными веществами.

Л. Г. Титов

X. 1991, № 21



1991

Choi C.S., Schroeder F., et al.,

J. **Therm.** Anal. 1991, 37(11-12),

(T_m) 2525-39.

Thermodynamic properties of aqueous
solutions of ammonium nitrate
salts. (Cu.  $\frac{1}{5}(MONH_3)NO_3; I)$

1991



De Petris G., Di Marzio A.
et al.,

$\Delta_f H$, w.n. *J. Phys. Chem.* 1991. 95,
N 24. C. 9782-9787.

(see $\bullet$ H_2NO_2^+ ; 7)

C-N-H-O

1991

V 3 Б3021. Термическое разложение материалов для энергетики. 47. Изучение связывания типа «триггер» в нитраминотетразолах и нитрамино-1,2,4-триазолах с высоким содержанием азота. Thermal decomposition of energetic materials. 47. A trigger linkage study of high-nitrogen content nitraminotetrazoles and nitramino-1,2,4-triazoles / Gao A., Rheingold A. L., Brill T. B. // Propellants, Explos., Pyrotechn.— 1991.— 16, № 3.— С. 97—104.— Англ.; рез. нем., фр.

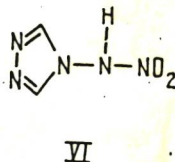
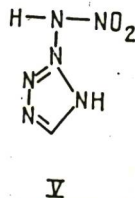
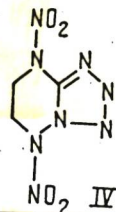
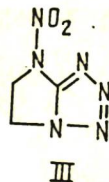
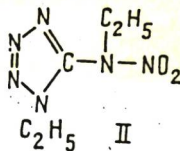
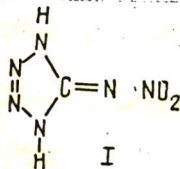
Методом ДСК с высокой ($70^{\circ}\text{C}/\text{с}$) и низкой ($5^{\circ}\text{C}/\text{мин}$) скоростями нагрева изучено термич. разложение. Изучены также ИК-спектры I и IV и их крист. структура рентгенографич. методом. Табулированы найденные параметры решеток и межатомные расстояния в I и IV. При низких скоростях нагрева величины t_p и $\Delta_r H$ Дж/г разложения составили для I 119°C и 3520; II 115°C и 1250; III 152°C и 2836; IV 91°C и 3277; V 221°C и 2950; VI 167°C и 1230. Обсуждены

продукт
обли

(ΔH, терм.
параметры)

X. 1992, № 3

особенности разложения изученных в-в, указано, что нитраминная часть молекулы инициирует разложение во всех случаях кроме I, в к-ром тетразольный цикл является «триггером» разложения. Указано, что в IV связь N—NO₂ более длинная, чем обычно в нитраминах, а также, что I является скорее нитриминном, чем нитраминном. Пред. сообщ. см. // Combust. Flame.— 1991.— 83.— С. 345. Ж. Г. Василенко



1991
 $C_7 H_{11} O_4 N_3$ Герасимов Т. А.,
Гударева А. В. и др.
Кузбас. политехн. ин-т.
Кемерово, 1991. 12 с. Библ-
лиогр.: 9 назв. Рус. Деп. в
Фед. ИЦПТЭХИМа и Чер-
касск ● 23.04.91, № 201-
хп 91.

4 H_f

(corr. $C_7H_5O_4; \underline{T}$)

C7N3H5O6

1991

20 БЗ095. Кинетика фазового перехода в 2,4,6-тринитротолуоле / Головина Н. И., Титков А. Н., Раевский А. В., Атовмян Л. О. // Хим. физ.— 1991.— 10, № 5.— С. 664—671.— Рус.

При разных условиях роста кристаллов тринитротолуола получены три полиморфные модификации (I, II, III). Для I и II проведено полное рентгеноструктурное исследование и показано, что они являются политипами. Обе изученные структуры приведены к ромбич. кристаллу, перпендикулярно направлению (а) к-рого при сравнении структур можно выделить чередующиеся слои равной толщины (20,941 Å) с совпадающей и несовпадающей укладкой молекул (совпадающие и несовпадающие слои). В несовпадающих слоях модификаций I и II положения центров тяжести молекул одинаковы, а сами молекулы относятся друг к другу как зеркальные антиподы. На поликристаллич. образцах исследован фазовый переход I→II в интервале т-р 55—75°С в изотермич. условиях. Определена эффективная энергия активации (85 ± 10 ккал/моль) скорости процесса. Обсуждается механизм фазового перехода.

(Tt2)

X. 1991, N 20

C7NK9 02

1991

(ХИМПРОМЕТУР АКУРАТИ)

115: 58363o Determination of thermodynamic properties of nitromethylaniline isomers in SE-30 and SE-54 stationary phases by capillary gas chromatography. Guan, Zhenxi; Wang, Zhenggang; Fu, Ruonong (Dep. Chem. Eng., Beijing Inst. Technol., Beijing, Peop. Rep. China). *Wuli Huaxue Xuebao* 1991, 7(2), 169-73 (Ch). A relationship between the thermodyn. properties and the retention values of capillary gas chromatog. is proposed. The thermodyn. properties of nitromethylaniline isomers on crosslinking SE-30, SE-54 and noncrosslinking SE-54 fused silica capillary columns were calcd. and the results are interpreted qual.

метрол.
сб - 102

C.A. 1991, 115, N 6

$N(CH_3)_4O_3$
 $N(C_2H_5)_4O_3$

1991

9 В10. Новые ионные озониды: синтез, структуры и свойства $N(CH_3)_4O_3$ и $N(C_2H_5)_4O_3$. New ionic ozonides: Syntheses, structures, and properties of $N(CH_3)_4O_3$ and $N(C_2H_5)_4O_3$ / Hesse Werner, Jansen Martin // Inorg. Chem.— 1991.— 30, № 23.— С. 4380—4385.— Англ.

Отмечено, что в отличие от известных озонидов щел. металлов, озониды тетраалкиламмония не образуются в р-ции озона с соотв-щими пероксидами вследствие окисляемости катиона. Озониды NMe_4O_3 (I) и NEt_4O_3 (II) синтезированы по новой методике, включающей двойную р-цию соотв-щих пероксидов с озонидами щел. металлов в жидк. аммиаке. Выполнен РСТА I и II [219 и 1437 отражений с $F_0 > 2\sigma(F_0)$, $R = 0,078$ и $0,046$, $R_w = 0,035$ и $0,025$ соотв.]. I ромбич., a 850,96 (25), b 689,95 (32), c 544,39 (16) пм, ρ (расч.) 1,269 г/см³, $Z=2$, пр. гр. $R\bar{3}m$. II тригон., a 706,60 (15), c 1752,60 (43) пм, ρ (расч.) 1,171 г/см³, $Z=3$, пр. гр. $R\bar{3}21$. Структура I характеризуется взаимосвязанностью с структурой типа CsCl, в то время как струк-

структура
и

св - ва

Х. 1992, № 9

турный тип II ближе к структуре NaCl. В обеих структурах обнаружены Н-связи C—H...O (подтверждено ИК-спектроскопич. изучением озонидов). Методами масс-спектропии и термич. анализа (ДТА и ТГ) изучено разл. I и II. Установлено два различных механизма разл., обусловленных отсутствием и наличием β -водородных атомов в I и II соотв. Отмечена высокая устойчивость I; озонид разлагается при т-рах, превышающих 75° С. Вследствие высокой р-римости озонидов в обычных орг. р-рителях, в частности, в ацетонитриле, I и II представляют интерес для препаративной химии, включающей ионные озониды.



NC-CH₂COOL¹⁵⁹¹

1591. Теплоемкость этилового эфира циануксусной кислоты / Исхаков Б. Г., Исмаилов Т. С., Ходжаева М. Г., Игамбердыев Х. Т., Мамадалимов А. Т. // Инж.-физ. ж.— 1991.— 61, № 3.— С. 427—430.— Рус.; рез. англ.

В интервале t -р 90—300 К измерена теплоемкость этилового эфира циануксусной к-ты (I). В условиях быстрого охлаждения ($v=0,15$ К/с) от 300 до 77 К зависимость $C_p(T)$ имеет две аномальные области. При 160 К наблюдается резкий рост C_p , отвечающий плавлению стеклообразной структуры I. Нагревание этой переохлажд. метастабильной жидкости приводит к самопроизвольной кристаллизации при 175 К. Вторая аномалия связана с плавлением крист. I при $T_{fus}=247$ К. При медленном охлаждении ($v \approx 2 \cdot 10^{-5}$ К/с) на кривой $C_p(T)$ фиксируется только одна аномалия при T_{fus} . С шагом 10 К в интервале t -р 90—300 К табулированы значения C_p , $H_T^0-H_0^0$, S_T и Φ_T . Для крист. I они составили соотв.: 90 К 79,58; 1805,76; 66,76 и 46,69; 247 К 155,25; 20703,41; 183,43 и 99,61; для жидк. I: 247 К 213,98; 32483,54; 231,12 и 99,61; 300 К 222,04 Дж/моль·К; 44038,31 Дж/моль; 275,33 и 128,53 Дж/моль·К. А. С. Гузей

C_p
(90-300K)

X.1992, n 9

C-N-H-O-coordination

1991

115: 167845j Standard enthalpy of formation of several onium salts of hyponitric and hyponitrous acids. Kirpichev, E. P.; Rubtsov, Yu M.; Sorokina, T. V.; Shirokova, G. N.; Aleshin, V. V.; Rosolovskii, V. Ya. (Inst. Nov. Khim. Probl., Chernogolovka, USSR). *Zh. Neorg. Khim.* 1991, 36(7), 1772-7. (Russ). An adiabatic mass calorimeter was used to measure the heats of soln. in water of $(\text{CN}_3\text{H}_6)_2\text{N}_2\text{O}_2$ (I), $(\text{CN}_3\text{H}_6)_2\text{N}_2\text{O}_3$ (II) and $(\text{CN}_4\text{H}_7)_2\text{N}_2\text{O}_3$ (III). The heats of combustion of these compds. were also measured, by using a bomb calorimeter in an atm. of oxygen. The results were used, in combination with appropriate literature values, to calc. the std. heats of formation of these salts and of the cation CN_4H_7^+ in aq. soln.

