

O, H, H₂O, Ar, Kr, Xe, Ne, N, Al-4616 1973
F, Cl, Br, I, HF, HCl, HBr, HI, C, CO, CO₂
(thermodynamic. game)
CODATA.

J. Chem, 1973, 13 (12), 463-5.

Critically estimated and recommended
substance data. Final set of main
thermodynamic data. I. CODATA.

C.A. 1974, 80 N24.137657j (cu. 0.1) M.

HCl

XI-3776

1973

70837h Stepwise scanning flow microcalorimeter system for the determination of enthalpies of mixing of liquids. Enthalpy of dilution of hydrochloric acid. Falk, Bengt; Sunner, Stig (Chem. Cent., Univ. Lund, Lund, Swed.). *J. Chem. Thermodyn.* 1973, 5(4), 553-8 (Eng). For the study of mixing and diln. processes, an automatic stepwise scanning flow microcalorimeter system with punched tape output was assembled and tested. Cycling time for each mixing ratio is 22 min; steady state conditions prevail for more than 10 min. The enthalpy of diln. of HCl at 298.15°K was measured and the results agree with literature values.

(ΔH diln)

C.A.

1973

79 N12

X-1398

XI-3364

1973

HCl (T_u, T_b, T_u, T_u, sH_u, sH_u, sH_s)

Horvath A.L.,

Process Technol. Int.,

1973, 18, n 1-2, 67-69

● B, Li, Mx

1076 903

NaCl ; CsI ; LiBr HCl ; LiCl 1973
 KCl ; HgCl_2 ; BaCl_2 ; $\text{EuCl}_3(\text{aq})$
(Cp) VIII 5900

Кресин В. И. ; Коберин В. А.
История и эволюция. Труды, 1973,
9, N 5, 680 - 687

611

В 2 (см. NaCl ; I).

$C_2H_2 \cdot HCl (\Delta H_m, \Delta H)$ $\bar{X}$ 3733 1973

C_2H_2 , HCl (ΔH_{21} , ΔS_{21})

11, 1464

Шведчиков А.П., Лушер Э.В., Павлова С.У.,

Каплян А.М., Зарбаев М.М.,

Ж. общ. химии, 1973, 43, 10, 2113-2116

Калориметрическое исследование молекуляр-
ных комплексов в системе C_2H_2-HCl при
низких температурах.

РХИ хим., 1974

55847

М, Б. (Ф)

$\Delta H(OH, HCl, H_2O, Cl)$

$\Delta H(OH, HBr, H_2O, Br)$

$\Delta H(OH, HI, H_2O, I)$

Takacs G. A.; Class G. P.

J. Phys, 1973, 77, v16; 1942-1957 (corr)

Reactions of hydroxyl radicals with
some hydrogen halides.

10.

Re Xun, 1974, 25971

10, 4

XI 3601

1973

XI - 3927

1973

HCL all ggs (A14, S, H15-H16)

Z. Chem., 1973, 13, N12, 463-465/revs)

all

1973

HCl

HBr

HJ

Yushin A.S., et al.

Zh. Fiz. Khim., 1973,

47(7), 1028-31.

(4Hf)

• (see. BF₃; I)

H_2 , HCl, HF, HI, HBr (k_p , $lg Q$). 1974

HD, HT, DT (AG); DJ, HJ (k_p)

Bron χ . Paul S. O.,

XI 4188

~~Chem. Soc.~~ χ . Chem. Soc., Faraday Trans. 2,
1974, 70 (7), 1294-300.

Isotope effects on partition
functions and thermodynamic quan-
tities of the stable diatomic hydrides.

C.A. 1974. 81 N.24. 160031m.

HO, M

HCl (T₂)

XI-4718

1974

Gzout P.J., Leech J.W.

J. Phys. C: Solid State Phys., 1974, 7, N18,

3245-3259 (aun.)

the lattice dynamics of crystalline hydrogen
chloride in its low-temperature phase.

PH Xun., 1975

85610

5

9-2

UO_2^+ , HSe (Kp, $\Delta H, S$) 1974

XI-4233

Lysy R., Landresse G., Ducekarts G.

Inorg. and Nucl. Chem. Lett., 1974, 10,

N8, 685-695 (франц.)

Количественное исследование химического
равновесия в растворах расплавленных
солей методом абсорбционной спектроскопии
Применение метода к соединению урана.

РИН Хим, 1975

36856

М, В (Ф)

HCl

DCl

(K_{quce}.)
(b DMF)

XI-4012

1974

74800j Dissociation constants and conductivities of hydrogen chloride and deuterium chloride in N,N-dimethylformamide at 25°. Silvester, Leonard F.; Rock, Peter A. (Dep. Chem., Univ. California, Davis, Calif.). *J. Chem. Eng. Data* 1974, 19(1), 98-100 (Eng). The thermodyn. dissoen. consts. for HCl and DCl in DMF were obtained at 25° from conductance data. The dissoen. consts. on the *M* concn. scale are $(2.68 \pm 0.03) \times 10^{-4}$ and $(2.64 \pm 0.02) \times 10^{-4}$ for HCl(DMF) and DCl(DMF), resp. The values of the limiting molar conductances for HCl(DMF) and DCl(DMF) are 79.85 ± 0.82 and $79.00 \pm 0.62 \Omega^{-1} \text{ cm}^1 \text{ mole}^{-1}$, resp.

C.A. 1974. 80. N14

⊕ ⊗

41225.1279

X4381
38892

1974

Ch HF, HCl, HBr, HI (Typ, ΔH_v , P , C_p , ΔH_f , ΔG_f)

Yaws Carl L., Adler Louis S. Hydrogen
halides: HF, HCl, HBr, HI.

"Chem. Eng.", 1974, 81, N23, 113-120, 122

(англ.)

Сем. HF, I)

0260

246 248

ВИНИТИ

Сл, НСл (вЗовн в полнхор- 1974.
пентаке) XI-4587

Вербовская Л.М., Лебедев Я.Д.,
Ратников Ю.П.,

НС, фриз; жмшш, 1974, 48 (10),
26-11.

Растформиветв хора, хлорис-
того водорода, дигтор - и дигторх-сор-
танов в хлорр  гинч. растверите-
л. и х.

С. А 1975. 22 и 6. 35455 х. (см. В сл; I)

XI-4487

1975

HCl

153539w Temperature dependence of standard emf. of the Pt(H₂)/HCl/AgCl, Ag cell in ethylene glycol. Aleksandrov, V. V.; Bezpalyi, B. N. (Khar'k. Gos. Univ. im. Gor'kogo, Kharkov, USSR). Zh. Fiz. Khim. 1975, 49(5), 1314-16 (Russ). The electromotoric force of the cell was measured at 20-90° in abs. ethylene glycol [107-21-1]. The std. emf at the same temp. is more neg. in ethylene glycol than in water and the changes with temp. is greater in ethylene glycol than in water. The free energy of solvation was calcd. and the values detd. of entropy and enthalpy of solvation of HCl [7647-01-0].

M. Wiedemann

 ΔH_{soln} ΔS_{soln}

C.A. 1975, 83, 18

СС (Δ G solv.) XI-4748 1975

Александров В.В., Лебедев В.И.,
Березный Т.А., Шихова Т.И.,
Безнальный Б.Н., Глазкова Е.Н.,

Тезисы докл. 5^{ая} Всесоюзн.
Совещ. по Электрохимии, 1974,
(Труды. 1975) 1, 19-21.

Электрометр рН-селективное и селек-
тивное влияние температур...
С.А. 1975. 23 и 22. 1344374 В ?

$\text{Br}_2, \text{Cl}_2, \text{F}_2, \text{I}_2, \text{HBr}, \text{HCl}, \text{HF}, \text{H}_2, \text{SF}_6, \text{CO}_2, \text{1975}$
 $\text{CO}, \text{D}_2\text{O}, \text{H}_2\text{O}_2, \text{HNO}_3, \text{NO}, \text{N}_2\text{O}, \text{O}_2, \text{O}_3, \text{H}_3\text{PO}_4, \text{SO}_2, \text{SO}_3,$
 $\text{H}_2\text{SO}_3, \text{NH}_3, \text{D}_2, \text{N}_2\text{H}_4, \text{H}_2, \text{HCN}, \text{N}_2 (\text{T}_{\text{mp}}, \text{T}_{\text{b}}, \text{T}_{\text{m}}, \text{T}_{\text{g}}, \Delta H_{\text{f}},$
 $\Delta H_{\text{m}}, \Delta H_{\text{s}}, \Delta H_{\text{f}}, \text{S}, \text{Cp}, \text{P}, \Delta H_{\text{v}})$
 Horvath A.L.

4400

11, 12, 13, 14

Physical properties of inorganic compounds.
 SI units. London. Edward Arnold, 1975. xiii, 466 pp.
 1 fl. (quar.)

PH 11/1000, 1975

(enc. Br_2)

B, M

92

35

HCl

XI - 4484

1975

NOCl

(ΔH soln
to CCl₄)

121546c Liquid-gas equilibrium in hydrogen chloride-carbon tetrachloride and nitrosyl chloride-carbon tetrachloride systems. Khodceva, S. M.; Rozovskii, M. B. (Gos. Nauchno-Issled. Proekt. Inst. Azotn. Prom. Prod. Org. Sint., Moscow, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1975, 49(6), 1396-400 (Russ). The equil. pressure in the HCl-CCl₄ and NOCl-CCl₄ systems was detd. at <2.5 mole% HCl, <12.5 mole% NOCl, <1 atm, and 20-50°. Equil. compns. of the vapor and liq. phases were calcd. Concn. dependences of partial pressures of the components were correlated by an empirical equation. Integral heats of soln. of HCl and NOCl in CCl₄ and Henry's consts. were calcd.

K. A. Hlavaty

+1



C.A. 1975. 23 N 14

HCl

Tm, Tb,
ΔH tr
физ. св. ва

1975
Монография: физ. св. ва
неорг. соедин. Единичн. Сп.

Edward H, 1975, 466 pp.
London.

/сн В22; I)

1975

HCl
COCl₂

(+1)

T_{run}

137583a Liquid-vapor equilibrium in the hydrogen chloride-phosgene system at 760 mm Hg. Goldberg, N. A.; Gorbushenkov, V. A.; Zinov'ev, G. N.; Kucheryavii, V. I. (USSR). *Zh. Prikl. Khim.* (Leningrad) 1975, 48(5), 1052-5 (Russ). The compns. of coexisting phases between the b. ps. of HCl, -84.5°, and of phosgene, 8.2°, are detd. in connection with sepn. and recovery from side products in the prodn. of org. isocyanates. HCl contents in the liq. and the gas phase are given together with the resp. activity coeffs. for both components. Activity coeffs. of both components have inflections at $x_{\text{HCl}} = 0.45$, γ_{HCl} passing through a max. and γ_{COCl_2} through a min.

L. Nedeljkovic

C.A. 1975. 83 N16

HCE

(обзор)

ХТ - 5165

1976

2 В4. Физические и термодинамические свойства хлористого водорода. Adler Louis S., Yaws Carl L. Physical and thermodynamic properties of hydrogen chloride. «Solid State Technol.», 1976, 19, № 1, 35—38 (англ.)

Обзор. Представлены в виде графиков, построенных на основании эксперим. данных и теор. зависимостей, теплота испарения, уд. теплоемкость жидк. HCl, плотность жидк. HCl, уд. теплопроводность жидк. HCl, вязкость жидк. HCl, поверхностное натяжение в области т-р от -120 до 50° ; уд. теплоемкость при давл. 1 атм, вязкость пара, уд. теплопроводность, теплота образования, свободная энергия образования в области т-р от -200 до 1400° и давл. пара HCl в области т-р от -125 до 50° . Библ. 42.

А. А. Бухаров

ΔH_v , Cp
p, ΔH_f
 ΔG_f

X 1977 N2

BX-683

1976

HCE ($\Delta H a g$) 4 sp.

Bennington K.O., Ferrante M.J.,
Stowe J.M.

Rept Invest. Bur. Mines U.S. Dep.
Inter, 1946, N 8187, 19 pp (ann.)

PMXUM, 1944 105958 F, M

HCl

DCl

1976

3 E313. Термодинамические свойства твердых галогеноводородов и галогенодейтеридов. I. HCl и DCl. Chinaga Hideaki, Inaba Akira. Thermodynamic properties of solid hydrogen halides and deuterium halides. I. HCl and DCl. «J. Chem. Thermodyn.», 1976, 8, № 10, 915—934 (англ.)

Теплоемкость твердого и жидкого HCl и DCl измерена в интервале t -р $2—164^{\circ}\text{K}$ с помощью адиабатич. калориметра с погрешностью 0,5%. Измерено также давление паров этих в-в выше 130°K . Энтальпии плавления найдены равными 1970,5 и 1945,0 дж/моль, t -ры тройных точек $159,030$ и $158,383^{\circ}\text{K}$, давления в тройных точках $13,80$ и $12,59$ кПа, энтальпии превращений 1186 и 1386 дж/моль, t -ры превращений $98,67$ и $104,63^{\circ}\text{K}$ для HCl и DCl соответственно. Фазового превращения при 120°K в монокристалле HCl, описанного в литературе, авторы не обнаружили. Библ. 26.

 T_{tr}, C_p $\Delta H_m, P$

Ф 1977 №3

(+1) [X]

Нсе

Впр - 4883 - XI

1986

15 Б818. Теплоемкость твердого HCl вблизи 120°K .
Chihara Hideaki, Inaba Akira. Heat capacity
of solid HCl near 120°K . «J. Phys. Soc. Jap.», 1976,
40, № 2, 597—598 (англ.)

