

$\text{CCl}_2\text{H}_2$

P 7317 1881

Berthelot and Ogier  
4. Ann. chim. phys. 23, 225 (1881)

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ;  $\sigma\kappa$ ,  $\Delta H_f^\circ$

Circ. 500

fr



✓ op 0

CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>

BQ - 8384-IV

1926

J.H. Matheus

$\Delta$ He

pp 562-576

7334-IV

1932

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ,  $\text{CHCl}_3$ ,  $\text{CH}_2\text{Br}_2$ ,  $\text{CHBr}_3$ ,  $\text{CI}$ ,  $\text{CH}_3\text{I}$   
 $\text{GeCl}_4$ ,  $\text{SnCl}_4$ ,  $\text{SiBr}_4$ ,  $\text{SiJ}_4$  (Tb, Hb,  
Tm, Hmb)

Biltz, Sapper and Wunnenberg  
1.Z.anorg.chem. 203, 277 (1932)

Be

$\text{CCl}_2\text{H}_2$

IV-1253

1934

CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> (P, Tb, T<sub>kp</sub>, P<sub>kp</sub>)

Sugewara S.

J. Soc. Mech. Engrs., Tokyo 1934, 32,  
491-6

"Thermodynamic properties of ..."

GeAe, 1935, 16<sup>8</sup>

CCl<sub>2</sub>H<sub>2</sub>

B<sub>1</sub>M<sub>2</sub>

1517 IV

1934

Tm, Hm ( $\text{CS}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5\text{Br}$ ,  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ,  $\text{CH}_2\text{Br}_2$ ,  
 $(\text{CH}_2\text{Cl})_2$ )

Timmermans J.

$\text{CS}_2$

Bull. Soc. Chim. Belg., 1934, 43, 626-38

Theory of ...

Be



$\text{CCl}_2\text{H}_2$

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$  (C<sub>p</sub>; S; H) 1252-IV 1936

Sugawara S., Nozawa R.

Trans. Soc. Mech. Engrs. (Japan) 1936, 2,  
359-66

"Studies on the thermodynamic  
properties of dichloromethane".

W "0" ✓ φ C.A. 1936, 70224

8604-IV

1937

Perlick A.

2. Bull. Intern. Inst. Refrig. 18, No. 4,  
A I (1937)

$C_2F_4Cl_2$ ;  $T_b$ ;  $\Delta H_f$ ;  
(1,1,2,2-tetrafluoro-  
1,2-dichloroethane)

oil  $CH_2-Cl_2$  ( $C_F$ )

Circ. 500

Be

$C_2H_3F_2Cl$ ;  $T_m$ ;  $\Delta H_m$ ;  $\Delta C_p$   <sup>$\Delta H_f$</sup>   
(1,1-difluoro-1-chloroethane)

$CCl_2H_2$

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$

BQ-5383-III

1937

Perlick et.

(Cp)

"Z. gesamte Kälte-Industrie  
1937, N 11, 201-206.

1938

8982 - P

$\text{CCl}_4$ ,  $\text{CH}_3\text{Cl}$ ,  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ,  $\text{CHCl}_3$ ,  $\text{CBr}_4$ ,  
 $\text{CH}_3\text{Br}$ ,  $\text{CH}_2\text{Br}_2$ ,  $\text{CHBr}_3$ ,  $\text{CH}_2\text{O}_2$ ,  $\text{COCl}_2$   
( g, S°, Cp )

Stevenson D.P. and Beach J.P.  
J. Chem. Phys. 6, 25 ( 1938 )

Circ. 500 Be, J

1242-D

1939

Cp ( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ) vapor;  $\text{CHCl}_3$  vapor;

$\text{CCl}_4$  vapor;  $(\text{CH}_2\text{Cl})_2$  vapor )

Jatkar S.K.K.

J. Indian Inst. Sci. 1939, 22A, Pt.4,  
59-78

"Supersonic velocity in gases and  
..."

C.A., 1939, 5248<sup>8</sup>

10

$\text{CClH}_2$

CH2Cl2

Bφ. - 9207 - IV

1939

Van de Vloed A.

T<sub>m</sub>; ΔH<sub>m</sub> "Bull. Soc. chim. Belg"

1939, 48, 229-68

CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>

B9P-8080-IV 1940

Justi E., Langer F.

(C<sub>P</sub>, C<sub>V</sub>)

"Z. techn. Phys".