C.A. 1991, 115, N16

$(\text{CN}_3\text{H}_6)_2\text{N}_2\text{O}_2$

1991

22 БЗ020. Стандартные энтальпии образования некоторых органических солей азотистой и азотистой кислот / Кирпичев Е. П., Рубцов Ю. М., Сорокина Т. В., Широкова Г. Н., Агешин В. В., Росоловский В. Я. // Ж. неорганич. химии.— 1991.— 36, № 7.— С. 1772—1777.— Рус.

С использованием качающегося массивного калориметра с адиабатич. оболочкой измерены теплоты р-рения $\Delta_{\text{sol}}H^0$ в воде соединений крист. $(\text{CN}_3\text{H}_6)_2\text{N}_2\text{O}_2$ (I), $(\text{CN}_3\text{H}_6)_2\text{N}_2\text{O}_3$ (II) и $(\text{CN}_4\text{H}_7)_2\text{N}_2\text{O}_3$ (III) равные соотв.: для I—III $40,3 \pm 0,8$; $16,6 \pm 0,5$ и $40,5 \pm 2,1$ кДж/моль. На основе полученных значений $\Delta_{\text{sol}}H^0$ и соотв-щих лит. величин $\Delta_f H^0$ ионов вычислены значения станд. $\Delta_f H^0$ I и II: $337,3 \pm 8,5$ и $387,5 \pm 4,4$ кДж/моль. Для подтверждения полученных величин $\Delta_f H^0$ соединений I и II и определения ΔH^0 соединения III проведены эксперименты по сжиганию этих образцов в калориметрич. бомбе в атмосфере кислорода с применением калориметра В—06—II. По указанному методу получено $-\Delta_f H^0$ для I—III $336,0 \pm 3,3$; $387,3 \pm 3,4$; $174,9 \pm 3,2$ кДж/моль. Проведена оценка $-\Delta_f H^0$ катиона CN_4H_7^+ в водн. р-ре: $21,7 \pm 2,9$ кДж/г-ион. Методом сравнит. расчета получе-

$\Delta H_{\text{sol}}, \Delta H_f$

ж. 1991, № 22

ны значения $\Delta_f H^0$ нек-рых щелочных солей азотноватой
и азотноватистой кислот.



P-N-H-O coexistences

1991

115: 16464h Thermochemistry of *N,N'*-acetylmethylcarbamide and *N,N*-dimethylbenzamide. Ryskalieva, A. K.; Abramova, G. V.; Nurakhmetov, N. N.; Erkasov, R. Sh. (Kaz. Gos. Univ., Alma-Ata, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1991, 65(4), 1068-70 (Russ). Results are presented of calorimetric studies on amides. The heats of combustion of *N,N*-dimethylbenzamide and *N,N'*-acetylmethylcarbamide were detd. and the std. heats of formation were derived.

(ΔH_{comb} , ΔH_f)

C.A. 1991, 115, N 2.

C-N-N-O соединения

1991

17 Б3045. Термохимия N,N'-ацетилметилкарбамида и N,N-диметилбензамида / Рыскалиева А. К., Абрамова Г. В., Нурахметов Н. Н., Еркасов Р. Ш. // Ж. физ. химии.— 1991.— 65, № 4.— С. 1069—1070.— Рус.

Описаны методика и результаты калориметрич. исследований амидов в усовершенствованном калориметре сгорания В-08-МА с изотермич. оболочкой. На основе эксперим. значений $\Delta_c H^0$ рассчитаны станд. энтальпии образования замещ. карбамида и бензамида при 298 К, равные соотв. $-153,87 \pm 1,02$ и $-563,10 \pm 2,28$ кДж/моль.

(ΔH_f)

Х. 1991, № 17

$\text{CO}(\text{NH}_2)_2$

1991

) 23 Б3166. Моделирование и расчет равновесного процесса синтеза мочевины. Modelling and simulation of the urea synthesis process at equilibrium /Siminiceanu H., Petrilă C. //Stud. Univ. Babeş-Bolyai. Chem. .—1991 .—36, № 1-2 .—С. 114—122 .—Англ.

Предложена мат. модель процесса синтеза мочевины, основанная на трех ур-ниях, существующих в системе газо-жидкостных фазовых равновесий и на двух ур-ниях хим. р-ций в жидк. фазе. Модель позволяет предсказать истинный состав равновесных жидк. и газ. фаз, а также эволюция давл. системы при условии знания двух независимых переменных: т-ры и мол. отношений NH_3/CO_2 (а) и $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ (b). Сопоставление расчетных данных с результатами экспериментов на пром. и лабор. установке показали, что модель действует в диапазоне т-р 170—210° С и величин $a=2,0-6,0$ и $b=0,0-1,2$. В. А. Ступников

(Кр)

Х. 1994, № 23

$\text{CO}_2 \cdot \text{HCN}$

1991

4 Б3086. Расчетная оценка термодинамики ассоциации системы $\text{CO}_2 \cdot \text{HCN}$: значение низкотемпературной изомеризации. [Сообщение] XIV. A computational evaluation of the $\text{CO}_2 \cdot \text{HCN}$ associating system thermodynamics: considerable low temperature isomerism manifestations / Slanina Zdeněk // Thermochim. acta.— 1991.— 186, № 1. — С. 35—42.— Англ.

$(\Delta H, \Delta S)$

На основе предложенного ранее (см. // Z. Slanina: Contemporary Theory of Chemical Isomerism. Academia and Rendel, Prague and Dordrecht.— 1986) подхода оценено изменение величин ΔH , ΔS и ΔC_p при разных т-рах в газофазных процессах образования из CO_2 и HCN кластера $\text{CO}_2 \cdot \text{HCN}$, имеющего два изомера: линейный OCONHCN (I) и T-образный O_2CNCH (II). Графически представлены т-рые зависимости термодина-

X. 1992, NY

мич. параметров. Рассчитаны разными методами и табулированы значения ΔS и ΔH образования изомеров и изменения δC_p смеси изомеров по отношению к C_p наиболее стабильного изомера при т-рах, при к-рых наблюдаются максимумы δC_p или образуются эквимол. смеси изомеров. Наибольшее значение δC_p , равное 6,99 кДж/моль при т-ре 4,4 К, получено при расчете методом 4-31G. Указано, что хотя I имеет более низкое значение потенциальной энергии по отношению к II, учет ротационно-вибрац. вклада в величину C_p показывает, что при низких и даже средних т-рах I становится менее стабильным.

Ж. Г. Василенко

CO₂ · HCN

1991

115: 241233b A computational evaluation of the carbon dioxide-hydrogen cyanide associating system thermodynamics: considerable low temperature isomerism manifestations. Slanina, Zdenek (Max-Planck-Inst. Chem., Mainz, Fed. Rep. Ger.). *Thermochim. Acta* 1991, 186(1), 35-42 (Eng). The CO₂-HCN system is studied as a superspecies composed of the linear OCO.HCN and T-shaped O₂C.NCH structures. The temp. interplay of both structures is treated in terms of partition functions supplied with parameters from recent computational data. The linear species (though lower in potential energy) can even become less stable than the T-shaped structure in the region of low or medium temps. The relative-stability interplay is also obsd. in the temp. behavior of isomerism contributions to thermodyn. functions. The isomerism contribution to heat capacity exhibits a temp. max. at very low temps. with max. height less than equal to 7 J/K.mol. The temp. max. is not conserved in the corresponding overall terms, although some irregularities also exist in their temp. course.

(p)

C.A. 1991, 115, N 242

$\text{CO}_2 \cdot \text{HCN}$

1991

115: 263839f Carbon dioxide-hydrogen cyanide complex system: temperature-dependent coexistence of linear and T-shaped structures. Slanina, Zdenek; De Almeida, Wagner B. (Max-Planck-Inst. Chem., Mainz, Fed. Rep. Ger.). *THEOCHEM* 1991, 81(1-2), 51-6 (Eng). The $\text{CO}_2\text{-HCN}$ complex system, composed of the linear OCO.HCN and T-shaped $\text{O}_2\text{C.NCH}$ structures, is described on the basis of recent ab initio data. The temp. interplay of both structures is studied in terms of partition functions. In spite of being favored by the potential energy term, the linear species can become less stable than the T-shaped structure at low or medium temps. In any case a close coexistence of both species is to be expected at moderate temps. For the first time a double relative-stability interchange is obsd. in one of the energy treatments.