(ср) Теплоемкость тв. HCl измерена в интервале 98°K —
т. пл. с точностью 0,1—0,2%. Результаты представлены
графически и хорошо согласуются с ранней работой
Джиока, указывая на отсутствие какой-либо аномалии
теплоемкости в этой т-рной области, где по данным
рентгеноструктурного анализа и спектров КР обнару-
жен фазовый переход при $\sim 120^{\circ}\text{K}$. Вблизи т. пл. уста-
новлено аномальное возрастание C_p вследствие обра-
зования вакансий в крист. решетке. Л. Резницкий

X, 1976, 15.

HCl (76)

B9p-4883-XI

1976

+) 84:112552x Heat capacity of solid hydrogen chloride near 120K. Chihara, Hideaki; Imba, Akira (Fac. Sci., Osaka Univ., Toyonaka, Japan). *J. Phys. Soc. Jpn.* 1976, 40(2), 597-9 (Eng). No anomaly is detected within the expth. error of $\pm 0.2\%$ in the heat capacity of solid HCl, either single crystal or polycrystals that corresponds to the transition at 120°K proposed by neutron diffraction studies.

(cp)

C.A. 1976, 84 N16

Нсе

ВР - 4883 - XI

1976

V 8 E279. Теплоемкость твердого HCl вблизи 120°K
Chihara Hideaki, Inaba Akira. Heat capacity
of solid HCl near 120°K . «J. Phys. Soc. Jap.», 1976, 40,
№ 2, 597—598 (англ.)

Детально, с погрешностью $\sim 0,2\%$, изучено поведение
теплоемкости HCl вблизи т-ры предполагавшегося фа-
зового превращения ($\sim 120^{\circ}\text{K}$). Ни для монокристал-
лов, ни для поликристаллов никаких признаков анома-
лии теплоемкости не обнаружено.

(Cp)

ф 1976 N 8

HCl

DCl

6 Б799. Термодинамические свойства твердых галогенидов водорода и дейтерия. I. HCl и DCl. China ga Hideaki, Inaba Akira. Thermodynamic properties of solid hydrogen halides and deuterium halides. I. HCl and DCl. «J. Chem. Thermodyn.», 1976, 8, № 10, 915—934 (англ.)

В адиабатич. калориметре в интервале t -р 2—164° K измерены теплоемкости тв. и жидк. HCl (I) и DCl (II). Чистота образцов, определенная по депрессии t -ры плавления, 99,98 и 99,97 мол.% соотв. Рассчитаны и табулированы их термодинамич. функции. В интервале 130—160° K измерены давл. насыщ. паров I и II. Для тв. I и II результаты описаны уравнениями $\lg P$ (IIa) = $-911,31/T + 9,1875 + 0,004313T$ и $\lg P$ (IIa) = $-1079,74/T + 11,5304 - 0,003896T$. Тройным точкам чистых I и II соответствуют t -ры $159,052 \pm 0,005$ и $158,410 \pm 0,005$ ° K и давл. 13,899 и 12,478 кПа. Энтальпии плавления составили 1970,5 и 1945,0 дж/моль. Твердофазовым переходам I и II отвечают t -ры $98,67 \pm 0,01$ и $104,63 \pm 0,01$ ° K с энтальпиями 1186 и 1386 дж/моль соотв. Описанный в лит-ре еще один твердофазовый переход I при 120° K не наблюдался.

А. Кисилевский

1976

Cp, Tm, P,

Ttr, ΔHtr

X. 1974

нб

41

X

$\text{UCl}_4, \text{UO}_2\text{Cl}_2 (\Delta H_{aq}, \Delta H_f)$ XVIII-861 1976
 $\text{UO}_2, \text{U}(\text{CH}_3\text{CO}_2)_4, \text{HCl}, \text{UO}_3, \text{FeCl}_2, \text{FeCl}_3 (\Delta H_{aq})$
Cordfunke E.H.P., Ouweltjes W., Prins G.
J. Chem. Thermodyn., 1976, 8, N3, 241-250 (corr)
Standard enthalpies of formation of uranium
compounds. II. UO_2Cl_2 and UCl_4 .

PHH:usa, 1976

165834

B, M (CP)

70222.6622

96201

Ch, Ph, TC

M.C. (Tm)

1976
XI - 5486

Kanney L.B., Gillis N.S., Raich
J.C. Temperature dependent frequency
spectrum of solid orthorhombic HCl.
"Chem. Phys. Lett.", 1976, 44, № 3,
495-498 (англ.)

08 18 1976

773 775

0.10

ВИНИТИ

HCl

Miskiewicz Stefan. 1976

Ber. Bunsenges Phys

Chem. 1976, 80(5) 395-405

(Ger)

(on C_2H_2 ; I)

ΔH_{tr} , ΔH_{in}

Hcl

Parkash Ram.

1976

"Acta Cienc. Indica",
1976, 2(4), 333-5.

(K. guceors.)

I
● (cer. HSD₃ F)

HCl(aq) ~~ammick~~ 1911, 1976
Singh P.P., et al.

(Cp) Can. J. Chem., 1976
54, 3315-18.

1976

HCl

) 84: 155796x Physical and thermodynamic properties of hydrogen chloride. Yaws, Carl L. (Measurex Corp., Cupertino, Calif.). *Solid State Technol.* 1976, 19(1), 35-8 (Eng). By using the available exptl. data and equations for correlating and extending the data, property-vs.-temp. plots were obtained for: the vapor pressure, heat of vaporization, heat capacity, d., viscosity, surface tension, and thermal cond. of liq. HCl from the m.p. to the crit. point; the heat capacity, viscosity, and thermal cond. of HCl gas from ~ -200 to $\sim +1400^\circ$; and the heat and free energy of formation of HCl from -200 to $+1400^\circ$.

($P, C_p, \Delta H_f,$
 ΔG_f)

C.A. 1976 84 N22

Нсе

1974

У 2 Б1391 Деп. Расчет констант нестойкости сильных электролитов по данным электропроводности и растворимости. Ермоленко В. И., Ермоленко Г. И., Иванов. хим.-технол. ин-т. Иваново, 1977. 22 с., библиогр. 33 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 27 сент. 1977 г., № 3764—77 Деп.)

Посредством учета последовательного комплексообразования в р-ре расширена область применения теории сильных электролитов. По данным электропроводности конц. р-ров рассчитаны константы нестойкости 17 бинарных электролитов. Для HCl вычислены последовательные константы нестойкости: $K_1=4,0$, $K_2=0,7$, $K_3=0,1$, $K_{23}=0,7$ и константы гидратации от моно- до наногидрата, равные (1,1; 1,4; 3,2; 4,0; 6,0; 20; 27; 28 и 28,4) $\cdot 10^{-4}$ соотв. Рассмотрены закономерности р-римости электролитов. Первоначальное увеличение р-римости в системе MA—BL обусловлено образованием ML и BA. По уменьшению р-римости под действием общего иона и уменьшения активности воды для 42 систем MA—BA рассчитаны константы нестойкости и гидратные числа электролитов.

Автореферат

К нестойкости

2, 1978, №

HBF_4 , NaCe , HceO_4 , HBr , Hce ,
 HNO_3 (Кс) ВХ-1597

1977

Фролов Ю.Г., Денисов Д.А.,
Судякова Т.Н., Краснотетков В.В.
Сб. докл. тр. Моск. с.-х. акад. им. К.А. Тимирязева,
1977, №233, 121-123. (материал рассматривается)
диссоциации сильных электролитов.

РДХ № 1978

1651722

В (95)

1977

5 Б888. Исследование кинетики и механизма реакций окисления галоидводородов. Гаврилин А. П., Кочубей В. Ф., Моин Ф. Б. В сб. «Горение и взрыв». М., «Наука», 1977, 554—559

При атмосферном давл. в изотермич. условиях изучена кинетика и механизм окисления галогеноводородов ($HX=HCl, HBr, HI$) в интервале t -р 853—1423, 723—873 и 375—473 К соотв. В случае HCl применялась струевая методика, в случае HBr и HI р-ция проводилась в статич. реакторе в условиях, исключающих фотохим. и термич. распад. В опытах использовались смеси HX, O_2, N_2 и He . При больших глубинах превращения наблюдается торможение р-ции продуктами. Скорость р-ции уменьшается при добавлении в реакц. смесь X_2 . Порядки р-ции по O_2 и HX равны 1. Величины констант скорости р-ции не зависят от s/v , что свидетельствует о гомог. характере процесса. Предложен след. механизм р-ции: $HX + O_2 \rightleftharpoons HO_2 + X$ (0), $HO_2 + HX \rightarrow H_2O_2 + X$ (1), $H_2O_2 \rightarrow 2OH$, $OH + HX \rightarrow H_2O + X$, $2X + M \rightleftharpoons X_2 + M$, $HO_2 + H \rightleftharpoons H + O_2 + M$, $2HO_2 \rightarrow H_2O_2 + O_2$. Две последние р-ции не играют существенной роли при окислении HX , кислород расходуется

HCl
 HBr
 HI
7295-15-68

ΔH_f°
=

⊠ (13) 20

2, 15, 1978

только по р-ции (0). Изученная р-ция представляет собой радикальный (цепной) процесс, лимитирующей стадией к-рого являются р-ции бимолек. зарождения радикалов. Значения k_0 , $\lg A$ и E для указанного ряда НХ равны соотв. 12,30; 11,94; 12,15 см³/моль·сек, 12,68; 12,09, 12,4 см³/моль·сек, 51,5; 36,4; 20,1 ккал/моль. Выражение для K имеет вид $K=10 \exp (-12500/RT)$ см/моль·сек. Определены термодинамич. характеристики

ки для радикала HO_2 и НХ: полные энтальпии I_T° составляют 10,25; 6,07; 1,75 ккал/моль, энергии разрыва связи в НХ $D_0(\text{H}-\text{X})$ при 0° равны 102,2; 86,68; 70,41 ккал/моль, энергии разрыва связи в радикале HO_2 при 0° $D(\text{H}-\text{O}_2)$ равны 50,13; 49,76; 50,12 ккал/моль, станд. теплоты образования радикала HO_2 $\Delta H_{f293,15}^\circ$ составляют 0,81; 1,17; 0,83 ккал/моль.

П. И. Валов

НСС

1977

Уварова С.Ф., и др.

4 Ндегидр. НС. груз. химии,
1977, 51(6), 1568

● (сод. HNO_3 ; I)

1977

HF-HCl

14 Б396. Водородная связь. Структура HF—HCl. Janda Kenneth C., Steed Joseph M., Norrick Stewart E., Klemperer William. Hydrogen bonding: the structure of HF—HCl. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 11, 5162—5172 (англ.)

Методом спектроскопии электрич. резонанса на молек. пучках исследована структура комплекса HF—HCl. Исследованы также спектры в радиочастотной и микроволновой областях для изотопно замещенных комплексов HF—HCl, HF—H³⁷Cl и HFD³⁵Cl. Сделан вывод, что комплекс существует за счет слабой Н-связи, геометрич. характеристика к-рой качественно хорошо предсказываются донорно-акцепторной моделью. Определены спектроскопич. константы для состояния $K=0$ имеют след. значения HF·HCl³⁵ и HF·H³⁷Cl. В равновесном состоянии комплекса внутренний атом Н лежит на прямой, соединяющей атомы F и Cl на расстоянии 2,12 Å от атома F. Связь Н—F составляет угол 50° с прямой F—Cl.

В. А. Лившиц

водородн.
связь

М.И.

x, 1978, N14

HCl

1977

§7: 173515w Solubility of hydrogen chloride in o-dichlorobenzene. Lavrova, E. M.; Tudorovskaya, G. L. (USSR). *Zh. Prikl. Khim.* (Leningrad). 1977, 50(9), 2105-6 (Russ). The soly. (S) of HCl in o-C₆H₄Cl₂ was detd. at 20-165° and 760 mm. The heat and entropy of soln. are -2.603 kcal-mol and 16.464 cal mol⁻¹K⁻¹. The temp. dependence is given by $\log s = -[\exp ((569/T) - 3.601)] / 2.302(569/T^2)$.

$\Delta S, \Delta H$ soln
в газ. фазе

C.D. 1977. 87 v 22

NaSe, NaOH, KSe, KOH, HSe(Kc)

1977

ВХ-1237

Лукашов Ю.М.

Теплогазоснабжение и теплоэнергоснабжение
Ростов ИД., 1977, 99-119

Термодинамический анализ процесса
диссоциации веществ в H_2O в широком
диапазоне параметров состояния

ИИХ Хим., 1978

1561543

В (ф)

Me +
DCE +

1977

Rosenstock M. M. et al

J. Phys. Chem. Ref. Data,
1977, 6. suppl. n1, p 1-454

T. G.
CB-Ca

UCL + 2

1977

Rosenstock M. M. et al

J. Phys. Chem. Ref. Data,
1977, 6. Suppl. v1, p1-455

T.G.
cbba

Hce

1977

- 20 Б750. Исследование с помощью комбинационного рассеяния твердых фаз HCl, DCl, HBr и DBr. Vessel J. E., Torrie B. H. A Raman scattering study of the solid phases of HCl, DCl, HBr, and DBr. «Can. J. Phys.», 1977, 55, № 6, 592—603 (англ.; рез. франц.)