1940, N9, 189-194.

N-8745

1940

Riedel

9.Z.ges.Kälte-Ind.47,87 (1940)

CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>; m.p., C<sub>p</sub><sup>o</sup>

C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>Cl m.p., C<sub>p</sub><sup>o</sup>

CCl<sub>2</sub>H<sub>2</sub>

circ.500

5



1941

4605 - IV

Cp (C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>Cl; CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>)

Riedel L.

Bull. Intern. Inst. Refrig.

20, N3, Annex No.C4, 1-3 (1941)

Determination of the...

Be



CCl<sub>2</sub>H<sub>2</sub>

7818-IV

1942

Glockler G. and Edgell W.F.

J. Ind. Eng. Chem. 34, 532 (1942)

$\text{CH}_2\text{F}_2$ ,  $\underline{\text{CH}_2\text{Cl}_2}$ ,  $\text{CH}_2\text{FCl}$ ,  $\text{CHFBr}_2$ ,

$\text{CCl}_2\text{Br}_2$ ,  $\text{CCl}_3\text{Br}$ ,  $\text{CClBr}_3$ ,  $\text{CHCl}_2\text{Br}$ ,

$\text{CHClBr}_2$ ,  $\text{CH}_2\text{I}_2$  (g, Cp°)

Circ. 500 Be

$\text{CCE}_2\text{H}_2$

1942

~~CH<sub>4</sub>~~

~~CH<sub>3</sub>F; CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>; CHF<sub>3</sub>; CF<sub>4</sub>; IV-8894~~

~~CH<sub>3</sub>Cl; CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>; CHCl<sub>3</sub>; CCl<sub>4</sub>;~~

~~CHClF<sub>2</sub>; CHCl<sub>2</sub>F; CH<sub>2</sub>ClF; CClF<sub>3</sub>~~

~~CCl<sub>2</sub>F<sub>2</sub>; CCl<sub>3</sub>F; (P<sub>G</sub>, T<sub>Kp</sub>) V<sub>Kp</sub> N<sub>B</sub>~~

~~(dissociation " equilibrium  
chloric acid)~~

Seger 9

No. 5

Φ 14

c.a., 1943, 3399'

Die Chemie 1942, 55, 58-9

"The thermal properties  
of all fluorine and chlorine  
derivatives of methane".

J. Kornblum. Anwendung  
der

$\text{CH}_2\text{C}_2$

BOP-1241-IV

1946

T<sub>KP</sub>, T<sub>M</sub>

Ozong L.R.

T<sub>E</sub>, P, H, S

C<sub>P</sub>

Revue Brown Boveri 1946, 33

158-63

II-1247

CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>I<sub>2</sub> (nos. unnumbered) 1946

Morino J., Kimura M.

J. Chem. Soc. Japan, 1946, 67, 116-117  
Studies on the structure of gas  
molecules by the cathode ...

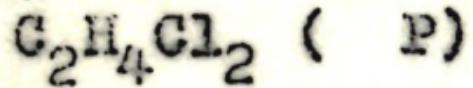


CA., 1950, 44, 10413  
g

10

1240-IV

1949



Davies W., Jagger J.B., Whalley H.K.  
J.Soc.Chem.Ind.(London), 1949, 68,  
26-31

Methylene dichloride and 1,2-dichloroethane. I. Solubility ...

C.A., 1949, 3691f

5



CH2Cl2·15H2O

Bp - 8962 - IV

1949

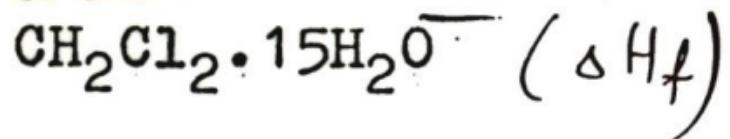
Stackelberg H.

(4Hf)

Naturwissenschaften,  
1949, 39, 359- 362.  
Feste Gashydrate.

8962-IV

1949



v.Stackelberg M.

Naturwissenschaften, 1949, 36,  
359-362

Feste Gashydrate



C.A., 1950, 44, 7107h

At



test op. n. "φ"

IV-4063

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$  ( $\delta S_v$ )

1952

Gyani B.P., Das S.N.

J. Indian Chem. Soc., 1952, 29,  
858-64

Free volumes and internal  
pressures of liquids and their

...