См. также
в - ба

C. A. 1991, 115, N 24.

(CH₃)₂NCONHCH₃

1992

17 Б3142. Энтальпии растворения триметилмочевины в воде и в N, N-диметилформамиде. Enthalpies of solution of trimethylurea in water and in N,N-dimethylformamide /Della Gatta G., Somsen G. //Thermochim. acta .—1992 .—200 .—С. 41.—45 .—Англ.

С использованием вращающегося калориметра типа Тиана—Кальве измерены энтальпии р-рения триметилмочевины в воде при 298,84 и 316,95 К и в ДМФА при 298,15 К. Для энтальпии р-рения при бесконечном разбавлении при 298,15 К в воде и в ДМФА получены значения —(1,67±0,13) кДж/моль и (15,23±0,17) кДж/моль соотв. Полученные результаты в сочетании с лит. данными для др. метилзамещ. мочеви́н показали, что энтальпия сольватации метилзамещ. мочеви́н содержит аддитивные вклады от метильных групп. В. Ф. Байбуз

(DMF)

Х. 1993, № 17

~~C-N-O~~

C-N-H-O соедин. 1992

370 Ha

С, А В м
м. ф. 2.

Δ
(H)

X. 1993, N 15

15 Б3040. Термодинамические свойства оксима циклогексанона. Thermodynamic properties of cyclohexanone oxime /Kozyro A. A., Kabo G. J., Krouk V. S., Sheiman M. S., Yursha I. A., Simirsky V. V., Krasulin A. P., Sevruk V. M., Gogolinsky V. I. //J. Chem. Thermodyn. —1992. —24, № 8. —С. 883—895. —Англ.

Методами вакуумной адиабатич. калориметрии и тройного теплового моста измерена теплоемкость крист. и жидк. оксима циклогексанона (I) при t -рах 6—450 К, а с использованием различных эксперим. методов определены и др. термодинамич. и термохим. св-ва I. Получено: $T_{fus}=362,5$ К, $\Delta_{fus}H_m^0=12,7\pm 0,3$ кДж·моль⁻¹, для крист. I при t -рах 287,9—348,3 К $\ln P(\text{Па})=(33,307\pm 0,255)-(9607\pm 80)/T$, $\Delta_{sub}H_m(298,15 \text{ К})=78,32\pm 0,3$ кДж·моль⁻¹, для жидк. I при t -рах 370,9—446,3 К $\ln P(\text{Па})=(26,469\pm 0,130)-(7151\pm 55)/T$ и $\Delta_{vap}H_m(409,2 \text{ К})=59,46\pm 0,46$ кДж·



C-N-H-O (2) (м. ф. 2.)

$\cdot \text{моль}^{-1}$, $S_m(g, 320 \text{ K}) = 371,53 \pm 1,03 \text{ Дж} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{моль}^{-1}$,
 $\Delta_f H_m^0(cr, -298,15 \text{ K}) = -153,20 \pm 2,34$, $\Delta_f G_m^0(cr, 298,15 \text{ K}) =$
 $= 75,11 \pm 2,48 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$, $C_p(I, s' 300-340 \text{ K}) = -143,81 \pm$
 $\pm 1,6984T - 1,8334 \cdot 10^{-3}T^2$ и $C_p(I, l' 380-430 \text{ K}) = 214,30 +$
 $+ 0,1900 \text{ Дж/моль} \cdot \text{K}$. Рассчитаны и приведены в таблицах
 стандартные термодинамич. ф-ции для I в конденс. со-
 стоянии при t -рах 0—450 K и для газ. I при температурах
 100—1000 K.

В. Ф. Байбуз

C₆H₁₁NO

От 3707а 1992

6 E375. Термодинамические свойства оксима циклогексанона. Thermodynamic properties of cyclohexanone oxime / Kozyro A. A., Kabo G. J., Krouk V. S., Sheiman M. S., Yursha I. A., Simirsky V. V., Krasulin A. P., Sevruk V. M., Gogolinsky V. I. // J. Chem. Thermodyn. — 1992. — 24, № 8. — С. 883—895. — Англ.

Измерена теплоемкость (C_p) кристаллического и жидкого оксима циклогексанона C₆H₁₁NO (I) в интервале T -р 6—300K (в адиабатич. калориметре) и в интервале 300—400K (методом тройного теплового моста). Найдены T -ра плавл. ($T_m = 362,5K$) и энтальпия плавл. l ($12,7 \pm 0,3$) кДж/моль, T -ры твердофазных переходов (240,8 и 273,4K). В калориметре Кальве определены T -ра испарения (367,8K), энтальпия испарения ($58,66 \pm 0,56$) кДж/моль и энтальпия сублимации: $\delta_{sub}H_m$ $\Delta_{sub}H_m = (74,01 \pm 0,33)$ кДж/моль. Эффузионным интегральным ме-

C_p (6-300K)

$T_m, \Delta H_m,$

$\Delta H_v, p$

ср. 1993, от 6

тодом Кнудсена измерено давление пара I при t-рах 287,9—348,3K: $\ln p(\text{Па}) = (33,307 \pm 0,255) - (9607 \pm 80)/T$ и рассчитана энтальпия сублимации $\Delta_{\text{sub}}H_m(317,5\text{K}) = (79,88 \pm 0,67)$ кДж/моль. Статич. методом с мембранным нульманометром при t-рах 370,9—446,3K определено давление насыщенного пара для жидкого I: $\ln p(\text{Па}) = (24,469 \pm 0,130) - (7151 \pm 55)/T$ и рассчитана энтальпия испарения $\Delta_{\text{исп}}H_m(409,2\text{K}) = (59,46 \pm 0,46)$ кДж/моль. Из этих результатов вычислены средневзвешенное значение $\Delta_{\text{sub}}H_m(317,5\text{K}) = (77,08 \pm 0,30)$ кДж/моль и молярная энтропия газообразного I: $(371,53 \pm 1,03)$ Дж/К·моль при 320K. Измерены спектры комб. рас. и ИК-поглощения кристаллич. I.

$C_3 N_3 H_3 O_3$

(изамурована
кислота)

(ср, 5-380K,
 ΔH_f , P)

Am. 36850

1992

Козыро А.А., Кабо П.Я. и др.,

Зл. оц. химии, 1992,
66, N 10, 2583 - 2590.

CD(NH₂)₂

1992

19 Б3098. Влияние свойств неэлектролита на энтальпийные коэффициенты взаимодействия мочевины-неэлектролит в воде. Энтальпии растворения мочевины в водных растворах диметилсульфоксида и 1,2-диметоксиэтана при 298,15 К. Effect of non-electrolyte properties on urea-non-electrolyte enthalpic interaction coefficients in water dissolution enthalpies of urea in aqueous solutions of dimethyl sulfoxide and 1,2-dimethoxyethane at 298.15 K /Piekarski Henryk, Waliszewski Dariusz //Bull. Pol. Acad. Sci. Chem. —1992.—40 ;№ 3.—С. 247—252.—Англ.

При 298,15 К определена и табулирована энтальпия р-рения мочевины в бинарных водн. р-рах ДМСО (I) и 1,2-диметоксиэтана (II), содержащих 0—20% I или II (шаг 5%). Вычислены значения энтальпийных коэф. парного вз-вия мочевины-неэлектролит (h_{xy}). Результаты сопоставлены с лит. данными, полученными для др. неэлектролитов. Рассмотрены корреляции значений (h_{xy}) с различными эмпирич. шкалами полярности р-рителей. Показано, что результаты удовлетворительно описываются многопараметровым ур-нием типа Абрахама-Камлета-Тафта.

В. В. Сергиевский

ΔKaz

х.1994, №19

C5 H5 NO

1992

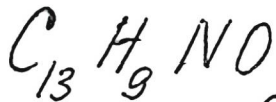
14 Б3023. Энтальпия образования 4-гидроксипиридина. Enthalpy of formation of 4-hydroxypyridine /Ribeiro Da Silva M. A. V., Matos M. Agostinha R., Meng-Yan Yang, Pilcher G. //J. Chem. Thermodyn .—1992 .—24 ,№ 1 .—С. 107—108 .—Англ.

С использованием калориметрич. бомбы определена энтальпия сгорания 4-гидроксипиридина (I) $\Delta_c H_m^0$ (I, s, 298,15 K) = $-25332 \pm 0,4$ кДж/моль, для энтальпии образования тв. I получено $-148,9 \pm 0,8$ кДж/моль. Методом микрокалориметрии сбрасывания измерена энтальпия сублимации I $118,6 \pm 5$ кДж/моль. Для энтальпии образования I в газ. состоянии получено $-30,3 \pm 5,3$ кДж/моль. Обсуждены уточненные значения инкрементов в методе групповых вкладов для оценки энтальпий образования и изомеризации N-гетероциклич. соединений.

В. Ф. Байбуз

($\Delta H_f, \Delta H_z$)

X. 1993, N 14.



1992

Sabbah Raphaël,
El Watik Lakeen.