(T_{tr})

Исследована т-рнз (T=72—160° K) зависимость спектров КР крист. HCl, DCl, HBr и DBr. При переходе из высокот-рной кубич. фазы в низкот-рную сегнето-электрич. фазу (симметрия — C_{2v}¹², Bb2_{1m}) наблюдался (за исключением HCl) сдвиг линий, их расщепление и изменение полуширины. Фазовый переход для HCl (T_c ~ 120° K) обнаруживается лишь по изменению сте-

X. 1977 N 20


 (+2) 

пени деполяризации линий. Гистерезис в области T_c для НВг указывает на наличие промежут. кубич. фазы, в случае ДВг такая новая фаза существует при t -рах $119,5—127^\circ \text{K}$. При повышении t -ры и приближении к T_c линии, относящиеся к внеплоскостным и либрац. колебаниям, сильно уширяются. Это указывает на возрастание их амплитуды, приводящее к нарушению ориентации осей молекул и к переходу в параэлектрич. фазу.

А. В. Бобров

HCl (p-p b CH₃OH aq)

1977

неприм.
сб-ба

S6: 128544y Thermodynamic properties of hydrogen chloride in water-methanol solutions. Vasil'ev, V. P.; Grechina, N. K.; Samoilova, N. Yu. (USSR). Tr. Ivanov. Khim.-tehnol. Inst. 1976, (20), 83-7 (Russ). From Ref. Zh., Khim. 1977, Abstr. No. 1B1276. Title only translated.

C. A. 1977. 86 n 18

HCE

ommu 5890 1977

Watson R.T.

madness &
mexico.
cb-b

J. Phys. and Chem.
Ref. Data, 1977,
916-17

6/
1

HCl

оттиск 7872

1978

19 Б1450. Энтальпии разбавления растворов фосфатов при 30°. Millero Frank J., Duer Wayne C., Shepard Elizabeth, Chetirkin Peter V. The enthalpies of dilution of phosphate solutions at 30°C. «J. Solut. Chem.», 1978, 7, № 12, 877—889 (англ.)

Калориметрически определены энтальпии разбавления водн. р-ров HCl, NaOH, H₃PO₄, NaH₂PO₄, Na₂HPO₄ и Na₃PO₄ в интервале конц-ий 0,1—1,0 Мл при 30°. С помощью расширенной формы предельного закона Дебая—Хюккеля рассчитаны относит. кажущиеся мол. энтальпии (Φ_L) для электролитов HCl, NaOH, NaH₂PO₄ и Na₂HPO₄. Кажущиеся мол. энтальпии Na₃PO₄ исправлены с учетом гидролиза иона PO₄³⁻, существенного при малых конц-иях Na₃PO₄. Оценена теплота гидролиза иона PO₄³⁻ при бесконечном разбавлении, $\Delta H_D^0 = -9525 \pm 150$ кал/моль. Рассчитаны значения Φ_L для H₃PO₄ с учетом ее ионизации. Теплота ионизации H₃PO₄ до ионов H⁺ и H₂PO₄ найдена равной -1900 ± 150 ккал/моль. Оценен вклад ионизации в изменение Φ_L при разбавлении р-ров H₃PO₄ различной концентрации.

М. И. Шилина

(ΔH_{aq})

(+3) ⊠

Х-1974/115

HCl

1978

Кислота.
Кислоты.

90: 157885y The ionization constant of hydrochloric acid as a function of temperature and pressure. Frantz, J. D.; Popp, R. K. (Geophys. Lab., Carnegie Inst. Washington, Washington, D. C.). *Year Book - Carnegie Inst. Washington* 1977 (Pub. 1978), 823-6 (Eng). Addnl. buffer calibration studies were made of the HCl dissociation const. at 400-700° and 1000-2000 bars using the hematite + magnetite O buffer. The ionization const. is given as $\log K = A + B/T$ where $A = -(13.49 \pm 1.14), -(12.34 \pm 0.564), -(12.85 \pm 0.447)$, and $B = 8426.4 \pm 784, 7792.5 \pm 395, 8368.2 \pm 309$ at 1000, 1500, and 2000 bars, resp. ($T = \text{temp.}$). The results can be used to calibrate Ag + AgCl or other chloride buffers in mineral-soln. equil. studies.

C. A. 1979. 90 v 20

1978

17 Б930. Термодинамические свойства и фазовые переходы твердых галогенидов водорода и дейтерия. Inaba Akira, Chihara Hideaki. Thermodynamic properties and phase transitions of solid hydrogen halides and deuterium halides. «J. Chem. Thermodyn.», 1978, 10, № 1, 65—84 (англ.)

Полученные ранее эксперим. данные по низкот-ным теплоемкостям и спектроскопич. характеристикам тв. HCl (I), HBr (II) HI (III), DCl (IV), DBr (V) и DI (VI) проанализированы и обработаны с целью вычисления термодинамич. св-в и выяснения механизма фазовых превращений в I—VI. По зависимостям $C_p T^{-3}$ от T^2 рассчитаны характеристич. т-ры Дебая при 0 К, равные $144,2 \pm 1,0$, $101,5 \pm 0,5$, $82,5 \pm 0,3$, $143,7 \pm 1,0$, $100,6 \pm 0,8$ и $84,0 \pm 0,5$ К для I—VI соотв. Вычислены энтальпии сублимации I—III, V—VI при 0 К, равные 20,85, 23,30, 26,52, 24,25 и 27,43 кдж/моль соотв. По зависимости давл. паров фазы к I от т-ры и энтальпиям фазовых переходов рассчитаны статич. энергии решетки фаз к I и к III галогенидов, к-рые составили 25,03 и 25,85, 26,60 и 27,46, 28,20 и 30,03, 23,81 и —, 25,92 и 27,72, 27,44 и 30,15 кдж/моль для I—VI соотв. Графически представлены т-рные зависимости характери-

HCl

5585-11-68

 $\Delta H_{\text{тв}}; \Delta H_{\text{с}}$

(45) ☒

2.194.114

стич. т-р Дебая I—VI. Вычислены энергии переориентации молекул в процессах низкот-рных фазовых переходов в I—VI, равные 2,61, 1,90, 2,20, 4,04, 1,44 и 3,65 кдж/моль. Определены энтальпии и энтропии фазового перехода к III→к II в II—III, V—VI, равные 490 ± 10 дж/моль и $5,77 \pm 0,2$ дж/моль К, 382 ± 10 и $5,75 \pm 0,2$, 497 ± 10 и $5,77 \pm 0,2$, 424 ± 10 и $5,80 \pm 0,2$ соответственно.

П. М. Чукуров



B9-XI-5825

1978

88: 129213t Thermodynamic properties and phase transitions of solid hydrogen halides and deuterium halides. Inaba, Akira; Chihara, Hideaki (Fac. Sci., Osaka Univ., Toyonaka, Japan). *J. Chem. Thermodyn.* 1978, 10(1), 65-84 (Eng). By analyzing the results of thermal measurements on solid H halides and D halides described in the preceding papers, the vibrational properties and the mechanism of the phase transitions are discussed. From the low-temp. region, a no. of properties were derived, in particular, the apparent Debye characteristic temps. at $T = 0$ and as a function of temp., the enthalpies of sublimation at $T = 0$, the static lattice energies, and the energies required to reorient a mol. in the lowest phase III. In the region below the triple point the enthalpies of vacancy formation were obtained. In the transition region the configurational heat capacities were sepd. and the thermodyn. properties of the transitions derived. The existence of local order in phase I and the peculiar behavior of the disordering process in the chlorides are discussed. The mechanisms of phase transitions were correlated with the mol. interactions.

C.A., 1978, 88, N18

HCl(aq)

COMMUCK 2432

1978

(P-V-T)

89: 31008a Equation of state for the vapor of concentrated and diluted hydrochloric acid. Kindler, Wolfgang; Wuester, Guenter; Rau, Hans (Inst. Thermodyn., Rheinisch-Westfael. Tech. Hochsch., Aachen, Ger.). *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* 1978, 82(5), 543-5 (Eng). Pressure-vol.-temp. relations were measured for HCl aq. with mole fractions of HCl up to 0.23 at ≤ 780 K and ≤ 150 bar. A simplified Redlich-Kwong equation was fitted to the results and is able to describe the behavior in the single- (vapor-) phase region fairly well (mostly $\pm 1\%$). The satn. line is also given as a function of temp. and mole fraction of HCl.

C.A., 1978, 89, NY

1978

HCl

Li W. K., et al.,

(ΔH_f)

"Chem. Phys. Lett.", 1978,
57, No. 2, 211-213.

● (cal. CCl_2 ; I)

Нсе

1978
Д 13 Б1304. Термодинамика диссоциации HCl в смесях воды и диоксиана. Шкодин А. М., Ратянидзе Н. Н., Вьюнник И. Н. «Сакартвелос ССР Мецнеребата Академის მოამბე, Сообщ. АН ГрузССР», 1978, 92, № 3, 641—644 (рез. груз., англ.)

При изменении т-ры от 5 до 45° (шаг 10°) измерена электропроводность р-ров HCl в водн. диоксана. (I). Конц-ию I варьировали от 50 до 90 вес.%. Из т-рной зависимости констант диссоциации, найденных методом Шидловского, определены и табулированы термодинамич. функции диссоциации. Установлено, что ΔG увеличивается с ростом конц-ии и т-ры. Отмечено, что в смесях, содержащих менее 35 мол.% I, наблюдается небольшое увеличение ΔG . Затем ΔG увеличивается более резко. Значения ΔH и ΔS в изученном интервале остаются постоянными. Отмечено, что в изученной системе изменение ΔG обусловлено энтропийной составляющей. Сделан вывод о значительных структурных изменениях в р-ре при диссоциации кислоты.

В. В. Сергиевский

ΔG, ΔH, ΔS

2. 1979, N13

HCl

1979

90. 21.063u Thermodynamics of the solvation of hydrogen chloride ions in an ethylene glycol-water system. Aleksandrov, V. V.; Bezpalyi, B. N. (Khar'k. Gos. Univ., Kharkov, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1979, 53(3), 785 (Russ). The free energy, entropy (ΔS), and enthalpy (ΔH) of solvation of HCl in ethylene glycol [107-21-1] and ($c = 1.5-98.3$ mol %) ethylene glycol-water mixts. were detd. at 20-80° by the EMF method. The presence of extrema at $c = 50-55$ mol% on the ΔH vs. c and ΔS vs. c solvate shells. The results are compared with those obtained in monohydric alc.

$\Delta S, \Delta H, \Delta G$
(co-solvation)

C.A. 1979, 90, 1215

1979

HCl

92: 136292d Calorimetric study of absorption of hydrogen sulfide in aqueous solutions of ethanolamines. Elegant, L.; Maria, P. C.; Ziari-Chalmani, N. (Lab. Thermodyn. Exp., Univ. Nice, 06034 Nice, Fr.). *J. Therm. Anal.* 1979, 17(1), 101-5 (Fr.). Absorption heats of H_2S in aq. solns. of mono-, di-, and triethanolamine were detd. by calorimetry. The measured heats were compared to those calcd. on the basis of soly. measurement and to the heats of protonation of HCl at 25°.

(ΔH protonation)

C. 4. 1980. 92 N16

$(\text{CH}_3)_4\text{NCl}$, KCl , KBz (Пр) $\text{BX}-1872$ 1979

HCl , HBz (Кс)

Kolthoff I.M., Chan Zooni M.K.
J. Phys. Chem., 1979, 83, N4, 468-474 (англ.)
Acid-Base Equilibria of Hydrochloric and
hydrobromic acids in isopropyl and tert-butyl
alcohols.

РЖ Хим., 1979

1451392

B (CP)

HCl(T_H)

$\overline{X}$ - 6313

1979

Liatajka Z., Ratajczak H.

Chem. Phys. Lett., 1979, 66, N2, 262, 1979
(англ.)

Molecular orbital calculations for the
HCl crystal.

РЖХим., 1980

65476

● Б(ф)

1979

HCl
(Tp.m)

Lobo L. Q., et al.,
Cryogenics 1979, 19(6),
325-8.

(all. CF₄; I)

1979

НСС

$\Delta H, \Delta S$

1) 22 Б1376. Самоассоциация хлористого водорода в неводных растворителях. Сергеев Г. Б., Поляков В. А., Смирнов В. В., Ростовщикова Т. Н. «Ж. физ. химии», 1979, 53, № 8, 1946—1949
 В интервале t - p 173—301 К методом ПМР-спектроскопии высокого разрешения изучены межмолек. взаимодействия в системах хлористый водород (I) — р-ритель [метиленхлорид (II), 1,2-дибромтетрафторэтан (III)]. Константа равновесия, изменения энтальпии и энтропии димеризации I в III равны соотв. $K = 0,53$ дм³/моль, $\Delta H = -8,0 \pm 1,0$ кдж/моль, $\Delta S = -31,0 \pm 1,0$ дж/моль·град. Обнаружено образование комплексов с водородными связями между I и II. Резюме

2.1979/22

НСС

1979

11 Б1352. Термодинамика диссоциации HCl в смесях этиленгликоля и диоксана. Шкодин А. М., Ратианидзе Н. Н., Вьюнник И. Н. «Сакартвелос ССР Мецнеребата Акадеმის მოამბე, Сообщ. АН ГрузССР», 1979, 96, № 2, 349—352 (рез. груз., англ.)

термодинамика диссоциации.
При изменении t -ры от 5 до 45° (шаг 10°) определена электропроводность HCl в смесях этиленгликоля и диоксана (I). По t -рной зависимости констант диссоциации определены и табулированы термодинамич. ха-



2.1980. N 11

характеристики диссоциации HCl . ΔG увеличивается с ростом конц-ии I и т-ры, что указывает на энергетич. затруднения процессу диссоциации. В изученном интервале т-р ΔH и ΔS диссоциации практически постоянны. На зависимостях ΔG от состава р-рителя выделены три участка: 1) незначит. увеличение с ростом конц-ии I до 20—25 мол.%; 2) резкий рост ΔG при последующем увеличении конц-ии I до 50 мол.%; 3) дальнейшее плавное возрастание ΔG . Отмечено, что знак ΔG диссоциации HCl в изученных смесях определяется энтропийной составляющей, вклад к-рой увеличивается с ростом конц-ии I . Обсуждены зависимости ΔS и ΔH от состава растворителя.