C.A., 1953, 7275g

Chall



K-1236  
( $C_p$ ;  $C_p/C_v$ )

1957 F

Andreae J.H.

Proc. Phys. Soc., 1957, B70, N1, H-46  
(laur.)

Ultrasonic relaxation in methylene chloride.

Proc. K. 1957, 68316

W + 2t

CH2Cl2 Bφ - 1103 - IV 1957

Barrett R.M.; Stuart W.J.

(Arag) "Proc. Roy. Soc"

1957, A-243, N1233,  
172-189.

CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>

BdS-1245-IV

1960

Maass G., Schneider G.,  
Wilhelm G.

TG

Naturwissenschaften,  
1960, 47, 228

B90-M46-IV

1963

CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>

T<sub>m</sub>

Phase equilibrium and volume relations in the system methylene chloride-ethylene. E. S. Lebedeva and S. M. Khodeeva. *Poluprod. dlya Sinteza Poliamidov, Khim. i Tekhnol. Produktov Organ. Sinteza* 1963, 79-90. The vapor-pressure and orthobaric d. of CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> was detd. at 20-236.8°. Data of phase equil. and of vol. ratios for the system investigated are given at 0-175° at pressures up to 100 atm.

V. Zitko

C.I. 1964 Cf NY 346c

1963

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$

$\text{CD}_2\text{Cl}_2$

Vi

ceepykwypa

n.-q.

Raman spectral data, assignments, potential energy constants, and calculated thermodynamic properties for  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ,  $\text{CHDCl}_2$ , and  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ . Brother F. E. Palma and K. Sathianandan (Illinois Inst. of Technol., Chicago. *Develop. Appl. Spectry.* 2, 58-64(1962)(Pub. 1963). The Raman spectra were obtained photographically with a 2-prism spectrograph with glass optics. Vibrational assignments for the D-substituted mols. were accomplished by using the known assignments for  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  and applying the isotopic substitution rules of Brodersen and Langseth (*CA* 53, 21127e), and were confirmed by a normal coordinate treatment, carried out with a general quadratic valence force potential energy function. The heat content, free energy, entropy, and heat capacity were calcd. to a rigid-rotor, harmonic-oscillator, ideal-gas approxn., for 12 temps. from 100 to 1000°K.

S. S. Mitra

C.P. 1963-59-12  
13501 cd

*CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>*

1963

16 Б349. Термопроводность и теплоемкость газов, измеренные новым методом. Senftleben Негманн. Wärmeleitvermögen und spezifische Wärme von Gasen, gemessen nach einer neuen Methode. «Z. angew. Phys.», 1963, 16, № 2, 111—115 (нем.)

Усовершенствован ранее предложенный метод измерения термопроводности и теплоемкости газов (РЖФиз, 1954, № 5, 4828) и распространен на высокие т-ры (до 400°). Для температурной области 0—400° измерены термопроводность воздуха и метиленхлорида. Полученные значения хорошо совпадают с табличными. Для т-р 0; 25; 50; 100; 200; 300; 400° получены значения коэф. теплопроводности для метана, этана, пропана, н-бутана, изобутана и изопентана. Почти полностью совпадают с табличными значения теплоемкости при постоянном давлении для метана и метиленхлорида. Получены значения этой теплоемкости для этана, пропана, н-бутана, изобутана и пентана. Теплоемкость определялась при 25, 50, 100, 150, 200°.

С. Шушурин

Термопроводность  
газов

г. 1964. 16

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$

Davis D. S.

- 1964

Chem. and Process Engng.,

P(α) 1964, 45, n<sup>o</sup> 10, 587.

Давление пара хлорированных углеводородов.

(см.  $\text{CH}_3\text{Cl}$ )

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$   
 $\text{CHDCl}_2$   
 $\text{CD}_2\text{Cl}_2$   
спектр)

✓ 1 Д155. Замещенные метана. Ч. XXXIV. Данные по спектрам комбинационного рассеяния и ИК-спектрам и расчет термодинамических свойств в  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ,  $\text{CHDCl}_2$  и  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ . ~~Palma Francis E., Pioltowski Edward A., Sundaram S., Cleveland Forrest F.~~ Substituted methanes. Part XXXIV. Raman and infrared spectral data and calculated thermodynamic properties for  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ,  $\text{CHDCl}_2$ , and  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ . «J. Molec. Spectrosc.», 1964, 13, № 1, 119—131 (англ.)