(C_p , ΔH_f ,
 ΔH_s)

Can. J. Chem. 1992. 70,
N 1. C. 24-28.

($\bullet$ $C_{13}H_8S_2$; I)

C-N-O-H coord.

1992

Steele W.V., Chirico R.D.
et al.

Cp, 4 Hf

J. Chem. Thermodyn.
1992. 24, N5.C. 499-529.

(corr.  C-N-Scarf.; I)

$C_8H_4O_6H_5 \cdot NH_4$

1993

118: 133308h Thermophysical properties of ammonium purpurate 'murexide' $C_8H_4O_6H_5 \cdot NH_4$. Abdel-Kader, M. M.; Tahoon, K. K.; El-Sharkawy, A. (Fac. Sci., Cairo Univ., Giza, Egypt). *Phys. Status Solidi A* 1993, 135(1), 161-8 (Eng). Some thermophys. properties (heat capacity, C_p , thermal diffusivity, σ , and thermal cond., λ) were measured in addn. to the thermogravimetric anal. (TGA) and DTA between 300 and 550 K for ammonium-purpurate (APP) $C_8H_4O_6N_3 \cdot NH_4$. It seems likely that the compd. behaves as a dielec. material and thus the main mechanism of the heat transfer is due to lattice vibrations (phonons). The above-mentioned parameters also confirm the existence of two structural phase transformations at ~ 374 and ~ 530 K. The data are correlated to the reorientational motion of the NH_4^+ ions.

(p)

C.A. 1993, 118, N14

C-N-O-M

1993

15 Б3042. Термодинамические свойства органических соединений. 3. Энтальпия сублимации и теплоемкость N-оксида 2,4,6-триметилбензонитрила. Thermodynamic properties of organic compounds. 3. Sublimation enthalpy and heat capacities of 2,4,6-trimethylbenzonitrile N-oxide /Acree W. E. (Jr), Sevruck V. M., Kozyro A. A., Krasulin A. P., Kabo G. J., Frenkel M. L. //J. Chem. and Eng. Data .—1993 .—38 ,№ 1 .—С. 101—104 .—Англ.

В вакуумном адиабатич. калориметре при t -рах 5,74—319,22 К измерена теплоемкость C_p крист. N-оксида 2,4,6-триметилбензонитрила (I), а с использованием теплопроводящего калориметра типа Кальве определена энтальпия сублимации I. Найдено, что $\Delta_{\text{sub}}H^0$ (I, 313,15 К) = $87,52 \pm 0,53$ кДж $\cdot$ моль $^{-1}$ и рекомендовано значение $\Delta_{\text{sub}}H^0$ (I, 298,15 К) = $87,8 \pm 1,9$ кДж $\cdot$ моль $^{-1}$. На основе результатов измерений рассчитаны термодинамич. ф-ции для крист. I в интервале t -р 0—320 К. I претерпевает при t -ре 224,3 К обратимый твердофазный переход с энтальпией и энтропией перехода, равными 80 ± 4 Дж $\cdot$

$C_p, \Delta H_s, T_{t2},$
 ΔH_{t2}

5.74—319.22K

X. 1993, N 15

• моль⁻¹ и $0,35 \pm 0,02$ Дж • моль⁻¹ • К⁻¹ соотв. Станд. энтропия газообразного I при 298,15 К равна 445,3 Дж • моль⁻¹ • К⁻¹. В интервале 0—320 К с шагом 5—10 К рассчитаны и табулированы значения C_p/R , $\Delta_f^0 S^0/R$, $\Delta_f^0 H^0/RT$ и $\Phi^0(T,0)/P$ крист. I. При 298,15 К они составили соотв. 28,40; 31,88; 15,77 и 16,11. В. Ф. Байбуз



$\text{CH}_3\text{NHCONH}_2$ (K)

1993

120: 63588q Thermodynamic properties of methylurea. Kozyro, A. A.; Kabo, G. J.; Krasulin, A. P.; Sevruk, V. M.; Simirsky, V. V.; Shelman, M. S.; Frenkel, M. L. (Chem. Dep., Belorussian State Univ., Minsk, Belarus 220050). *J. Chem. Thermodyn.* 1993, 25(12), 1409-17 (Eng). The heat capacity of cryst. methylurea was measured by vacuum adiabatic calorimetry (8.7-300 K) and by the triple heat-bridge method (300-350 K). The value of the free energy of formation $\Delta G_m^\circ(\text{cr}, 298.15 \text{ K}) = -(166.06 \pm 0.76) \text{ kJ/mol}$ was found on the basis of these and literature results. The molar enthalpy of sublimation of $\text{CH}_3\text{NHCONH}_2$ was directly detd. by a heat-conduction differential microcalorimeter of the Calvet type: $\Delta_{\text{sub}}H_m^\circ(343 \text{ K}) = (94.38 \pm 0.84) \text{ kJ/mol}$. The vapor pressure p of the liq. was measured by the integral Knudsen-effusion method at temps. from 377.2 to 410.3 K; the molar enthalpy of vaporization was calcd. By using these and literature results, the weighted av. value of the molar enthalpy of sublimation at 343 K was calcd. and the molar entropy, $S_m^\circ(\text{g}, 343 \text{ K}) = 335.93 \text{ J/K.mol}$, is in a satisfactory accordance with the exptl. value. Std. molar thermodyn. functions of $\text{CH}_3\text{NHCONH}_2$ (cr or l) (0-450 K) and of $\text{CH}_3\text{NHCONH}_2(\text{g})$ (298.15-1000 K) were calcd. and tabulated.

(CP, $\Delta_{\text{sub}}H$, $\Delta_{\text{sub}}G$)

C.A. 1994, 120, N6

$\text{NH}_4\text{NO}_3 - \text{CO}(\text{NH}_2)_2 - \text{H}_2\text{O}$

1993

4 БЗ209. Теплоемкость и объемные свойства двух- и трехкомпонентных водных растворов, содержащих карбамид и нитрат аммония /Васильев В. А., Новиков А. Н., Пегушев М. Ю. //Изв. вузов. Химия и хим. технол. .—1993 .—36 ,№ 7 .—С. 36—40 .—Рус.

Калориметрическим и пикнометрич. методами при 298,15 К измерены теплоемкость C_p и плотность ρ трехкомпонентной системы $\text{NH}_4\text{NO}_3 - \text{CO}(\text{NH}_2)_2 - \text{H}_2\text{O}$. Рассмотрено соответствие изученных св-в правилу аддитивности. Установлена зависимость, связывающая уд. теплоемкости и объемы изученных трехкомпонентных р-ров. Проведен анализ концентрац. зависимости изменения теплоемкости и объема при образовании системы $\text{NH}_4\text{NO}_3 - \text{CO}(\text{NH}_2)_2 - \text{H}_2\text{O}$ из двухкомпонентных растворов.

Х.1994, №4

C-N-H-O

1993

квантово-
механические
расчеты
ab initio
методом

118: 220173d An ab initio study of some nitramine molecules. Zirl, David M.; Vladimiroff, Theodore (US Army Armament, Res. Dev. Eng. Cent., Picatinny Arsenal, NJ 07806 USA). *THEOCHEM* 1993, 95, 291-7 (Eng). Ab initio SCF MO calcs. have been performed for a series of nitramine mols. Calcs. were conducted on trinitramine, methyldinitramine, methylchloronitramine and trimethylamine using Pople's 6-31G and 6-31G* basis sets. Gas phase geometries for these mols. were detd. by a min. energy criterion using gradient techniques. The results are in qual. agreement with the geometries derived from electron diffraction studies and microwave spectroscopy. The extra-long N-N bonds in methyldinitramine and methylchloronitramine were not computed accurately at the SCF level of theory and it was shown that these bonds become longer if electron correlation is included at the second-order Moeller-Plesset level. Computations were performed for the heat of formation for trinitramine using Pople's isodesmic reaction concept and compared with a value obtained using an additivity rule.

C. A. 1993, 118, N 22

23 Б3042. Измерения давления насыщенных паров изомерных мононитротолуолов при температурах между 380 и 460 К. Saturated vapor pressure measurements on isomeric mononitrotoluenes at temperatures between 380 and 460 K /Aim Karel //J. Chem. and Eng. Data .— 1994 .— 39 ,№ 3 .— С. 591 — 594 .— Англ.

Методом сравнит. эбуллиометрии в интервале т-р 380—460 К проведены точные ($\pm 0,05\%$) измерения давл. насыщ. паров 2-нитро-, 3-нитро- и 4-нитротолуолов. Полученные результаты описаны ур-нием Антуана. Проведено сравнение с имеющимися лит. данными. Показано, что результаты измерений давл. пара 4-нитротолуола в сочетании с надежными лит. данными позволили с помощью ур-ния Вагнера описать давл. паров 4-нитротолуола во всем интервале существования жидк. фазы от тройной точки до крит. точки. Библ. 30.

В. Ф. Байбуз

$\text{CO}(\text{NH}_2)_2$

9 53064. Фазовое поведение и теплопроводность мочевины при давлении до 1 ГПа и при температурах в интервале 50—370 К. Phase behavior and thermal conductivity of urea at pressures up to 1 GPa and at temperatures in the range 50—370 K /Andersson O., Ross R. G. //Int. J. Thermophys. .—1994 .—15 ,№ 3 .—С. 513—524 .—Англ.