В. В. Сергеевский

HCl

Compend 8098

| 1979.

(ΔH°)

Tamagake K., et al.

J. Phys. Chem., 1979,
83 (8), 1000-1007

Н.С.

2 Б1585. Исследование растворимости хлористого водорода в тетрахлоридах кремния и германия. Де-1980
вятых Г. Г., Краснова С. Г., Филимонова И. В. «Получ. и анализ чист. веществ». Горький, 1980, 51—54

Статическим методом исследована р-римость хлористого водорода (I) в тетрахлоридах кремния (II) и германия (III) в интервале т-р от 243 до 303 К и при общем давл. до 10^5 Па. Установлено, что р-римость подчиняется закону Генри. Определены значения парц. мольных энтальпии и энтропии р-рения I в II и III при указанных условиях. Расчет кон-

растворим.

в SiCl_4 ; GeCl_4

хроматич. светом 334 или 313 нм) с бутеном-1 (I) при давл. 0,4—400 мм. Найдено, что по двойной связи молекулы I присоединяется доля горячих атомов H, не превышающая 35%. Остальные горячие атомы претерпевают термализацию, к-рая происходит путем ступенчатых потерь энергии возбуждения. Методом Райса — Рамспергера — Касселя — Маркуса вычислены константы скорости диссоциации колебательно-возбужденных втор- и н-бутильных радикалов, возникающих при присоединении H к молекуле I. Расчетные данные хорошо согласуются с эксперим. величинами. Это показывает, что диссоциирующие радикалы образуются

X. 1481 N2

21925
M

при первом же столкновении горячего атома Н с молекулой I. Найдено, что из реагирующих горячих атомов $\sim 30\%$ присоединяется к неконцевому положению двойной связи. Для тепловых атомов Н эта доля равна всего $\sim 5,7\%$. Этот результат подтверждает высказанное в лит-ре предположение, что присоединение Н к неконцевому положению двойной связи в молекуле олефина происходит с более высокой энергией активации по сравнению с концевым положением этой связи. Кроме того, важную роль могут иметь пространственные факторы, препятствующие присоединению Н к неконцевому положению. Сделан вывод, что реакция присоединения горячих атомов Н к олефинам позволяет получать высоковозбужденные алкильные радикалы, расширяя тем самым энергетич. диапазон метода хим. активации.

В. Е. Скурат

HCl

Commica 9986

1980

институт

академии

наук.

Москва.

М.г.сб.сб

253-68

Mirad S., et al.

Mol. Phys., 1980, 40 (2),

A molecular dynamics simulation
of fluid HCl. ●

6 I rap 5.

HCL

1980

Petković D.M. et al

Trac. Xer. gryn. m.

Ke

Београд, 1980, 45, 111,
549-556

● (cm H_2SO_4) ^I~~II~~

НСС

1980

✓ 19 Б1495 Деп. Исследование диссоциации HCl в: смеси этленгликоля и диоксана методом электропроводности. Шкодин А. М., Ратнанидзе Н. Н., Вьюнник И. Н. «Ж. общ. химии», 1980, 50, № 5, 1183—1186

Из концентрац. зависимости электропроводности определены предельные эквивалентные электропроводности (λ_0) и константы диссоциации HCl в 8 смесях этленгликоля (I) и диоксана (II) при 5, 15, 25, 35 и 45°. Анализ полученных данных по изменению св-в HCl в смесях I и II указывает на существование трех концентрац. областей структур смешанного р-рителя. Обнаруженная в работе инверсия силы HCl в изодиэлектрич. р-рителях с т-рой связывается с различным влиянием т-ры на ассоциативно-диссоциативные процессы, протекающие в трех концентрац. областях структур смешанного растворителя.

Автореферат

(Кс)

X. 1980 N 19

HCL

Omura 9311

1980

Wu L.C., Young T.

(ΔH soln)

J. Res. NBS, 1980;
85 (1), 11-17

Оттиск 109/4

1981

HCl(aq)

NaOH(aq)

NaCl(aq)

Cr(aq)

(+2) ☒

2-1981. N/2

12 Б1482. Теплоемкости водных растворов HCl, NaOH и NaCl при 283,15; 298,15 и 313,15 K. Значение ΔC_p° для ионизации воды. Allred Gregory C., Woolley Earl M. Heat capacities of aqueous HCl, NaOH, and NaCl at 283.15, 298.15 and 313.15 K: ΔC_p° for ionization of water. «J. Chem. Thermodyn.», 1981, 13, № 2, 147—154 (англ.)

При т-рах 283,15; 298,15 и 313,15 K калориметрич. методом определены кажущиеся мол. теплоемкости и

денситометрич. — кажущиеся мол. объемы водн. р-ров HCl, NaOH и NaCl в интервале конц-ий от $\sim 0,03$ до $\sim 0,4$ Мл. Методом экстраполяции найдены парц. мол. теплоемкости и объемы при бесконечном разбавлении. На основе полученных результатов получены значения ΔC_p° и ΔV° для ионизации воды. При указанных выше т-рах величины ΔC_p° и ΔV° соотв. равны —262,0; —216,8 и —192,6 Дж/К·моль и —23,30; —22,18 и —21,95 см³/моль.

А. С. Соловкин

HCl (aq)

OMMUCK 10914

1981

NaOH (aq)

NaCl (aq)

(C_p)

(+2)

~~X~~

C.A. 1981, 94, N24

94: 1985:46q Heat capacities of aqueous hydrochloric acid, sodium hydroxide, and sodium chloride at 283.15, 298.15 and 313.15 K: ΔC_p for ionization of water. Allred, Gregory C.; Woolley, Earl M. (Dep. Chem., Brigham Young Univ., Provo, UT 84602 USA). *J. Chem. Thermodyn.* 1981, 13(2), 147-54 (Eng). Heat capacities (C_p) and apparent mol. vols. (V) of dil. aq. HCl, NaOH, and NaCl were measured at 283.15-313.15 K by using a flow microcalorimeter and a vibrating-tube densimeter. Infinite-diln. partial values were obtained by extrapolation. ΔC_p And ΔV for ionization of H_2O were also obtained. The use of correction factors relating obsd. heat capacities/unit vol. to std. values is discussed.

HCl, aq

1981

10 Б1444. Термодинамика соляной кислоты в смесях 1-пропанола с водой на основе измерений электродвижущей силы. Elsemongy Mahmoud M., Fouda Abdelaziz S. Thermodynamics of hydrochloric acid in (1-propanol+water) from electromotive-force measurements. «J. Chem. Thermodyn.», 1981, 13, № 12, 1123—1132. (англ.)

ΔH_{aq}

В интервале t -р 288,15—328,15 К измерена э. д. с. (E) ячейки Pt/H₂ (газ.)/HCl (m) в смеси 1-пропанол—вода во всем диапазоне составов |AgCl|Ag, где $m = 0,005—0,1$ м и вычислены значения станд. Пт (E_m^0) ячейки. На основе t -рной зависимости E_m^0 рассчитаны станд. термодинамич. функции для происходящей в ячейке р-ции взаимодействия газ. H₂ с тв. AgCl. Оценены перв. эффекты среды и станд. термодинамич. функции переноса HCl из воды в смешанный р-ритель.

И. Е. Кузнец

Х. 1982, Л9, N 10.

HCL

[Dmmleek 12507]

1981

Haymet A.D.F., Morse M.D.,
Rice S.A.,

Кривая.
См. па

Molecular Physics 1981, Vol. 43
No 6, 1451-1457

1981

HCl (20)

✓ 94: 197935d The equation of state and thermodynamic properties of liquid hydrogen chloride. Nunes da Ponte, M.; Staveley, L. A. K. (Inorg. Chem. Lab., Univ. Oxford, Oxford, Engl. OX1 3QR). *J. Chem. Thermodyn.* 1981, 13(2), 179-86 (Eng). Using an expansion method, 32 pressure-vol.-temp. points were measured for liq. HCl between the normal b.p. (188.18 K) and 245 K, at pressures between the vapor pressure and 5 MPa. An equation of the Benedict-Webb-Rubin type was fitted to the results. Vapor pressures reported by several authors were correlated using an equation given by R. D. Goodwin (1969). From these equations, orthobaric liq. vols. isothermal compressibilities, heat of vaporization, and CI energies of the liq. were calcd. at regular intervals of temp.

P-V-T

C-A-1981, 94, N24

ДТМ.СК

108+...

1981

HCl (жидк.)

12 Б696. Уравнение состояния и термодинамические свойства жидкого хлористого водорода. Ponte M. Nunes da, Staveley L. A. K. The equation of state and thermodynamic properties of liquid hydrogen chloride. «J. Chem. Thermodyn.», 1981, 13, № 2, 179—186 (англ.)

уравнение
состояния

Методом расширения измерены $P-U-T$ -свойства жидк. HCl (I) при т-рах между норм. т. кип. (188, 18 K) и 245 K для давл. между давл. насыщ. паров и 5 МПа. Полученные эксперим. данные описываются уравнением состояния типа Бенедикта—Вэбба—Рубина. Результаты $P-T$ -измерений для I, полученные различными авторами в интервале т-р между тройной точкой (159, 05 K) и 245 K, скоррелированы на основе уравнения, предложенного Гудвином. Из полученного уравнения с использованием уравнения Клапейрона рассчитаны значения энтальпии испарения I. Из комбинации уравнения состояния и уравнения для давл. паров рассчитаны и табулированы значения ортобарич. объемов жидкости, изотермич. сжимаемости и конфигурац. внутренней энергии жидк. I. Указано на необходимость исследования $P-U-T$ -свойств I при более высоких давл. и температурах.

В. Ф. Байбуз

2. 1981. N12

HCl

Thourey J., et al

1981

Δ H разбавл.

в HCl + HF + H₂O

J. Fluor. Chem., 1981,
17, N 1, 27-39.

● (с HF) 1

HCl

[Ommuck 12790] 1981

ΔH_0

Vacca A., et al.,

J. Chem. Soc. Dalton Trans.,
1981, 1246-1250.

HCl

1981

' 96: 11859v Theoretical study of the intermolecular hydrogen chloride potential. Votava, Christian; Ahlrichs, Reinhart (Univ. Karlsruhe, D-7500 Karlsruhe, Fed. Rep. Ger.). *Jerusalem Symp. Quantum Chem. Biochem.* 1981, 14, 133-47 (Eng). The HCl pair-potential is investigated by means of extended quantum chem. computations. These involve highly correlated wave functions obtained from large basis sets within the CEPA. The repulsive, electrostatic, and dispersion interactions are all of great importance. The computed interaction potential is fitted to a simple anal. expression. This is then used to compute the second virial coeff. $B(T)$ and structure factors $S_{\alpha\beta}$ by means of mol. dynamics calcns. Comparison with previous potentials and corresponding expts. indicates the accuracy of the present potential.

200
bup.
KOTOP.

C.A. 1982, 96, N2.

Hcl

[Ommuck 12911]

1981

Walvekar A.P., Rama M.A.

Do;

Indian J. Pure and Appl.
Phys., 1981, 19, 278-279.

МСС ас

1982

6 Б1687. Термодинамические свойства соляной кислоты. Осмотические коэффициенты при 25° С. Thermodynamic properties of hydrochloric acid. Osmotic coefficients at 25° С. Leskovšek D. «Vestn. Slov. kem. društ.», 1982, 29, № 3, 237—247 (англ.; рез. словен.)

С учетом принципа Бренстеда специфич. ионных взаимодействий получены модификации уравнения Питцера для расчета осмотич. коэф. (Φ) водн. р-ров соляной к-ты при 25° С. При изменении концентрации к-ты от 0 до 2 М отклонения расчетных значений Φ от эксперим. данных не превышают $\pm 0,002$. По резюме

термод.
св-ва

Х. 1983, 19, № 6

HCl (aq)

[Omnux 16077]

1982

Petkovic D. M.,
Kp; J. Chem. Soc. Dalton
Trans., 1982, N12,
2425-2427.

(ser. H₂SO₄; I)

HCl

Ommuck 13186

1982

Rau H,

расмотрен.
с SiCl₄

J. Chem. Thermodyn.,
1982, 14, N 1, 77-82.

HCl

Otmueck 13780 1982

растворимость
в BeCl_2

Rau H.,
J. Chem. Thermodyn.,
1982, 14, N 4, 345-349.

HCl

1983

99: 128523j Ground states of molecules. 53. MNDO calculations for molecules containing chlorine. Dewar, Michael J. S.; Rzepa, Henry S. (Dep. Chem., Univ. Texas, Austin, TX 78712 USA). *J. Comput. Chem.* 1983, 4(2), 158-69 (Eng). MNDO calcns. of heats of formation, dipole moments, ionization potentials, and structures are reported for a wide range of compds. contg. chlorine in its characteristic valence state (Cl^{I}) and one or more of the elements H, B, Be, C, N, O, and F. The calcd. errors in the heats of formation and the dipole moments are not significantly greater than those previously reported for compds. contg. no chlorine. First vertical ionization potentials were on av. 0.95 eV too high. The ordering of higher cationic states was found to be correct, even for species such as Cl_2O , Cl_2 , and HOCl , were ab initio-Koopmans' theorem calcns. predict the incorrect ordering. The calcd. energies and geometries of compds. such as ClF_3 are qual. incorrect, probably because of the lack of 3d AO's in the orbital basis set.