Измерены частоты линий комб. рас., их полуколичеств. относит. интенсивности и приближенные факторы деполяризации жидкого  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ,  $\text{CHDCl}_2$  и  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ . Измерены также относит. интенсивности ИК-полос этих соединений в области  $400—4000 \text{ см}^{-1}$  для жидкой и газовой фаз. Отождествление полос дейтерированных соединений произведено путем сравнения с результатами для  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  с применением правил изотопич. сдвига Бродерсена и



Лангсета. Результаты подтвердили выводы Симаноучи и Сузуки (РЖФиз, 1962, 12B235) по спектрам этих соединений, за исключением фундаментальной полосы  $\sigma_2$   $CD_2Cl_2$ , которая отождествлена с частотой  $1052\text{ см}^{-1}$  в спектре комб. рас. Вычислены термодинамич. ф-ции (теплосодержание, свободная энергия, энтропия, теплопроводность) для 12 т-р в диапазоне  $100-1000^{\circ}\text{К}$  в приближении жесткого ротора и гармонич. осциллятора. Библ. 25 назв.

1966

 $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 

II E247. Изучение методом ЯКР особенностей фазовых переходов в дигалоидзамещенных метанах. Бабушкина Т. А., Семин Г. К. «Ж. структурной химии», 1966, 7, № 1, 114—116

 $\text{CH}_2\text{Br}_2$  $\text{CH}_2\text{BrCl}$  $\text{CH}_2\text{JCl}$ T<sub>tr</sub>

Проведено исследование зависимости частот ЯКР  $\text{Cl}^{35}$ ,  $\text{Br}^{79}$  и  $\text{J}^{127}$  в  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ,  $\text{CH}_2\text{Br}_2$ ,  $\text{CH}_2\text{J}_2$ ,  $\text{CH}_2\text{BrCl}$  и  $\text{CH}_2\text{JCl}$  в диапазоне т-р 77—270° К. Анализ полученных данных показал, что в  $\text{CH}_2\text{J}_2$  и  $\text{CH}_2\text{Br}_2$  существуют два фазовых перехода, причем один из них, являющийся переходом второго рода, ранее не был известен. При нагревании  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  от 77° К происходят три фазовых перехода: фазе I отвечает одна линия ЯКР (т-ра фазового перехода ~95° К), фазе II — две линии ЯКР (т-ра ~120° К) и фазе III — тоже две линии. При охлаждении  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  от комнатной т-ры наблюдается более сложная картина, позволяющая предположить существование двух фаз одновременно. В  $\text{CH}_2\text{BrCl}$  и  $\text{CH}_2\text{JCl}$  фазовых переходов не обнаружено.

+2



Ф · 1966 · 118

Физ. 1

530.1

Lévy-Leblond J.-M.

Remarks on the quantum kinematics of the angular momentum  
of a particle.

Nuovo cimento, 1965, 40, N 3A, 748—755.

Замечания к статье Moses H. E., Wang S. C.: «К квантовой  
кинематике углового момента частицы».

1273

ВГБИЛ

1966

 $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  $\text{CH}_2\text{Br}_2$  $\text{CH}_2\text{J}_2$  $T_{c_2}$ +2

x · 1966 ·

15 Б285. Изучение методом ЯКР особенностей фазовых переходов в дигалоидзамещенных метанах. Бабушкина Т. А., Семин Г. К. «Ж. структурн. химия», 1966, 7, № 1, 114—116

Обнаружены и изучены особенности фазовых переходов в  $\text{CH}_2\text{Br}_2$ ,  $\text{CH}_2\text{J}_2$ ,  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ; исследованы температурные зависимости частот ЯКР в  $\text{CH}_2\text{JCl}$  и  $\text{CH}_2\text{BrCl}$  при температурах 77—200° К.

Реферат авторов

15

☒

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$

Gallant R. W.

1966

Hydrocarbon Process, and  
Petrol. Refiner", 45, N 3, 161.

дисперсии чистого гало-  
генида. У. С. Хлорированные  
вещества.  
(ак.  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ )

1967

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$   
(крист.  
структур.)

I

x. 1968

17

17 Б246. Инфракрасные спектры  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ,  $\text{CH}_2\text{Br}_2$  и  $\text{CH}_2\text{J}_2$  в твердом состоянии. Kartá V. B. Infrared spectra of  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ,  $\text{CH}_2\text{Br}_2$ , and  $\text{CH}_2\text{J}_2$ : in the solid state. «J. Molec. Spectrosc.», 1967, 24, № 3, 368—377 (англ.)