Нестационарным методом нагретой нити измерена теплопроводность тв. фаз I и III мочевины при т-рах 50—370 К и давл. до 1 ГПа. Фаза III наблюдалась еще при давл. ниже 0,07 ГПа при т-ре ниже 230 К. Экстраполяция фазовой линии между фазами I и III показала, что фаза III м. б. получена при т-ре 218 К и при атмосферном давл. и, следовательно, мочевина может существовать в виде двух тв. фаз при атмосферном давл. Переход между фазами I и III м. б. осуществлен только с помощью изотермич. повышения давл., а не изобарным охлаждением. Т-рая зависимость теплопроводности фаз I и III мочевины описывается моделью Дебая для теплопроводности, предполагающей, что рассеяние фононов происходит посредством трех фононных процессов переориентации спина. Несмотря на то, что при фазовом переходе I→III объем уменьшается, теплопроводность возрастает примерно на 20%.

В. Ф. Байбуз

Т_т, тепло-
проводность

X. 1995, № 9

1994
4561

$(\text{NH}_2)_2\text{C}_2\text{O}$

[DM. 37712]

1994

ab initio Fowler G.E., Falbraith J.N.
Vacek B. et al.,

param

y

Am. Chem. Soc., 1994,

116,

9311 - 9319.

Substituted



Oxirenes
($\text{X}_2\text{C}_2\text{O}$, $\text{X} = \text{NH}_2$,

CH_3 , NH_2 , OH , F): Can They Be
Made?

Аминокислоты
(аа)

C-N-O-H сс 1994

) 23 Б3060. Некоторые термодинамические свойства систем водных аминокислот при 288,15; 298,15; 313,15 и 328,15 К. Анализ объемов и теплоемкостей в стандартном состоянии методом аддитивности групп. Some thermodynamic properties of aqueous amino acid systems at 288.15, 298.15, 313.15, and 328.15 K: Group additivity analyses of standard state volumes and heat capacities /Hakin A. W., Duke M. M., Marty J. L., Preuss K. E. //13th IUPAC Conf. Chem. Thermodyn.: 1st Meet. 25th AFCAT Conf., Clermont-Ferrand, July 17—22, 1994: Programme and Abstr. — [Clermont-Ferrand], 1994. — С. 212—213. — Англ.

Измерены плотности и теплоемкости водн. р-ров L-аспарагиновой, L-глутаминовой и α -аминомасляной к-т при т-рах 288,15; 298,15; 313,15 и 328,15 К. Эти данные использованы для расчета кажущихся мол. объемов и кажущихся мол. теплоемкостей, к-рые в свою очередь были:

термод.
св-ва

Х. 1994, № 23

использованы для расчета объемов и теплостей в станд. состояний. Ур-ния для нейтр. орг. в-в в воде, предложенные Хельгесоном, Киркхамом и Флауерсом, использованы для описания рассчитанных объемов и теплостей аминок-т в станд. состоянии как ф-ций т-ры при постоянном давл. Эти данные вместе с ранее опубликованными данными для систем аминок-т использованы в кач-ве исходных данных при анализе методом аддитивности групп. Обсуждены достоинства аддитивной схемы и предпринята попытка представить оценки, полученные методом групповых вкладов, в виде ф-ций температуры.

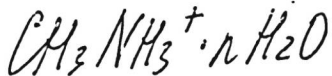
В. Ф. Байбуз

14 алжилпроцүрүүнх
картаница Козиро А.А., Кабо Р.Я.,

1994

Ср Всероссийский семинар по химической термодинам. и калориметрии 1-3 февраля 1994 года.
5-320К Тезисы докладов. Имянин
Новгород, 1994, стр. 23.

Аддитивность ● термодинамических свойств кристаллов



1994

Meng Elaine C., Cieplak Piotr.
et al.,

(A.C.)

J. Amer. Chem. Soc. 1994,
116, N26, C. 12061-12062

(all. ● $\text{CH}_3\text{CO}_2^- \cdot n\text{H}_2\text{O}$, 7)

$\text{HO} \cdot \text{C}_6\text{H}_4 \cdot \text{NO}_2$

C-N-O-H

1994

) 23 Б3058. Термодинамическое исследование трех изомеров нитрофенола. Thermodynamic study of the three nitrophenol isomers /Sabbah R., Gouali M. //13th IUPAC Conf. Chem. Thermodyn.: Jt Meet. 25th AFCAT Conf., Clermont-Ferrand, July 17—22, 1994: Programme and Abstr. .—[Clermont-Ferrand] ,1994 .—С. 49 .—Англ.

Методами калориметрии сжигания, калориметрии сублимации. ДТА и по измерениям теплоемкости исследованы изомеры нитрофенола. Получены следующие значения теплоты сгорания $\Delta_c H^\circ$ (s, 298,15 K) (в кДж/моль) $2871,0 \pm 1,3$; $2875,1 \pm 0,9$; $2868,5 \pm 1,0$; теплоты сублимации $\Delta_{\text{суб}} H^\circ$ (298,15 K) (в кДж/моль) $72,30 \pm 0,28$; $91,23 \pm 0,49$ и $92,39 \pm 0,43$; теплоты плавления $\Delta_{\text{пл}} H$ (в кДж/моль) $18,32 \pm 0,35$; $20,54 \pm 0,34$ и $17,33 \pm 0,10$; энтальпии атомизации (в кДж/моль) $6742,5 \pm 1,9$; $6719,5 \pm 1,7$; $6724,9 \pm 1,8$ и т-ры тройной точки $318,40 \pm 0,01$ K, $370,51 \pm 0,01$ K и $387,26 \pm 0,05$ K для о-, м- и п-нитрофенолов соответственно.

В. Ф. Байбуз

термод.
сб - ва

Х. 1994, №23

C₆H₄NO₂OH

1994

17 Б318. Энергетика внутри- и межмолекулярных связей в трех нитрофенолах. Energetics of intra- and inter-molecular bonds in the three nitrophenols / Sabbah R., Gouali M. // Austral. J. Chem. — 1994. — 47, № 9. — С. 1651—1660. — Англ.

Проведено полное термодим. исследование трех изомеров нитрофенола. Определены энтальпии сгорания ($\Delta_c H_m^0$), сублимации ($\Delta_{sub} H_m^0$), плавления ($\Delta_{fus} H_m$). Сожжение проводили в калориметре с микробомбой при давлении $O_2 \sim 30$ атм, навеска образцов составляла 10—15 мг. Для о-, м-, п-нитробензолов (I, II, III соответственно) — $\Delta_c H_m^0$ найдены равными (кДж/моль) $2871,0 \pm 1,3$; $2875,1 \pm 0,9$; $2868,5 \pm 1,0$. Для определения $\Delta_{sub} H_m^0$ был использован калориметр типа Тиана—Кальве с кнудсеновской ячейкой. Для I—III были получены следующие значения $\Delta_{sub} H_m^0$ (кДж/моль): $72,3 \pm 0,28$; $91,23 \pm 0,49$; $92,39 \pm 0,43$; пересчет измеренных $\Delta_{sub} H$ к 298,15K проводили на основании результатов определения теплоемко-

(ΔH_f , ΔH_v ,
 ΔH_m)

Х. 1995, N 17

сти образцов в интервале от 298,15K до T_{sub} методом смешения в калориметре Тиана—Кальве. Чистота образцов, температура в тройной точке (T_{tp}) и $\Delta_{\text{fus}}H_m$ устанавливались методом ДТА; T_{tp} равны $318,40 \pm 0,01$; $370,51 \pm 0,01$; $387,26 \pm 0,05$, $\Delta_{\text{fus}}H_m$ (кДж/моль) равны $18,32 \pm 0,35$; $20,54 \pm 0,34$; $17,33 \pm 0,10$ (I—III соответственно). На основании полученных данных рассчитаны энтальпии образования I—III в тв. и газ. состояниях и энтальпии их атомизации. Сопоставлены относит. стабильности изомеров и оценены энергии внутренней водородной связи в I ($20,09$ кДж/моль) и межмолек. связей.

Н. В. Человская

HCN(CH₃)₂

1994

23 Б3057. Некоторые термодинамические свойства ди-

метилформамида /Шваро О. В., Марковник В. С., Аль-
химович В. М., Пещенко А. Д. //Всерос. семин. по хим.
термодинам. и калориметрии, Нижний Новгород, 1—3
февр., 1994: Тез. докл. —Н. Новгород, 1994. —С.
33—35. —Рус.