A+H, meopem
pacem

(+7) 

C.A. 1983, 99, N16

BCl_3 , CCl_4 , NCl_5 ,
 Cl_2O , FCl , ClF_3 , HOCl

НЦ

1983

6 Б3206. Твердый хлористый водород при высоком давлении. Solid hydrogen chloride at high pressure. Hanson R. C., Katz A. «High Pressure Sci. and Technol. Proc. 9th AI RAPT Int. High Pressure Conf., Albany, N. Y., 24—29 July, 1983. Pt 1». New York e. a., 1984, 99—102 (англ.)

В диапазоне t -р 80—210K и давл. до 100 кбар (аппаратура с алмазными наковальнями) методом оптич. микроскопии и спектроскопии КР исследована фазовая диаграмма тв. HCl. Фазовая граница между I (фаза с ГЦК структурой) и упорядоченной сегнетоэлектрич. III (фаза с гранецентр. ромбич. структурой) имеет положит. наклон с небольшой аномалией вблизи 20 кбар. Переход сопровождается термич. гистерезисом, возрастающим до 8K при 80 кбар. В предположении независимости скрытой теплоты перехода от давл. объем

X. 1985, 19, N 6

при переходе уменьшается с 0,28 при низком давл., до 0,10 см³/моль при 20 кбар. Найдены барич. зависимости двух частот в фазе III: $\nu(A_1) = 2704 \pm 4 - (3,00 \pm \pm 0,08)P$ и $\nu(B_1) \text{ (см}^{-1}\text{)} = (2748 \pm 3) - (2,3 \pm 0,05)P$ кбар. Подобные зависимости также найдены для 4 трансляц. и колебат. мод фазы III. В. А. Ступников

ref

CA 99-60795

1983

All (aq)

[~~Qm 22584~~]

99-60795s Standard potential of the cell palladium, hydrogen =
hydrochloric acid|silver chloride, silver at 0.1-1000 MPa.
Pirozhkov, A. V.; Zhurko, F. V. (Inst. Neorg. Khim., Novosibirsk,
USSR). *Izv. Sib. Otd. Akad. Nauk SSSR, Ser. Khim. Nauk* 1983,
(3), 51-3 (Russ). The values of $E^{\circ}_{\text{Pd,H}_2} - E^{\circ}_{\text{Ag,AgCl}}$ were detd. at 25°
and 0.1-1000 MPa by using a potentiometric method in the title cell
with a Pd-H electrode without a liq. junction.

активность

BS

99-60795-001

HCl

1983

 $\Delta H_{\text{soln.}}$

98:205271j Change in enthalpy during proton solvation in water-acetonitrile solvents. Shormanov, V. A.; Pukhov, S. N.; Krestov, G. A. (Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Khim. Khim. Tekhnol.* 1983, 26(2), 182-5 (Russ). The effect was studied of the compn. of aq. acetonitrile solvents (0-0.95 mol fraction of acetonitrile, A) on the changes in the heats of solvation of ions. Heats of soln. at 298.15 K of HCl, NaClO₄, and Ph₄BNa were detd. calorimetrically and the effect of the concn. of A (x) on the heats of transfer ($\Delta\Delta H_s^\circ$ of Cl⁻, PhAs⁺, Ph₄B⁻, ClO₄⁻, Na⁺, H⁺ were deduced. The neg. values of $\Delta\Delta H_s^\circ$ for H⁺ and Na⁺ increase with increasing x, which is related to the better solvating capacity of H₂O, as compared to acetonitrile.

☒ (H) NaClO₄

C.A. 1983, 98, N 24

HCl (p-p)

1983

| 100: 162692n Thermodynamical properties of nonaqueous solutions of hydrogen chloride. Studnicki, M. (Inst. Inorg. Chem., Gliwice, Pol.). *Hung. J. Ind. Chem.* 1983, 11(3), 209-21 (Eng). Equations are given to calc. the activity of HCl in org. solvents as a function of temp. Calcd. values are compared to literature data.

термодин.
сл - ва

с. А. 1984, 100, N 20

$\text{HCl}_{(p-p)}$

1983

Цветков В.Т., Иванов А.В.
и др.

$\Delta \text{H}_{\text{dil}}$;

Термодинам. сольва-
тац. процессов. Ивано-
во, 1983, 75-79.

(см. NaOH_{p-p} ; I)

HCl (p-p)

1984

/ 101:177928p An equation of state for hydrochloric acid solutions. Gibbons, R. M.; Laughton, A. P. (London Res. Stn., Br. Gas Corp., London, UK SW6). *Fluid Phase Equilib.* 1984, 18(1), 4-8 (Eng). A modified Redlich-Kwong-Soave (RKS) equation is presented for HCl solns. The equation with 1 binary parameter predicts the azeotropic behavior of the system and the heats of soln. within 10%.

yp - ue cocmaet.

C. A. 1984, 101, N 20

HCl

1984

Gibbons R. M., Laughton A. P.

up-mix
cocc.,
P, H-H,
 $\Delta v H$;

J. Chem. Soc., Faraday
Trans. 2 1984, 80(9),
1019-38.

● (cur. H₂; III)

МСС

1984

3 E715. Фазовые переходы в твердом хлористом водороде при высоком давлении. Solid hydrogen chloride at high pressure. Hanson R. C., Karz A. «High Pressure Sci. and Technol. Proc. 9 AIRAPT Int. High Pressure Conf., Albany, N. Y., 24—29 July, 1983. Pt 1». New York e. a., 1984, 99—102 (англ.)

В алмазных наковальнях методами визуальных наблюдений и регистрации спектров КРС в диапазоне давлений до 100 кбар и т-р от 90 до 200 К изучен твердый HCl. Построена фазовая диаграмма HCl, включающая ГЦК фазу I и ромбическую гранецентрированную упорядоченную сегнетоэлектрич. фазу III, которые разделяет линия фазовых переходов 1-го рода. Известная по прежним исследованиям промежуточная ромбическая неупорядоченная фаза II не наблюдалась. Т-ра перехода I→III повышается при увеличении давления, скорость ее увеличения снижается при возрастании давления. Методом КРС обнаружено, что при т-ре 80 К частоты симметричных колебаний сжатия $\nu(A_1)$ и $\nu(B_1)$

фазов. переходы
при высоком
давлении

ф. 1985, 18, МЗ

линейно уменьшаются при повышении давления, расщепление мод A_1 и B_1 возрастает. Наблюдались также четыре линии, отвечающие трансляционным и либронным модам фазы III, частоты которых зависят от давления квадратично. Особенности поведения спектра КРС связываются с усилением водородных связей в зигзагообразных цепочках $H-CI$ при повышении давления.

А. Отко



HCl(aq) Saluja P. P. S. 1984

IUPAC Conf. Chem. Thermo-
dyn. and 39th Calorimetry

Cp; Conf. Joint Meet. Hamilton,
Aug. 13-17, 1984. Program and
Abstr. S. I., S. A., '98.

(cu. CsF(aq); I)

1984

HCl(aq)

Simonson J.M., Busey R.M.;
et al.

IUPAC Conf. Chem. Thermodyn.
and 39th Calorimetry Conf.

$\Delta_{\text{aq}}H;$

Joint Meet., Hamilton, Aug.
13-17, 1984. Program and
Abstr. S. 1, s. 2, 74.

(av. $\text{CaCl}_2(\text{aq}); T$)

HCl (недиссоц.
ан)

1985

23 БЗ297. Константа диссоциации и константа закона Генри для HCl в водном растворе. The dissociation constant and Henry's law constant of HCl in aqueous solution. Marsh A. R. W., McElroy W. J. «Atmos. Environ.», 1985, 19, № 7, 1075—1080 (англ.)

На основе анализа лит. данных по давл. паров, активности и плотности водн. р-ров HCl (2—36 вес. %) получены след. зависимости константы диссоциации (K) и константы Генри (K_H) для HCl в водн. р-рах в интервале т-р (T К) 273—323 К: $\lg K = -3,811 + 2995/T$ и $\lg K_H = -1,524 + 878,6/T$. Отмечены существенные расхождения в величинах коэф. активности для недиссоциированной HCl в указанном интервале конц-ий к-ты, рассчитанных из данных по давл. паров и теории высаливания. Свободная энергия Гиббса образования и теплота образования недиссоциированной HCl в водн. р-ре при бесконечном разбавлении найдены равными соотв. $-23,0 \pm 0,2$ и $-26,2 \pm 0,1$ кал/моль при 25°С. А. С. С.

$\Delta_f H$, $\Delta_f G$;

Х. 1985, 19, № 23.

H Claq

1985

103: 110878v The dissociation constant and Henry's law constant of hydrochloric acid in aqueous solution. Marsh, A. R. W.; McElroy, W. J. (Cent. Electr. Res. Lab., CEGB, Leatherhead/Surrey, UK KT22 7SE). *Atmos. Environ.* 1985, 19(7), 1075-80 (Eng). The disson. const., K_1 , and Henry's Law const., K_h , for HCl were calcd. from vapor pressure and activity data: $\log_{10} K_1 = -3.811 + 2995/T(K)$ and $\log_{10} K_h = -1.524 + 878.6/T(K)$. - The ΔG_f^{298} and ΔH_f^{298} of assocd. HCl are estd. to be -23.0 ± 0.2 kcal mole⁻¹ and -26.2 ± 0.1 kcal mole⁻¹, resp. Calcd. molal activity coeffs. for assocd. HCl were compared with theor. ests.

Kguc, $\Delta_f G_{298}$,
 $\Delta_f H_{298}$;

C.A. 1985, 103, N 14.

HCl

1985

Pine A. S., Fried A.,
et al.

checkmp

J. Mol. Spectrosc.,
1985, 109, N1, 30-45.

(cell. HF; III)

HCl

[OM. 21500]

1985

Singh S.,

u.n.

neop.
pacem

J. Mol. Struct., 1985,
127, N3-4, 203-208.

HCl

[Om. 25329]

1986

memogut
cb-ba

Henderson C., Lewis D.C.
et al.,

J. Chem. Thermodyn.,
1986, 18, N11, 1077-
1088.

НСЛ

Волошин Анатолий
Петрович.

1985

Расчетное определение тер-
модинамических свойств,
термод. коэффиц. вязкости и тепло-
проводности галогенов и
ев-ва галогеноводородов в широкой
области параметров состоя-
ния: Авто-резюме диссертации.

. На соответствие упрямой степени
К.Х.М. (01.04.14). Одесса, 1985,
-16с.

В магуз.: Одес. техном. сем-т
писц. пром-сти ии. Л.В. Ломоно-
сова. Библиогр.: с. 16 (9мазв.).

(св. F₂, I) ●

HCl

1986

10 Б3022. Некоторые термодинамические свойства хлоридов водорода и хлорида дейтерия. Some thermodynamic properties of hydrogen chloride and deuterium chloride. Henderson C., Lewis D. G., Prichard P. C., Staveley L. A. K., Fonseca I. M. A., Lobo L. Q. «J. Chem. Thermodyn.», 1986, 18, № 11, 1077—1088 (англ.)

Измерены молярные объемы (V_m^l) жидк. HCl (в интервале т-р 162—236 K) и DCl (160—218 K), давл. паров (p) HCl (159—220 K) и DCl (158—188 K), а также разность давл. паров HCl и DCl в интервале т-р 159—226 K. При т-рах ниже 192 K $V_m^l(\text{HCl}) > V_m^l(\text{DCl})$, а при более высоких т-рах $V_m^l(\text{HCl}) < V_m^l(\text{DCl})$. При т-рах ниже 223,35 K $p(\text{HCl}) > p(\text{DCl})$, а при более высоких т-рах $p(\text{HCl}) < p(\text{DCl})$. Давл. паров HCl и DCl описываются ур-нием Вагнера. С использованием полученных значений давл. паров рассчитаны энтальпии испарения HCl и DCl и оценена энтальпия газообразного DCl. Из резюме

 $p, \Delta H_v$ (4) ☒

X. 1987, 19, N 10.

DCl

HCl

1986

106: 56243f Some thermodynamic properties of hydrogen chloride and deuterium chloride. Henderson, C.; Lewis, D. G.; Prichard, P. C.; Staveley, L. A. K.; Fonseca, I. M. A.; Lobo, L. Q. (Inorg. Chem. Lab., Univ. Oxford, Oxford, UK OX1 3QR). *J. Chem. Thermodyn.* 1986, 18(11), 1077-88 (Eng). The molar vol. V_m of HCl(l) was measured at 162-236 K, and of DCl(l) at 160-218 K. The difference in V_m of the 2 compds. is $\leq 0.1\%$. At lower temps. $V_m(\text{HCl}) > V_m(\text{DCl})$, but at ≥ 192 K $V_m(\text{HCl}) < V_m(\text{DCl})$. Direct measurements of the vapor pressure of HCl were made at 159-220 K, and of DCl at 158-188 K. The difference in the vapor pressure of the 2 isotopic forms was measured at 159-226 K. At lower temps., the vapor pressure of HCl exceeds that of DCl, but at > 223.35 K that position is reversed. The vapor pressure of each substance was fitted to a Wagner equation. These equations were used in conjunction with the Clapeyron equation to calc. the molar enthalpies of vaporization ΔH_m . At 160 K, ΔH_m of DCl exceeds that of HCl by 260 J/mol. This difference decreases with rising temp., being 138 J/mol at 230 K.

(p, $\Delta_v H$)(H) ~~10~~C.A. 1987, 106, N 8

DCl

HCl(aq)

(Om. 23381) 1986

104; 76243t The apparent molar heat capacity of aqueous hydrochloric acid from 10 to 140°C. Tremaine, Peter R.; Sway, Kim; Barbero, Jose A. (Oil Sands Res. Dep., Alberta Res. Council, Edmonton, AB Can. T6G 2C2). *J. Solution Chem.* 1986, 15(1), 1-22 (Eng). The apparent molar heat capacity of aq. HCl, $C_{p,\phi}$, was measured at 25, 76, 103, 125 and 140° and molalities 0.1-1.02 mol/kg by using a Picker flow microcalorimeter. The results were analyzed by using the Pitzer and the Helgeson-Kirkham-Flowers models to derive std. state heat capacities. The fitted parameters were also used to extrapolate the std. emf. of the silver-silver chloride ref. electrode at steam satn. from 0 to 200°. The results confirm that exptl. values of $C_{p,\phi}$ to just over 100° can be used to extrapolate std. state and excess Gibbs energies >250°, when the corresponding enthalpies at 25° are accurately known.

(Gp)

C.A. 1986, 104, N10

ACE

1986

105: 159697r Equation of state for strong electrolytes. Zener, Clarence (Carnegie-Mellon Univ., Pittsburgh, PA 15213 USA). *J. Appl. Phys.* 1986, 60(6), 1857-9 (Eng). An equation of state was developed for strong electrolytes (nonassocd.) by combining the Debye-Hueckel electrostatic interaction with the van der Waals excluded vol. for hard elastic spheres. This equation of state gives essentially perfect agreement with published data up to 5M neg. ion concn. for all the systems studied (HCl, LiCl, MgCl₂, CaCl₂, SrCl₂, AlCl₃). Two adjustable parameters were used; the Debye-Hueckel closest distance of approach a_0 between pos. and neg. ions and the van der Waals' excluded vol. b_0 at infinite diln. These two parameters approx. satisfy an equation stating that all the water of hydration is absorbed by the small pos. ion.

yp - ue concn.

(45) ~~18~~

C. A. 1986, 105, N18

HCl(aq)

[om. 24743]

1986

Saluja P.P.S., Pitzer K.S.
et al.

Can. J. Chem., 1986, 64,
N 7, 1328 - 1335.

Gp i

HCl(aq) [Om. 25345]

1986

Saluja P.P.S., LeBlanc J.
Hume H.B.,

Gp; Can. J. Chem., 1986, 64,
N 5, 926 - 931.

HCl(aq)

1986

14 Б3194. Кажущаяся молярная теплоемкость водных [растворов] соляной кислоты при [температурах] от 10 до 140° C. The apparent molar heat capacity of aqueous hydrochloric acid from 10 to 140° C. Tremaine P. R., Sway K. Barbero José A. «J. Solut. Chem.», 1986, 15, № 1, 1—22 (англ.)

С использованием проточного калориметра при 25, 76, 103, 125 и 140° C определена и табулирована кажущаяся мол. теплоемкость ($C_{p,\phi}$) водн. р-ров соляной к-ты в интервале конц-ии 0,1—1 Мл. С использованием теорий Питцера и Хельгесона—Киркхема вычислены и табулированы значения теплоемкости в станд. состоянии. На основе полученных результатов вычислены и табулированы значения станд. э. д. с. хлорсеребряного электрода и среднеионных коэф. активности HCl при изменении т-ры от 0 до 300° C. Результаты подтверждают, что на основе значений $C_{p,\phi}$ определенных при т-рах ниже 100° C, и точных значений энтальпий при 25° C можно проводить расчет избыточной энергии Гиббса при т-рах более 250° C. По резюме

ам. 23381

Ср

X. 1986, 19, N 14

HCl(aq) [Om. 27660] 27856 1987

Holmes H.F., Bussey R.H.,
et al.,

dil Hm,
mepnag.
cb-ba

J. Chem. Thermodyn.,
1987, 19, N8, 863-890.

HCl(aq)

1987

Э 19 Б3201. Константы устойчивости ионных пар и другие термодинамические свойства HCl при температурах до 350° C. The ion-pair constant and other thermodynamic properties of HCl up to 350° C. Ruaya J. R., Seward T. M. «Geochim. et cosmochim. acta», 1987, 51, № 1, 121—130 (англ.)

В области т-р 100—350° C определена и табулирована р-римость хлорида серебра в р-рах соляной к-ты конц-ии от $6 \cdot 10^{-5}$ до 3,5 Мл. По этим данным вычислены и табулированы значения констант диссоциации к-ты (K_d) при т-рах 25—225° C. Показано, что значения K_d уменьшаются с ростом т-ры. Результаты описаны ур-нием $\lg K_d = 2136,898 + 1,020349 T - 4,5045 \cdot 10^{-4} T^2 - 50396,40/T - 901,770 \lg T$. Отмечена вероятность образования комплексов состава HAgCl_2 при т-рах выше 275° C. Определены параметры ур-ний Питцера, описывающих зависимости коэф. активности и осмотич. коэф. р-ров соляной к-ты, а также термодинамич. функции ее диссоциации.

В. В. Сергиевский

термод. св-ва

сх. 1987, 19, N 19

HCl

1987

(Куошугас.)

106: 126837d The ion-pair constant and other thermodynamic properties of hydrogen chloride up to 350°C. Ruaya, J. R.; Seward, T. M. (Chem. Div., Dep. Sci. Ind. Res., Petone, N. Z.). *Geochim. Cosmochim. Acta* 1987, 51(1), 121-20 (Eng). Solubilities of silver chloride in aq. HCl solns. were detd. from 100 up to 350°. From these measurements, the ionization const. of HCl was evaluated up to 225°. Evidence is presented to show that a protonated silver species, HAgCl_2^0 , exists at 275° and above. Available exptl. data up to 200° were fitted to Pitzer's equation to generate an algorithm to calc. stoichiometric activity and osmotic coeffs. of HCl up to 350° and concns. up to at least 3.0 m. by using the present results and those of Wright et al. (1961), Pearson et al. (1963) and Lukashov et al. (1976), the dissocn. const. (K_a) of HCl was detd. as a function of temp. In the range 25-350°, calcd. enthalpy, entropy and heat capacity change functions for HCl dissocn. were rationalized in terms of changing solute and solvent characteristics as temp. is raised.

⑦ HAgCl_2 (сүзүсүтүрб.)

с. А. 1987, 106, N 16.

HCl

1987

106: 183431r Solubility and heats of solution of sulfur dioxide and hydrogen chloride in disulfur dichloride. Geiko, V. I.; Gladushko, V. I.; Borovikov, A. Ya. (Gos. Nauchno-Issled. Proektn. Inst. Khlor. Prom., Kiev, USSR). *Zh. Prikl. Khim.* (Leningrad) 1987, 60(2), 410-11 (Russ). Soly. data were obtained exptl. and the heats of soln. were calcd. The enthalpy values are -44.576 and -21.568 kJ/mol for HCl and SO₂, resp.

(ΔH)

(4) ~~1~~ SO₂

C.A. 1987, 106, N 22

HCl(aq)

SH dilut.

1987

107: 142446b The enthalpy of dilution of aqueous hydrogen chloride to 648 K and 40 MPa. Thermodynamic properties. Holmes, H. F.; Busey, R. H.; Simonson, J. M.; Mesmer, R. E.; Archer, D. G.; Wood, R. H. (Chem. Div., Oak Ridge Natl. Lab., Oak Ridge, TN 37830 USA). *J. Chem. Thermodyn.* 1987, 19(8), 863-90 (Eng). Enthalpies of diln. of HCl(aq) were measured to 648 K and 40 MPa over the molality range of about 0.01 to 15.6 mol/kg. At temps. above 523 K the exptl. results approach infinite diln. with a slope greater than the limiting-law slope, a clear indication of ion assocn. An anal. of the enthalpies of diln. in combination with existing thermodyn. results has produced a comprehensive model for the thermodyn. properties of HCl(aq). Three versions of the ion-interaction model were used depending on the range of temp. or molality. The unmodified ion-interaction model of Pitzer was adequate through 523 K and 7 mol/kg. Addn. of a fourth coeff. extended the molality range to 16 mol/kg through 523 K, and for temps. >523 K the second coeff. was given addnl. dependence on molality (a non-zero $\beta^{(2)}$ parameter). By using the d. of water as an independent variable each version of the ion-interaction model covers the entire range of pressure through 40 MPa and the no. of adjustable parameters is minimized. A comparison of the thermodyn. properties of HCl(aq) with those of NaCl(aq) demonstrated that HCl(aq) is somewhat more assocd. than NaCl(aq) at high temps. and the enthalpy of ionization makes a significant contribution to the obsd. apparent relative molar enthalpy of HCl(aq).

C.A. 1987, 107,
N16

1988

HCl(aq) Mesmer R. E., Marshall
W. L., et al.

Kuonaz. J. Solution Chem. 1988,
17(8), 699-718.

(con. NH_3 (aq); $\bar{I}$)

HCl aq

1988

109: 217108v Thermodynamic quantities for the interaction of hydrogen ion and sodium ion with acetate and chloride ions in aqueous solution from 275 to 320°C. Oscarson, J. L.; Gillespie, S. E.; Christensen, J. J.; Izatt, R. M.; Brown, P. R. (Dep. Chem., Brigham Young Univ., Provo, UT 84602 USA). *J. Solution Chem.* 1988, 17(9), 865-85 (Eng). The aq. reactions, $H^+ + Cl^- = HCl$, $H^+ + Ac^- = HAc$, and $Na^+ + Ac^- = NaAc$ ($Ac = C_2H_3O_2^-$) were studied as functions of ionic strength at 275, 300, and 320° by using a flow calorimetric technique. Log K , ΔH and ΔS values were detd. from the fits of the calcd. and exptl. heats while ΔC_p values were calcd. from the variation of ΔH values with temp. The log K and ΔH values for the first two reactions agree well with literature values at these temps. No previous results have been reported for the third reaction. The use of equations contg. identical nos. of pos. and identical nos. of neg. charges on both sides of the equal sign (isocoulombic reaction principle) was applied to the log K values detd. in this study. The resulting plots of log K for the isocoulombic reactions vs. $1/T$ were approx. linear, which demonstrates that the ΔC_p values for these reactions are approx. zero.

$K_p, \Delta H, S,$

G_p

C.A. 1988, 109, N24

$HClH_3O_2^-(aq), NaC_2H_3O_2$

HCl

(Dm 30851)

1988

5 Б3230. Кажущиеся молярные объемы и теплоемкость водных [растворов] HCl и HClO_4 при [температурах] $15-55^\circ \text{C}$. Apparent molal volumes and heat capacities of aqueous HCl and HClO_4 at $15-55^\circ \text{C}$ / Pogue Randall, Atkinson Gordon // J. Chem. and Eng. Data.— 1988.— 33, №4.— С. 495—499.— Англ.

При $15, 25, 35, 45$ и 55°C определена и табулирована плотность и молярная теплоемкость $0,01-0,25$ Мл водн. р-ров HCl и HClO_4 . Обсуждена зависимость кажущихся мол. объема и теплоемкости от концентрации к-т. Экстраполяцией определены и табулированы значения парц. мол. объема и теплоемкости. Показано, что значения Φ_v° и Φ_c° близки к лит. данным. Определены значения Φ° для анионов изученных кислот.

В. В. Сергиевский

Сар

(4) X

X. 1989, №5

HCl aq

(Om 30851)

1988

/ 109: 156111p Apparent molal volumes and heat capacities of aqueous hydrogen chloride and perchloric acid at 15-55°C. Pogue, Randall; Atkinson, Gordon (Dep. Chem., Univ. Oklahoma, Norman, OK 73019 USA). *J. Chem. Eng. Data* 1988, 33(4), 495-9 (Eng). The apparent molal vols. and apparent molal heat capacities of dil. (0.01-0.25 m) aq. HCl and HClO₄ solns. were detd. at 15-55°. These quantities were extrapolated to zero concn. to obtain the limiting values at infinite diln., which are the same as the infinite diln. partial molal values. The values were fitted to an equation in terms of values at infinite diln. and theor. Debye-Hueckel limiting slopes. Ionic contribution to the former were obtained for both Cl⁻ and ClO₄⁻ at each temp.

(Gp)

(H) 



HClO₄ (soln.)

C.A. 1988, 109, N 16.

HCl(aq)

1988

711:193357m Calculation of thermodynamic functions of hydrochloric acid by using surface fitting process. Zhao, Kaiyuan; Du, Caiyun (Dep. Chem., Hebei Teach. Coll., Tianjin, Peop. Rep. China). *Jisuanji Yu Yingyong Huaxue* 1988, 5(3), 200-6 (Ch). Emf. measurements were used to det. the thermodyn. properties (activity, enthalpy, free energy, entropy) of HCl solns. in water, at high HCl concns.

(A G, S, H-H)

C.A. 1989, 111, ~12

Нс

1989

11 Б2426. Теплопроводность в молекулярных жидкостях. Thermal conductivity in molecular fluids / Evans D. J., Murad S. // Mol. Phys.— 1989.— 68, № 6.— С. 1219—1223.— Англ.

С использованием классич. выражения для плотности энергии молек. жидкости плотность потока тепла выражена через параметры межмолек. взаимодействия. Полученная ф-ла привлечена для расчета коэф. теплопроводности κ жидк. HCl. В расчетах использованы 4 модели межмолек. взаимодействия. Показано, что все модели дают близкое к эксперименту значение κ . Отмечено, что κ слабо зависит от параметров, определяющих ориентац. часть межчастичного ПТ.

В. И. Ролдугин

теплопроводность

Х. 1991, № 11

Нс

1989

коэффициент
активности

6 Б3320. Коэффициенты активности в системе $\text{HCl}-\text{CoCl}_2-\text{H}_2\text{O}$ при различных температурах. Activity coefficients for the system $\text{HCl}+\text{CoCl}_2+\text{H}_2\text{O}$ at various temperatures / Keith C., Mrad D. R., Breithaupt E., Roy L. N., Roy R. N., Johnson David A. // 197th ACS Nat. Meet., Dallas, Tex., Apr. 9—14, 1989: Abstr. Pap.— [Washington (D. C.)], 1989.— С. 176—177.— Англ.