термод. св-ва

Х. 1994, № 23

Алхимпроцесс
Меревик

1995

122:144053e Additivity of Thermodynamic Properties of Organic Compounds in Crystalline State. 2. Heat Capacities and Enthalpies of Phase Transition of Alkyl Derivatives of Urea in Crystalline State. Kabo, Gennady J.; Kozyro, Alexander A.; Diky, Vladimir V.; Simirsky, Vladimir V. (Department of Chemistry, Belarussian State University, Minsk, AR 220050 USA). *J. Chem. Eng. Data* 1995, 40(2), 371-93 (Eng). The heat capacities and enthalpies of phase transitions for urea and 13 alkyl derivs. of urea [methyl-, 1,1-dimethyl-, 1,3-dimethyl-, ethyl-, (1-methylethyl)-, tetramethyl-, 1,1-diethyl-, 1,3-diethyl-, butyl-, (1,1-dimethylethyl)-, 1,3-bis(1,1-dimethylethyl)-, tetraethyl-, octyl-, and (1-methylpropyl)urea] in the temp. range from 5 to 320 K have been measured by adiabatic calorimetry. The thermodyn. functions of these compds. were obtained from smoothed heat capacity values. The results were used to show that an additive scheme for the calcn. of the thermodyn. properties of crystals of alkyl derivs. of urea, without taking into consideration the phase distinctions in crystals, gives reasonable accuracy.

($C_p, \Delta_{tr}H$)

C.A. 1995, 122, N 12

$\text{CO}(\text{NH}_2)_2$

1995

14 Б317. Аддитивность термодинамических свойств органических соединений в кристаллическом состоянии. 2. Теплоемкости и энтальпии фазовых переходов алкилпроизводных мочевины в кристаллическом состоянии. Additivity of thermodynamic properties of organic compounds in crystalline state. 2. Heat capacities and enthalpies of phase transition of alkyl derivatives of urea in crystalline state / Kabo Gennady J., Kozyro Alexander A., Diky Vladimir V., Simirsky Vladimir V. // J. Chem. and Eng. Data. — 1995. — 40, № 2. — С. 371—393. — Англ.

(C_p)

В адиабатическом калориметре при t -рах 5—320К измерены теплоемкости и теплоты фазовых переходов мочевины и ее 13 алкилпр-ных (метил-, 1,1- и 1,3-диметил-, этил-, 1-метилэтил-, тетраметил-, 1,1- и 1,3-диэтил-, бутил-, 1,1-диметилэтил-, 1,3-бис(1,1-диметилэтил)-, тетраэтил-, октил- и 1-метилпропилмочевины) в крист. состоянии. Из значений теплоемкости рассчитаны термодина-

X-1995, N 14

мич. ф-ции этих соединений в конденсир. состоянии. С использованием полученных результатов показано, что с помощью аддитивной схемы расчета можно получить достаточно точные значения термодинамич. св-в для кристаллов алкилпр-ных мочевины для учета твердофазных переходов, происходящих в некоторых из этих соединений при t -рах ниже 298,15K. Среднее расхождение между рассчитанными и эксперим. значениями C_p и $S^\circ(T)$ для исследованных кристаллов при t -ре 298,15K составило 3,8 и 2,2% соответственно.

В. Ф. Байбуз

Agemang
CaH5NO

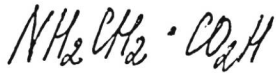
1995

Lu Yan, Chen Yanbin,
Bai Tongchun et al.,

ΔH_{H}

Thermochim. acta, 1995,
253, c. 85-91

P.M.X.N22, 1995, 22 5380



(лизилин)

1995

Xie Wei, Lu Yan, et al,

Thermochim. acta. - 1995,

ΔH₂₉₈

254, с. 103-109.

Измерение стандартных энтальпий
Δ-лизина и Δ-аминомасляной
кислоты с использованием калориметра при 298,15 K

P. M. X. N22, 1995, 225331

(HC(O)CN)

HC(S)CN (2)

0538472

1996

125: 340123d Experimental determination of the enthalpies of formation of formyl cyanide and thioformyl cyanide in the gas phase. Born, Monique; Ingemann, Steen; Nibbering, Nico M. M. (Institute of Mass Spectrometry, University of Amsterdam, 1018 WS Amsterdam, Neth.). *J. Phys. Chem.* 1996, 100(44), 17662-17669 (Eng). The enthalpies of formation of formyl cyanide (HC(O)CN) and thioformyl cyanide (HC(S)CN) in the gas phase were detd. with the use of Fourier transform ion cyclotron resonance (FT-ICR) mass spectrometry. The enthalpy of formation, $\Delta H_f^\circ(298\text{ K})$, of formyl cyanide was detd. to be $26 \pm 20\text{ kJ mol}^{-1}$, whereas the value for thioformyl cyanide was $222 \pm 30\text{ kJ mol}^{-1}$. These enthalpies of formation were derived from exptl. values of (i) the gas-phase acidities of the methylene groups in the $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CN}$ and $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{CN}$ species ($\Delta H^\circ_{\text{acid}}\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CN} = 1556 \pm 8\text{ kJ mol}^{-1}$ and $\Delta H^\circ_{\text{acid}}\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{CN} = 1494 \pm 8\text{ kJ mol}^{-1}$), (ii) the enthalpy change for the dissociation of the $\text{CH}_3\text{O-CHCN}$ and $\text{CH}_3\text{S-CHCN}$ carbanions into a Me radical and the radical anion of formyl cyanide and thioformyl cyanide, resp. { $\text{BDE}(\text{CH}_3\text{O-CHCN}) = 116 \pm 10\text{ kJ mol}^{-1}$ and $\text{BDE}(\text{CH}_3\text{S-CHCN}) = 133 \pm 10\text{ kJ mol}^{-1}$ }, and (iii) the electron affinities of the neutral formyl species { $\text{EA}(\text{HC(O)CN}) = 65 \pm 3\text{ kJ mol}^{-1}$ and $\text{EA}(\text{HC(S)CN}) = 159 \pm 15\text{ kJ mol}^{-1}$ }. The structures of the two carbanions and the radical anions of the (thio)formyl species were ascertained by high kinetic energy (8 keV) collision-induced charge-reversal (CR) expts. performed with the use of a double-focusing quadrupole hybrid mass spectrometer.

(SfH) Δ

(H)

C. A. 1996,
125, N 2:6

HCSCN

Om 38472

1996

7Б317. Экспериментальное определение энтальпии образования формилцианида и тиоформилцианида в газовой фазе. Experimental determination of the enthalpies of formation of formyl cyanide and thioformyl cyanide in the gas phase / Born Monique, Ingemann Steen, Nibbering Nico M. M. // J. Phys. Chem.— 1996.— 100, № 44.— С. 17662—17669.— Англ.
Место хранения ГПНТБ

(ΔH_f)

HCSCN

⑦ Δ

X. 1997, N 7

Formamug

HCONH_2

1996

124: 157414q Reliable Reaction Enthalpies for Neutral Amide Hydrolysis and the Heat of Formation for Formamide. Dobbs, Kerwin D.; Dixon, David A. (Experimental Station, DuPont Central Research and Development, Wilmington, DE 19880-0328 USA). *J. Phys.*

Chem. 1996, 100(10), 3965-73 (Eng). High level ab initio electronic structure calcns. were made for the hydrolysis reaction $\text{X}_2\text{NC(O)Y} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{X}_2\text{NH} + \text{HOC(O)Y}$ for $\text{X} = \text{Y} = \text{H}$ (formamide) and for $\text{X} = \text{H}$ and $\text{Y} = \text{CH}_3$ (acetamide). Calcns. are reported with a variety of basis sets and a variety of correlation levels based on MO (MO) theory as well as with a variety of d. functional theory (DFT) gradient-cor. (nonlocal) functionals. The convergence of the hydrolysis energies with respect to the computational method is discussed. The highest level calcns. yield 0.3 ± 0.4 and 0.1 ± 0.4 kcal/mol at the MO and DFT levels, resp., for $\text{X} = \text{H}$ and $\text{Y} = \text{CH}_3$ as compared to an exptl. value of 0.4 ± 0.9 kcal/mol. For $\text{X} = \text{Y} = \text{H}$, the hydrolysis energies are 1.7 ± 0.4 (MO) and 2.2 ± 0.4 (DFT) kcal/mol. The heat of formation of formamide was calcd. from the isodesmic reaction $\text{H}_2\text{NC(O)CH}_3 + \text{HOC(O)H} \rightarrow \text{H}_2\text{NC(O)H} + \text{HOC(O)CH}_3$, giving $\Delta H^\circ_f = 045.6 \pm 1.1$ (MO) and -46.2 ± 1.1 (DFT) kcal/mol. These values for ΔH°_f (formamide) yield 1.9 ± 1.3 (MO) and 2.5 ± 1.3 (DFT) kcal/mol for the hydrolysis reaction.