В интервале т-р 278,15—318,15 К из данных по измерению э. д. с. ячейки Pt, H_2 (газ, 1 атм)/ $\text{HCl} (m_1), \text{CoCl}_2 (m_2)/\text{AgCl}, \text{Ag}$ определены коэф. активности $(\gamma_{\pm})$ HCl в водн. р-рах $\text{HCl}+\text{CoCl}_2$ с ионной силой 0,5, 1,0, 2,0 и 3,0 Мл. Показано, что изученная система подчиняется правилу Харнеда. Определены и табулированы коэф. Харнеда. Сделана попытка описать полученные результаты с помощью формализма Питцера. Найдены значения $\gamma_{\pm}$ следов HCl . По резюме

Х. 1990, № 6

Нс

1989

коэффициент
активности

6 Б3321. Коэффициенты активности HCl в растворах NiCl_2 при температурах от 5 до 55° C. Activity coefficients of HCl in NiCl_2 solutions at temperatures ranging from 5 to 55° C / Lord P. J., Horton C. K., Mrad D. R., Roy L. N., Roy R. N., Johnson David A. // 197th ACS Nat. Meet., Dallas, Tex., Apr. 9—14, 1989: Abstr. Pap.— [Washington (D. C.)], 1989.— С. 177—178.— Англ.

В интервале т-р 5—55° C из данных по измерению э. д. с. ячейки Pt, H_2 (газ, 1 атм)/ HCl (m_1), NiCl_2 (m_2)/ AgCl , Ag определены коэф. активности ($\gamma_{\pm}$) HCl в водн. р-рах HCl — NiCl_2 с ионной силой 0,1—5,0 Мл. Показано, что изученная система подчиняется правилу Харнеда в расширенной форме. Определены α - и β -коэф. Харнеда. Найдены значения $\gamma_{\pm}$ следов HCl . Сделана попытка описать полученные результаты с помощью формализма Питцера.

По резюме

Х. 1990, № 6

ALL

1990

113: 179292y Chiral interaction in aqueous solutions of amino acids. A calorimetric study of the protonated forms in water-hydrochloric acid mixed solvents at 25°C. Castronuovo, G.; Elia, V.; Giancola, C.; Puzziello, S. (Dep. Chem., Univ. Federico II Naples, 80134 Naples, Italy). *J. Solution Chem.* 1990, 19(9), 855-66 (Eng). The heats of diln. in H₂O-HCl mixed solvents contg. the protonated forms of α -aminoacids bearing alkyl chains of increasing length (glycine, alanine, aminobutyric acid, valine, norvaline, leucine, isoleucine, norleucine) were measured at 25°. The diln. enthalpies were the same for solns. contg. only one or both the enantiomeric forms of the same aminoacid. The hypothesis of the main role played in pure water by the zwitterions on the possibility of chiral recognition was confirmed.

(S Haag)

C. A. 1990, 113, N 20

HCl

01 34860

1990

1) 10 Б3113. Давление сублимации хлористого водорода. Sublimation pressures of hydrogen chloride / Ser F., Larher Y. // J. Chem. Thermodyn.— 1990.— 22, № 4.— С. 407—412.— Англ.

В диапазоне т-р 120—150 К (т-ра определялась с помощью измерения давл. в замкнутом объеме, заполненном Хе) с помощью емкостного манометра измерены давл. сублимации HCl. Эксперим. результаты, с точ-

ностью 0,3% описываются двумя регрессиями $\lg p(\text{Па}) = -1029,6(K/T) + 10,627$ ($121 \text{ K} < T < 133 \text{ K}$) и $\lg p(\text{Па}) = -1023,0(K/T) + 10,577$ ($134 \text{ K} < T < 150 \text{ K}$). Расчет, с использованием лит. данных, показал, что мол. уд. теплоспособность при пост. давл. имеет линейную регрессию $C_{p,m} \text{ Дж}/(\text{K} \cdot \text{моль}) = 0,1619(T/\text{K}) + 23,45$. Мол. когезионная энергия при $T = 0 \text{ K}$ составила — 20 222 Дж/моль со среднеквадратичным отклонением 2,1 Дж/моль. Обсуждено возможное влияние примесей на точность проведенных измерений.

В. А. Ступников

(P, ΔH_с)

X. 1991, N 10

МСС

1991

Хезвани Ф., Соловьев С. Н.
Моск. экон.-технол. ин-т.

М., 1991. 8 с.: чл. Бюллетеня:

(Аполн Н) 11 назв. Рус. Деп. в ВУ-
НУТИ 28.05.91, N 2227-
В 91.

1 сел. М ВЗ; I)

М. С. Соловкин

1991

20 БЗ169. Термодинамика. HCl и рекомендованные э. д. с. ячейки водородный электрод — хлорсеребряный электрод в смесях вода — этиленгликоль в интервале т-р от -40 до $+50^\circ\text{C}$. Thermodynamics of HCl and recommendations for the standard emf of the cell hydrogen/silver chloride in ethylene glycol/water mixtures from -40 to $+50^\circ\text{C}$ / Mussini P. R., Mussini T., Rondinini S. // Chim. e ind. (Ital.).— 1991.— 73, № 3.— С. 190—194.— Англ.

На основе анализа лит. данных (библ. 33) рассчитаны и табулированы рекомендованные станд. э. д. с. ячейки Pt/H₂ (101 325 Па)/HCl (m) в р-рителе S/AgCl/Ag/Pt в интервале т-р от -40 до $+50^\circ\text{C}$ в смешанном р-рителе этиленгликоль (I) — вода, содержащем 0—100% I (через каждые 10%). Предложены ур-ния, описывающие зависимости э. д. с. от т-ры и состава смешанного р-рителя, а также ур-ние, связывающее относит. диэлектрич. проницаемость смесей вода — I с конц-ией I 25°C . Табулированы термодинамич. параметры (ΔG° , ΔH° , ΔS°) при 25°C р-ции $1/2\text{H}_2 + \text{AgCl} = \text{HCl} + \text{Ag}$.

А. С. Соловкин

ΔF° , ΔH° , ΔS°

X. 1991, N 20

Нср, ас

1991

8 Б3143. Перерасчет коэффициентов активности и осмотических коэффициентов галоидводородных кислот и некоторых галогенидов щелочных металлов в разбавленных водных растворах при 298,15 К. Recalculation of activity and osmotic coefficients of hydrohalic acids and some alkali metal halides in dilute aqueous solutions at 298.15 K / Partanen Jaakko Ilmari // Acta chem. scand.— 1991.— 45, № 10.— С. 993—997.— Англ.

Табулированы коэф. активности и осмотич. коэф. для разб. (0,001—0,1 М) водн. р-ров HCl, HBr, HI, LiCl, NaCl, KCl и KBr при 298,15 К. Эти результаты получены из ур-ния Хюккеля с использованием заново вычисл. автором значений параметров. Эти параметры тщательно проверены. Установлено, что большинство существующих эксперим. данных по коэф. активности можно предсказать в пределах ошибки эксперимента с помощью ур-ния Хюккеля и новых значений параметров. Сделан вывод, что представленные коэф. активности и осмотич. коэф. являются, по всей видимости, наиболее достоверными из всех имеющихся в лит-ре и их можно рекомендовать в кач-ве образцовых, особенно при дальнейших теор. исследованиях в этой области.

И. Е. Кузинец

Коэффициенты
активности

46

X. 1992, № 8

HCl

DM 36697

1992

DM 36697

(P)

□

④

X. 1993, № 3

DCl

3 Б3022. Изотопные эффекты в давлении пара жидкого хлорида водорода. Vapour pressure isotope effects in liquid hydrogen chloride /Lopes José N. C., Calado Jorge C. G., Jancsó Gábor //J. Phys.: Condens. Matter .—1992 .—4, № 32 .—С. 6691—6702 .—Англ.

С помощью диф. манометрич. метода при t -рах 170—203 К измерена разность между давл. паров жидк. HCl и DCl. В исследованном интервале t -р давл. паров HCl выше, чем давл. паров DCl (на 3,2% при 170 К и на 0,9% при 200 К). Отношение приведенных сумм по состояниям для жидк. и газ. фаз, выведенное из данных по давл. пара, описывается ур-нием $\ln(f_0/f_g) = (3914,57 \pm 10)T^{-2} - (17,730 \pm 0,055)T^{-1}$. Эксперим. данные по изотопному эффекту H/D в давл. пара вместе с лит. значениями изотопного эффекта $^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl}$ интерпретированы на основе статистико-мех. теории изотопного эффекта в конденсир. фазе с использованием спектроскопич. данных для жидк. и газ. фаз. Результаты модельных расчетов показали, что вращение в жидк. хлориде водорода заторможено.

В. Ф. Байбуз

HCl

DM 36697

1992

11 И64. Изотопические эффекты для давления паров в жидком хлористом водороде. Vapour pressure isotope effects in liquid hydrogen chloride / Lopes José N. C., Calado Jorge C. G., Jancsó Gábor // J. Phys.: Condens. Matter.— 1992.— 4, № 32.— С. 6691—6702.— Англ.

Методом диффер. манометрии с использованием высокоточного криостата выполнены измерения различия давления паров для HCl и DCl в интервале 170÷203 К. Найдено, что в исследованном интервале давление паров HCl выше, чем давление паров DCl, причем это различие составляет 3,2% при 170 К и уменьшается до 0,9% при ~200 К. Полученные эксперим. данные об изотопич. Н—D-эффекте для паров хлористого водорода, а также известные данные об изотопич. эффекте ^{37}Cl — ^{37}Cl обсуждаются в рамках статистич. теории для изотопич. эффектов в конденсированных системах. Отмечено, что результаты указывают на заторможен-

(P)

△

⑦

ф. 1992, N 11-12

ность вращений в жидком хлористом водороде. Показано, что для лучшего согласия модельных расчетов с экспериментом необходимо использовать зависящие от T -ры силовые константы для заторможенных поступательного и вращательного движений. Библ. 36.



HCl

1993

Jitscher W.

Cp, meruo- Vak. Prax. 1993,
Ocher. 5(1), 35-6.
cb-ba

● (cer. H₂ i I)

HL aq

1993

Lauers Norbert,
Bopp Philippe

структура Ber. Bunsenges. Phys.
" Chem. — 1993, 97, N8,
русск. c. 982-986.
сб-во

(all. H_3O^+ ; ● I)

НЦ (ж)

1994.

- 1) 3 Б2318. Определение параметров потенциала Леннард-Джонса для жидкого хлористого водорода с помощью метода эталонных взаимодействующих узлов в широком диапазоне плотностей. The determination of Lennard-Jones potential parameters of fluid hydrogen chloride by RISM calculations over a broad range of densities /Gutwerk D., Bausenwein T., Bertagnolli H. //Ber. Bunsenges. phys. Chem. —1994.—98, № 7.—С. 920—926.—Англ.

Исследована применимость различных ПТ леннард-джонсовского типа с включением кулоновского члена для описания жидкого хлористого водорода. В рамках статистич. метода эталонных взаимодействующих узлов рассчитаны индивидуальные атомные парные корреляц. ф-ции и результаты сопоставлены со взвешенной суперпозицией внутримолек. парных корреляц. ф-ций, определенных с помощью нейтронографии. Расчеты проведены для суперкрит. т-ры 100°C и плотностей $0,5\text{—}1,1$, для к-рых имеются эксперим. данные. Определены параметры ПТ и показано, что он лучше описывает св-ва жидкости, чем ПТ, параметры к-рого откалиброваны только по одному термодинамич. состоянию.

В. Л. Лебедев

Х.1995, №3

H³⁵Cl

[Om. 37 699]

1994

cremp Han J., Wang Z., McIntosh
A.L.,
McCormick et al.,
pappe-
Hill,

V5. J. Chem. Phys., 1994, 100,

N10, 7101-7108

Investigation of the ground

vibrational state structure
as $H^{35}Cl$ trimer based on the
resolved K, J substructure
of the ν_5 vibrational band.

Нсе

1994

Д 3 Б3152. Шкала кислотности растворов HCl в диметилформамиде /Кислина И. С., Сысоева С. Г., Темкин О. Н. //Изв. АН. Сер. хим. .—1994 .—№ 6 .—С. 1025—1028 .—Рус.

Индикаторным методом измерена термодинамич. шкала к-тности р-ров HCl в ДМФА при 25 и 39,5°C в интервале конц-ий к-ты от 0 до 15 М. Установлено, что в системе HCl—ДМФ реализуется ион-парный механизм ионизации индикаторов. В исследованном т-рном интервале кислотность от т-ры не зависит. Использованы индикаторы ряда нитроанилина.

Х.1995, №3

HCl

1994

(aq. soln.)