$\Delta_f H$

C. A. 1996, 124, N12.

$\text{CH}_3\text{NHNH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$

1996

(T₂)

124: 326365g Thermodynamic properties and phase transformations in methylhydrazine monohydrate. Lebrun, N.; Foulon, M.; van Miltenburg, J. C.; van der Eerden, J. P.; Oonk, H. A. J. (Laboratoire de Dynamique et Structure des Matériaux Moléculaires-CNRS URA 801-U. S. T. Lille-UFR de Physique, 59655 Villeneuve d'Ascq, Fr.). *Thermochim. Acta* 1996, 275(1), 17-26 (Eng). Liq. methylhydrazine monohydrate ($\text{CH}_3\text{NHNH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$; molar mass = 0.06409 kg mol⁻¹) can be easily quenched into a glassy state. On reheating, the glass transition occurs near 160 K (T_g) with an important heat capacity variation ($\Delta C_p = 96.8 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$). This glass is extremely "fragile" according to Angell's classification. Depending on the thermal treatment, this glass transition is followed by successive phase transformations with

C. A. 1996, 124, ~24

slow and complex kinetics which are described in detail. Thermodyn. properties were investigated by means of adiabatic calorimetry. Enthalpies and heat capacities were detd. or extrapolated from 100 to 265 K for the glassy state and all condensed phases: the liq., the undercooled liq., the metastable and the stable solid phases. The melting temp. $T_{fus,s}$ and the melting enthalpy $\Delta H_{fus,s}$ for the stable solid phase were estd. to be 234 K and 15.4 kJ mol⁻¹, resp. The temp. evolution of the enthalpy for the metastable solid phase was investigated using previous measurements for the metastable solid phase: $T_{fus,m} = 219$ K and $\Delta H_{fus,m} = 9.8$ kJ mol⁻¹. The spontaneous evolution of the temp. of the undercooled liq. was followed from 188 to 222.4 K under adiabatic conditions. This is interpreted in terms of phase transformations and kinetics. Three different processes can be considered. The first process leads to the quasi-complete transformation into the metastable solid phase from the undercooled liq. Then the crystn. of the stable solid phase starts from the remaining undercooled liq. and further from the metastable solid phase. The third process corresponds to the melting of the metastable solid phase at 219 K and the rapid and simultaneous crystn. into the stable solid phase. At the end of the process, the complete transformation of the stable solid phase is obsd.

$C_2H_5ONO_2$ (Om. 38477) 1996

Massimiliano Aschi, Fulvio
Cacace, et al.,

AP J. Phys. Chem., 1996, 100,
16522-16529.

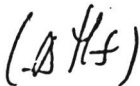
Gas-Phase Proton
Nitric Acid and
A Mass

Affinity of
Its Esters.

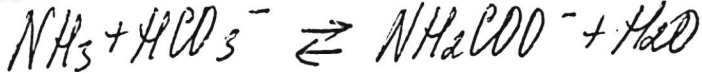
1996

8Б338. Термодинамические свойства N-метилформамида / Ушаков В. С., Седов С. М., Князев Б. А., Кучкаев Б. И. // Ж. физ. химии. — 1996. — 70, № 9. — С. 1573—1577. — Рус.

В бомбовом калориметре определена энтальпия сгорания N-метилформамида. Статическим методом получена зависимость давления его насыщенных паров от т-ры. Вычислены энтальпия испарения и стандартные теплоты образования в жидкой и газовой фазах. Методами статистической термодинамики рассчитаны термодинамические функции N-метилформамида в приближении жесткий ротатор—гармонический осциллятор. Вклад от внутреннего вращения определен методом непосредственного суммирования и по методу Питцера на основе найденных потенциальных функций внутреннего вращения.



X. 1997, N 8

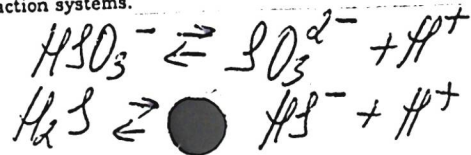


1997

128: 249186c Determination of chemical equilibrium constants of dissociation reactions in aqueous solutions from measurements of electromotive force. Kamps, Alvaro Perez-Salado (Kaiserlautern, Germany). *Fortschr.-Ber. VDI, Reihe 3* 1997, 514, 1-219 (Ger), VDI Verlag GmbH. The emf. was measured in reversible galvanic cells for the detn. of the equil. consts. of the following reactions in aq. solns.: $\text{NH}_3 + \text{HCO}_3^- = \text{NH}_2\text{COO}^- + \text{H}_2\text{O}$, $\text{MDEAH}^+ = \text{MDEA} + \text{H}^+$ (MDEA = methyldiethanolamine), $\text{HSO}_3^- = \text{SO}_3^{2-} + \text{H}^+$, and $\text{H}_2\text{S} = \text{HS}^- + \text{H}^+$. These measurements were performed over a large range of temps. The results are compared with previous work and calcns. from models for these reaction systems.

K_p
 в уравн
 кон
 температур
 ± 0

(+2)



1997

Dimethyl
ammonium

Dimethyl-
ammonium

(Cp)

C.A. 1998,
128, N19

Capacities and other thermodynamic properties.

128: 235749b Thermodynamic properties of aqueous dimethylamine and dimethylammonium chloride at temperatures from 283 K to 523 K: apparent molar volumes, heat capacities, and temperature dependence of ionization. Shvedov, Dmitri; Tremaine, Peter R. (Department of Chemistry, Memorial University of Newfoundland, St. John's, NF Can. A1C3X7). *J. Solution Chem.* 1997, 26(12), 1113-1143 (Eng), Plenum Publishing Corp.. Data for the apparent molar volumes of aq. dimethylamine and dimethylammonium chloride have been detd. with platinum vibrating tube densimeters at temps. $283.15 \text{ K} \leq T \leq 523.15 \text{ K}$ and at different pressures. Apparent molar heat capacities were measured with a Picker flow microcalorimeter over the temp. range $283.15 \text{ K} \leq T \leq 343.15 \text{ K}$ at 1 bar. At high temps. and steam satn. pressures, the std. partial molar volumes V_2° of dimethylamine and dimethylammonium chloride deviate towards pos. and neg. discontinuities at the crit. temp. and pressure, as is typical for many neutral and ionic species. The revised Helgeson-Kirkham-Flowers (HKF) model and fitting equations based on the appropriate derivs. of solvent d. have been used to represent the temp. and pressure dependence of the std. partial molar properties. The std. partial molar heat capacities of dimethylamine ionization $\Delta_{\text{ion}} C_{p,2}^\circ$, calcd. from both models, are consistent with literature data obtained by calorimetric measurements at $T \leq 398 \text{ K}$ to within exptl. error. At temps. below 523 K, the std. partial molar volumes of dimethylamine ionization $\Delta_{\text{ion}} V_2^\circ$ agree with those of morpholine to within $12 \text{ cm}^3\text{-mol}^{-1}$, suggesting that the ioniza-

tion of secondary amine groups in each mol. is very similar. The extrapolated value for $\Delta_{\text{ion}} V^{\circ}_2$ of dimethylamine above 523 K is very different from the values measured for morpholine at higher temp. The difference is undoubtedly due to the lower crit. temp. and pressure of $(\text{CH}_3)_2\text{NH}(\text{aq})$.

$\text{CH}(\text{NO}_2)_3$
(тринитрометан)

Конькова, Матюшин

1998

130: 329574j Combined study of thermochemical properties of nitroform and its salts. Kon'kova, T. S.; Matyushin, Yu. N. (N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia 117977). Russ. Chem. Bull. 1998, 47(12), 2371-2374 (Eng), Consultants Bureau. A combined method for detn. of the std. enthalpies of formation of nitroform and its salts was proposed. The enthalpies of dissoln. of nitroform and its ammonium, hydrazinium, guanidinium, and potassium salts in water were measured. The enthalpy of combustion of the hydrazinium salt of nitroform was detd. by combustion calorimetry, and its std. enthalpy of formation was calcd. The enthalpy of formation of trinitromethyl anion in indefinitely dild. aq. soln., $-24.94 \pm 0.79 \text{ kJ mol}^{-1}$, was calcd. on the basis of the data obtained for enthalpies of formation and dissoln. of ammonium and hydrazinium salts of nitroform. Std. enthalpies of formation of nitroform and its salts were calcd.

(м.х. в-ва)

С.А., 1999, 130, N24.

$(\text{HCN})(\text{H}_2\text{O})\text{H}^+$ (DM-40056)

1999

Paul M. Mayer,

$\Delta_f H^\circ$,
Жермунд
сери J. Chem. Phys. , 1999,
110, N16, 7779-7788

C₉H₁₁ON

(Dm. 40 023)

1999

Shuang He Meng et al.,

Thermochim. Acta 1999,
342, 47-57.

C_p, molar
C_v-R

Heat capacity and thermodynamic
properties of  p-dimethylamino-
benzaldehyde.

NH₂CO [Om 40148]

1999

Warwick A. Shapley
and George B. Bacskay⁺

Δ_{fH}
ab initio
parent
J. Phys. Chem. A 1999,
103, 4505-4513

Ab Initio Quantum Chemical

Studies of the Formaldimino
xy (CH_2NO) Radical: 1. Isome
rization Reactions.

$C_2NH_5O_2$

[Om. 39761]

1999

NH_2CH_2COOH

see 12

аналитический

Xu Wu Yang, Jian Ren
Liu et al.,

(ΔH) Thermochim. Acta
1999, 329, 109-115

$H_2O_2 - CN^-$
 $H_2O_2 - HCN$
 $H_2O_2 - HNCO$

Daza, Martha C;
et al.,

2000

смп-ра и
смаишн,
теор. расч

Phys. Chem. Chem. Phys.
2000, 2 (18), 4089-94.

(coll. $H_2O_2^\bullet - NO^+$; III)

F: CH3NO

P: 31

133:349854

Bond dissociation energies for nitro derivatives of methane. Miroshnichenko, E.

A.; Vorob'eva, V. P.; Matyushin, Yu. N. Inst.