120: 63566f Debye-Hueckel theory for hydrated ions. 6. Thermodynamic properties of aqueous solutions of 1:1 chlorides between 273 and 523 K. Schoenert, Hansjuergen (Inst. Phys. Chem., RWTH Aachen, D-52062 Aachen, Germany). *J. Phys. Chem.* 1994, 98(2), 643-53 (Eng). The thermodyn. properties of aq. solns. of HCl, LiCl, NaCl, KCl, CaCl, NH₄Cl, and NaBr between 273 and 523

de.

memor.
(cb-ba)



(+6)

C.A. 1994, 120, N 6

K and up to $m \approx 1$ mol/kg can be described by an extended Debye Huckel theory which incorporates the hydration of the ions by ligand-binding equil. The purpose of this model is to find out some measure of the thermodyn. of the hydration spheres. The following conclusions can be drawn: (1) while the structure formation in binary solns. with HCl and LiCl decreases monotonically with increasing temp., the other electrolytes change at about 340-380 K from structure breakers to structure formers. This is indicated by the enthalpy/entropy of transfer of water from the bulk to the hydration spheres of the ions. (2) Beyond about 500 K, HCl is incompletely dissociated. This can be inferred from the relation of the distance of closest approach to the sum of the ionic radii. By the same criterion CaCl is a weak electrolyte in the entire temp. range. (3) Activity and osmotic coeffs. of ternary solns. of these electrolytes can be calcd. without addnl. mixing parameters in the same temp. and molality ranges as the binaries with good accuracy, i.e., with deviations $<1\%$ and $<0.5\%$, resp. Exceptions are the solns. with the weak CaCl. (4) Ternary enthalpies can be predicted with deviations of about 35 J/mol. (5) Between 298 and 373 K the results also hold true for the bromides.

HCl(aq)

1996

Sharygin A.V.,
Wood R.H.,

(T , 298-623K) Thermodynamic Properties
of Aqueous Solutions of Hydro-
chloric acid at high Temperatures
and Pressures.

14th

IUPAC



Conference on

Chemical Thermodynamics. Abstracts.
Osaka, 1996, p. 48.

Нср, аз

1997

15Б399. Неэмпирическое изучение водных растворов соляной кислоты. Ab initio study of aqueous hydrochloric acid / Laasonen R. E., Klein M. L. // J. Phys. Chem. A. — 1997. — 101, № 1. — С. 98—102. — Англ. Место хранения ГПНТБ

С использованием метода молек. динамики осуществлено моделирование HCl в воде в обычных условиях и в широком диапазоне конц-ций. При мол. отношениях $\text{HCl}:\text{H}_2\text{O}$ 1:31 и 1:7 молекулы HCl диссоциированы на гидратированные ионы Cl^- и гидрония. В то же время как при отношении 1:3,6 за счет H -связи образуются, кроме того, ассоциаты $\text{Cl}-\text{H}\dots\text{Cl}^-$. Л. В. Арсеенков

X. 1997, N 15

1997

F: HCl

P: 1

2Б3217. Объемы и теплоемкости водных растворов соляной кислоты при температурах от 298,15 до 623 К и давлениях до 28 МПа. Volumes and heat capacities of aqueous solutions of hydrochloric acid at temperatures from 298,15 K to 623 K and pressures to 28 MPa / Sharvgin A. V., Wood R. H. // J. Chem. Thermodyn. - 1997. - 29, 2. - С. 125-148. - Англ.

Плотности 0,1-6,0 Мл водн. р-ров HCl в области т-р 298,15-623 К и давл. 10 и 28 МПа определены с

помощью денсиметра с вибрирующей трубой. Для тех же р-ров при т-рах от 302 до 623 К и давл. 28 МПа в проточном калориметре определены их теплоемкости. На основе модели ионных вз-вий Питцера найдены кажущиеся мол. св-ва в бесконечно разб. р-ре. Особенности величин объемов и теплоемкостей при высоких т-рах определенно указывают на переход от характеристик полностью диссоциированного сильного электролита к слабому электролиту, почти полностью находящемуся в р-ре в виде ионных пар. —

Hilag

1997

/ 126: 298129d Volume and heat capacities of aqueous solutions of hydrochloric acid at temperatures from 298.15 K to 623 K and pressures to 28 MPa. Sharygin, Andrei V.; Wood, Robert H. (Dep. Chem. Biochem., Univ. Delaware, Newark, DE 19716 USA). *J. Chem. Thermodyn.* 1997, 29(2), 125-148 (Eng), Academic. Densities of aq. solns. of HCl at molalities from 0.1 mol·kg⁻¹ to 6.0 mol·kg⁻¹, temps. from 298.15 K to 623 K, and pressures of 10 MPa and 28 MPa were measured with a vibrating-tube flow densimeter. Heat capacities of the above solns. at temps. from 302 K to 623 K and a pressure of 28 MPa were measured by using a flow heat-capacity calorimeter. Std.-state values for the vols. and heat capacities were obtained from the apparent molar

(4)

properties by extrapolation to infinite diln. by using the Pitzer ion-interaction model. The exptl. results were combined with available literature results on vols. and heat capacities to derive appropriate equations for the temp. and pressure dependence of the Pitzer model. The volumetric and heat capacity results for HCl(aq) are in good agreement with published values at low temps. At higher temps., the qual. behavior of vols. and heat capacities for HCl(aq) shows clearly the transition from a fully dissocd. strong electrolyte to an almost completely ion-paired weak electrolyte. Std.-state values calcd. from the authors are consistent with the literature values for the vol. and heat capacity change on the ionization of H₂O.

C. A. 1997, 126, N 22

1997

128: 91258r Experimental study of dissociation of HCl from 350 to 500°C and from 500 to 2500 bars: thermodynamic properties of $\text{HCl}_{(aq)}$. Tagirov, B. R.; Zotov, A. V.; Akinfev, N. N. (Institute of Ore Deposits, Petrography, Mineralogy, and Geochemistry RAS, Moscow, Russia 109017). *Geochim. Cosmochim. Acta* 1997, 61(20), 4267-4280 (Eng), Elsevier Science Inc.. New values of the dissocn. consts. of HCl° referring to low d. supercrit. solns. and near-crit. temps. of water (350-500°C and 500-2500 bars) have been obtained based on comparison of $\text{AgCl}_{(s)}$ soly. in NaCl or KCl solns. with $\text{Ag}_{(s)}$ soly. in HCl + NaCl or KCl solns. at controlled hydrogen fugacities. During the course of this study the thermodyn. properties of $\text{AgCl}_{(s)}$ were refined with the aid of the revised HKF equation of state (Tanger and Helgeson, 1988). The dissocn. consts. of HCl° obtained in the present work are higher than that found from elec. conductance measurements (Frantz and Marshall, 1984) by more than an order of magnitude at pressures of about 500 bars, but the difference becomes smaller as the pressure increases. Both sets of dissocn. consts. agree well at high pressures where the isothermal compressibility of water is less than about $1.42 \times 10^{-4} \text{ bar}^{-1}$. To reliably compare exptl. data obtained by different methods, the Redlich-Kwong equation of state was applied to available literature data as well as to the results of this study. Finally, the std. state thermodyn. properties and HKF parameters for $\text{HCl}_{(aq)}$ were established. These results allow extrapolation of the thermodyn. properties of $\text{HCl}_{(aq)}$ and consequently the HCl dissocn. const. up to 700° and 5000 bars.

Hilary

McMurry
cb - RC. A.
1998,
128, N8

Термодинамика
твёрдого
раствора HCl
в льде

(HCl)

1997

18Б339. Термодинамика и кинетика твёрдо-
го раствора HCl в льде. Thermodynamics and kinetics
of the solid solution of HCl in ice / Thibert Emmanuel,
Dominé Florent // J. Phys. Chem. B [J. Phys. Chem.] .—
1997.— 101, № 18.— С. 3554–3565.— Англ. Место хране-
ния ГПНТБ России

Измерена равновесная р-римость HCl в льде Ih как ф-
ция т-ры и парц. давл. HCl при т-рах между -8 и -35°C .
Найдено, что р-римость HCl в льде очень низка и зна-
чительно меньше, чем это указывается в лит-ре. Также
найдено, что коэф. диффузии HCl в льде очень мал и ра-
вен около 10^{-12} см²/с при -15°C . С помощью экстрапо-
ляции этих данных получена линия солидуса на фазовой
диаграмме т-ра — состав. Определение состава тв. фазы,
находившегося в равновесии с данным составом газ. фазы,
позволило рассчитать парц. энтальпию сублимации HCl
из льда, равную $63,7 \pm 7,6$ кДж/моль, и коэф. активности
HCl в льде. Обсуждены возможные механизмы внедрения
HCl в лед. Рассмотрена возможность применения полу-
ченных результатов в исследованиях обеднения атмосфе-
ры озоном и состава снега. Библ. 72. В. Ф. Байбуз

кр

Х. 1997, N 18

F: HCl

1999

P: 1

131:134948 The equation of state of
supercritical HF, HCl, and reactive
supercritical mixtures containing the elements H,
C, F, and Cl. Fried,

Laurence E.; Michael Howard, W. (Lawrence
Livermore National Laboratory, University of
California, Livermore, CA 94551, USA). J. Chem.
Phys., 110 12023-12032 (English) 1999 We

develop a model of chem. equil. mixts. contg. the
elements H, C, F, a Cl. The model is based on a
recently developed equation of state for the
exponential-6 fluid, combined with a simple
equation of state for condens carbon. We show that
the shock response of a wide variety of mol. and po
fluorocarbons and chlorocarbons can be modeled as a
chem. equil. mixt. of small no. of dissocn. product
mols. In particular, we predict that shock

polyvinylidene fluoride (PVF2) decomp. into a
fluid phase composed mostl HF, and a phase contg.
condensed carbon. HF is known to strongly assoc.
supercrit. fluid phase. We predict that such an
assocn. also occurs unde conditions.

C.A. 19

F: HCl

P: 1

2007

135:24954 **Theoretical Calculation of Bond Dissociation Energies and Enthalpies of Formation for Halogenated Molecules.** Lazarou, Yannis G.; Prosmitis, Alexandros V.; Papadimitriou, Vassileios C.; Papagiannakopoulos, Panos. Institute of Physical Chemistry, National Center for Scientific Research Demokritos, Aghia Paraskevi, Greece. J. Phys. Chem. A (2001), 105(27), 6729-6742. in English.

The bond dissociation energies and the enthalpies of formation of halogenated molecules were theoretically calculated, and the results were compared with the corresponding experimental values in order to examine the reliability of a large number of levels of theory in thermochemical calculations. D. functional theory using a multitude of exchange and correlation functionals, Moller-Plesset perturbation theory, and QCISD(T) and CCSD(T) methods were employed, with all-electron and effective-core potential basis sets of varying complexity. A small set of 19 molecules was selected, consisting of X_2 , HX , and CH_3X ($X = F, Cl, Br, \text{ and } I$), the mixed-halogen molecules ClF , BrF , $BrCl$, IF , and ICl , and H_2 and CH_4 . The calculated

bond dissocn. energies were cor. for basis set superposition errors and the first-order spin-orbit coupling in the 2P state of halogen atoms. In addn., the enthalpies of formation of all mols. in the set as well as those of Me (CH₃) and halomethyl radicals (CH₂X) were also calcd. by using the corresponding atomization reactions, cor. for the spin-orbit coupling in the 3P state of carbon atom and the 2P state of halogen atoms. Levels of theory employing the B3P86 functional with moderately large basis sets, augmented with diffusion and polarization functions, were found to be sufficiently reliable in the calcn. of bond dissocn. energies of closed-shell halogenated mols. In particular, the B3P86/6-311++G(2df,p) level of theory was found to be the most accurate, with an RMS deviation of 6 kJ-mol⁻¹ for 23 bond dissocn. energies, with a negligible dependence of the accuracy on the level of theory chosen for the geometry optimization. In addn., the B3P86 functional in combination with small basis sets was found to be superior to B3LYP and MP2 in the calcn. of mol. structures. Regarding the calcd. enthalpies of formation, G2 theory was the most accurate, with an RMS deviation of 9 kJ-mol⁻¹, followed by several combinations of the B3PW91 and B3LYP functionals with mostly large basis sets. However, the B3P86 functional tends to overbind open-shell species, resulting in an underestimation of the enthalpies of formation for polyat. mols. Extension of the bond dissocn. energy calcns. at levels of theory employing the B3P86 functional to a larger set of 60 bonds in 41 halogen-contg. mols. revealed systematic errors dependent on the mol. size. Therefore, the calcd. bond dissocn. energies at the B3P86/6-311++G(2df,p) level of theory were empirically improved by increasing the abs. energies of the radicals by the quantity $9 \times 10^{-5} \cdot N_e$ Hartrees (N_e = total no. of electrons of the radical), with a subsequent lowering of the RMS deviation in the larger set to 8.0 kJ-mol⁻¹.

2001

F: HCl

P: 1

134:271854 Enthalpies of dilution of aqueous solutions of HCl, MgCl₂, CaCl₂, and BaCl₂ at 300, 325, and 350 °C. Oscarson, John L.; Gillespie, Sue E.; Chen, Xuemin; Schuck, Paul C.; Izatt, Reed M. Department of Chemical Engineering, Brigham Young University, Provo, UT, USA. J. Solution Chem. (2001), 30(1), 31-53. in English.

Diln. enthalpies, measured using isothermal flow calorimetry, are reported for aq. solns. of BaCl₂ at 300 °C and 11.0 MPa, MgCl₂, CaCl₂, and BaCl₂ at 325 °C and 14.8 MPa, and at 350 °C and 17.6 MPa. Previously collected diln. enthalpies for aq. solns. of MgCl₂ and CaCl₂ at 300 °C and 10.3 MPa and for aq. solns. of

HCl at 250, 275, and 300 °C at 10.3 MPa and 320 °C at 12.8 MPa were included with the new data at 300 °C and 11.0 MPa and at 350 °C and 17.6 MPa when fitting the Pitzer parameters. The concn. range of the chloride solns. was 0.5 to 0.02 m. Parameters for the Pitzer excess Gibbs ion-interaction equation were detd. from the fits of the exptl. heat data. Equil. consts., enthalpy changes, entropy changes, and heat-capacity changes for the assocn. of alk. earth metal ions and H⁺ with chloride ion were estd. from the heat data. For all systems, the enthalpy and entropy changes are pos. and show accelerating increases with temp. The resulting equil. consts. show significant, but smaller, increases with temp.