Khim. Fiz. im. N. N. Semenova, Ross. Akad. Nauk

Moscow, Russia Khim. Fiz., 19(6), 40-43

(Russian) 2000 Nauka. Formation enthalpies of trinitromethane and its salts, C-N bond energies in nitromethanes, nitro group substituent effects on atomization enthalpies, and formation enthalpies of nitromethyl radicals were presented on the basis of literature and new thermochem. measurements.

2000

$R_1R_2C=NO$

Функция

C-N-H-O-
-продукции

(ΔH_f)

Термогидролиз амидов 2000
оматин. коэффициенты

134: 22037e The enthalpies of formation of oximyl radicals. Orlov, Yu. D.; Tomilin, A. A.; Lebedev, Yu. A. (Tver. Gos. Univ., Tver, Russia). *Zh. Fiz. Khim.* 2000, 74(7), 1184-1188 (Russ), MAIK Nauka. The authors detd. the formation enthalpies of 17 oximyl radicals $R_1R_2C=NO\cdot$ two radicals $HON=C\cdot R$ using literature data on bond dissociation energies of oxime mols. and their gas-phase formation enthalpies. The additive-group method was developed for oximyl radicals.

4, N2.

ЖУРНАЛЪ МЕКОНО ЖУРНАЛАМ

2000

(G.M.F.)

134: 73680s Heat capacity and thermodynamic functions of diethylene glycol dinitrate. Ur'vash V. F.; Kupriyanov, V. F.; Kokurina, N. Yu.; Smirnov, A. G.; Kuleshova, T. M. (Research Institute of Chemistry, Lobachevskii Nizhni Novgorod State University, Nizhniy Novgorod, Russia). *Russ. J. Gen. Chem.* 2000, 70(5), 669-671 (Eng), MAIK Nauka/Interperiodica Publishing. The heat capacities of liq., glassy, and cryst. diethylene glycol dinitrate were measured in a vacuum adiabatic calorimeter in the range 80-320 K. Two crystal modifications were obtained, and their m.ps. and enthalpies were detd. The $H^0(T) - H^0(0)$, $S^0(T)$, and $G^0(T) - H^0(0)$ thermodyn. functions of cryst. and liq. diethylene glycol dinitrate were calcd. in the range 0-320 K.

C.A. 2001, 134, N6

Периодический Книто-
Репорт

C-N-H-O-

- (continued)

2000

134: 71279u Thermochemistry of substituted benzenes: quantification of ortho-, para-, meta-, and buttress interactions in alkyl-substituted nitrobenzenes. Verevkin, Sergey P.; Heintz, Andreas (Department of Physical Chemistry, University of Rostock, D-18051 Rostock, Germany). *J. Chem. Thermodyn.* 2000, 32(9), 1169-1182 (Eng), Academic Press. The std. ($p^\circ = 0.1$ MPa) molar enthalpies of formation $\Delta_f H_m^\circ(l, \text{ or cr})$ at $T = 298.15$ K were detd. by means of combustion calorimetry for 2-methylnitrobenzene, 2-ethylnitrobenzene, 2-isopropylnitrobenzene, 2-tert-butyl nitrobenzene, 2,6-dimethylnitrobenzene, 2,6-di-isopropyl-nitrobenzene, and 2,4,6-tri-tert-butyl nitrobenzene. The molar enthalpies of sublimation (or vaporization) of these compds. were obtained from the temp. dependence of the vapor pressure measured in a flow system. The resulting values of $\Delta_f H_m^\circ(g)$ were obtained at $T = 298.15$ K and used to derive strain enthalpies of alkylnitrobenzenes. The intramol. interactions of the substituents were discussed in terms of deviations of $\Delta_f H_m^\circ(g)$ from group additivity rules. These values provide a further improvement on the group-contribution methodol. for the estn. of the thermodyn. properties of org. compds. (c) 2000 Academic Press.

C.A. 2001, 134, N6.

2000

F: $\text{NO}_2+(\text{CH}_3\text{CN})_n$

P: 1

134:243301 Cluster ions: gas-phase stabilities of $\text{NO}+(\text{CH}_3\text{CN})_n$ and $\text{NO}_2+(\text{CH}_3\text{CN})_n$ with $n = 1-5$. Wincel, H. Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sciences, Warsaw, Pol. Int. J. Mass Spectrom. (2000), 203(1-3), 93-100. in English.

The gas-phase equil. of the clustering reactions of NO^+ and NO_2^+ with CH_3CN were measured with a pulsed electron-beam high-pressure mass spectrometer. Thermodyn. quantities, $\Delta H^\circ_{n-1,n}$ and $\Delta S^\circ_{n-1,n}$, of the $\text{NO}+(\text{CH}_3\text{CN})_n$ and $\text{NO}_2+(\text{CH}_3\text{CN})_n$ clusters with $n = 1-5$ were detd. It was found that both clusters with $n = 3$ are relatively more stable toward dissocn. For $n = 1-4$, the thermochem. stabilities of $\text{NO}+(\text{CH}_3\text{CN})_n$ were obsd. to be slightly higher than those of corresponding $\text{NO}_2+(\text{CH}_3\text{CN})_n$. The results suggest a switch of the attacking site on the core ion for the fifth ligand mol. of these clusters at $n = 4$ 5.

2000

F: NO+(CH₃CN)_n

P: 1

134:243301 Cluster ions: gas-phase stabilities of NO+(CH₃CN)_n and NO₂+(CH₃CN)_n with n = 1-5. Wincel, H. Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sciences, Warsaw, Pol. Int. J. Mass Spectrom. (2000), 203(1-3), 93-100. in English.

The gas-phase equil. of the clustering reactions of NO⁺ and NO₂⁺ with CH₃CN were measured with a pulsed electron-beam high-pressure mass spectrometer. Thermodyn. quantities, ΔH°_{n-1,n} and ΔS°_{n-1,n}, of the NO+(CH₃CN)_n and NO₂+(CH₃CN)_n clusters with n = 1-5 were detd. It was found that both clusters with n = 3 are relatively more stable toward dissocn. For n = 1-4, the thermochem. stabilities of NO+(CH₃CN)_n were obsd. to be slightly higher than those of corresponding NO₂+(CH₃CN)_n. The results suggest a switch of the attacking site on the core ion for the fifth ligand mol. of these clusters at n = 4 5.

F: C₃H₈N₂O₂

P: 1

2001

134:257412 Heat capacity and thermodynamic properties of ethyl carbazate (C₃H₈N₂O₂). Di, Y.-Y.; Sun, X.-H.; Tan, Z.-C.; Liu, Y.-F.; Meng, S.-H.; Gao, S.-L.; Qu, S.-S. College of Chemistry and Environmental Science, Wuhan University, Wuhan, Peop. Rep. China. *Thermochim. Acta* (2001), 369(1-2), 25-30. in English.

The low temp. heat capacities of Et carbazate (C₃H₈N₂O₂) were precisely detd. with an adiabatic calorimeter over the temp. range from 78 to 371 K. The sample was obsd. to melt at 318.92 ± 0.02 K. The molar enthalpy and entropy of the melting as well as the chem. purity of the substance were detd. to be 20019 ± 11 J mol⁻¹, 62.77 ± 0.03 J mol⁻¹ K⁻¹ and 99.35 ± 0.01 mol%, resp. The extrapolated melting temp. for the absolutely pure compd. obtained from fractional melting expts. was 319.181 ± 0.005 K.

2001

F: C22H23O3N

P: 1

134:243347 **Heat capacities and thermodynamic properties of fenpropathrin (C22H23O3N).** Tan, Z.-C.; Xue, B.; Lu, S.-W.; Meng, S.-H.; Yuan, X.-H.; Song, Y.-J. Thermochemistry Laboratory, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Science, Dalian, Peop. Rep. China. J. Therm. Anal. Calorim. (2001), 63(1), 297-308. in English.

The heat capacities of fenpropathrin in the temp. range from 80 to 400 K were measured with a precise automatic adiabatic calorimeter. The fenpropathrin sample was prepd. with the purity of

0.9916 mol fraction. A solid-liq. fusion phase transition was obsd. in the exptl. temp. range. The m.p., T_m , enthalpy and entropy of fusion, $\Delta fusH_m$, $\Delta fusS_m$, were detd. to be 322.48 ± 0.01 K, 18.57 ± 0.29 kJ mol⁻¹ and 57.59 ± 1.01 J mol⁻¹ K⁻¹, resp. The thermodyn. functions of fenpropathrin, $H(T)-H(298.15)$, $S(T)-S(298.15)$ and $G(T)-G(298.15)$, were reported with a temp. interval of 5 K. The TG anal. under the heating rate of 10 K min⁻¹ confirmed that the thermal decompn. of the sample starts at ca. 450 K and terminates at ca. 575 K. The max. decompn. rate was obtained at 558 K. The purity of the sample was detd. by a fractional melting method.

C-N-H-O coord. [om. 41968]

[2003]

Cioslowski J. et al. (USA)

Molecular Physics, 2003, 101, №6, 839-858

ΔH

Энергетика, электронная структура и реактивность
didehydroazines =

Вывод: ^{Экспер.} фундаментальное образование пиримидинов
и пирразинов ошибочны!

(Iv.)