Измерены ИК-спектры  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ,  $\text{CH}_2\text{Br}_2$  и  $\text{CH}_2\text{J}_2$  в тв. состоянии при т-ре жидк. азота. Полученные данные указывают на то, что кристаллы  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  характеризуются ромбич. структурой с четырьмя молекулами в элементарной ячейке;  $\text{CH}_2\text{Br}_2$  кристаллизуется в триклинной или моноклинной сингонии. Данные для  $\text{CH}_2\text{J}_2$  показывают, что молекула в тв. состоянии характеризуется симметрией  $C_2$ , причем на элементарную ячейку приходится более одной молекулы. ИК-спектры тв.  $\text{CH}_2\text{J}_2$  свидетельствуют о существовании третьей формы в дополнение к ранее известным двум формам.

Резюме



ВФ-8345-XIV

1967

CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>

SHF

12 Б550. Термодинамические характеристики органических соединений. Часть 5. Термодинамические характеристики гидрогенизации дихлорметана, 1,1- и 1,2-дихлорэтана и 1,2-дихлорпропана. Lacher J. R., Adams A., Park J. D. Reaction heats of organic compounds. Part 5. Heats of hydrogenation of dichloromethane, 1,1- and 1,2-dichloroethane and 1,2-dichloropropane. «Trans. Faraday Soc.», 1967, 63, № 7, 1608—1611 (англ.)

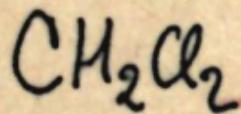
В калориметре измерены теплоты гидрогенизации дихлорметана (**I**), 1,1-дихлорэтана (**II**), 1,2-дихлорэтана (**III**) и 1,2-дихлорпропана (**IV**) при 250°. С использованием литературных данных по теплоемкостям и теплотам образования H<sub>2</sub>, HCl, I—IV дихлоралканов и соответствующих насыщенных углеводородов, вычислены стандартные

X · 1968 · 12

8

теплоты образования ( $\pm 1-2\%$ ) исследованных дихлоралканов (ккал/моль):  $\Delta H^\circ$  (обр. I, газ) = -22,95;  $\Delta H^\circ$  (обр. II, газ) = -30,70;  $\Delta H^\circ$  (обр.) III, газ) = -30,18;  $\Delta H^\circ$  (обр. IV, газ) = -38,70. Сравнение полученных данных по  $\Delta H$  (обр.) дихлоралканов с литературными показывает расхождение в  $\sim 1$  ккал. Используя схему энергий связи Скиннера (см. часть 4) получено ур-ние для расчета теплот образованийmono- и дихлоралканов с некоторыми вновь рассчитанными эмпирич. константами. Часть 4 см. РЖХим, 1966, 16Б530.

Л. Иванов



> 16 Б793. Термодинамические свойства метиленхлорида. Seshadri D. N., Viswanath D. S., Киттоог N. R. Thermodynamic properties of methylene chloride. «J. Indian Inst. Sci.», 1967, 49, № 3, 117—130 (англ.)

1967

Краткий обзор работ по определению термодинамич. св-в метиленхлорида. Приведены критич. постоянные, ур-ние давления паров, ур-ние состояния Мартина—Хоу и ур-ние для расчета теплоемкости метиленхлорида. На основании литературных данных с помощью ур-ния состояния Мартина—Хоу вычислены термодинамич. св-ва метиленхлорида в жидком и парообразном состоянии. В интервале т-р 260—750° К для давл. от 0,1 до 200 атм табулированы уд. объем, энтропия, энтальпия, а также давление паров и теплота парообразования метиленхлорида. Приведена также Т—S-диаграмма. Библ. 10.

В. Ф. Байбуз

P,  
ΔHv  
ядр.  
(обзор)

Б90 - 8340 - XIV

Х. 1968. 16

BOP-114-XIV

1969

CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>

Hu Andreia T.  
Sinke Gerard C.

dH°<sub>crop</sub>:

Y. Chem. Thermodyn

dH°<sub>298</sub>  
(parcent)

1969, 1, n6, 50%

(Cu. C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub>)!

1969

Chl Cl  
2 2S°  
~~ΔH°~~

74945z Thermodynamic properties of Freon 30 ( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ). Verkhivker, G. P.; Tetel'baum, S. D.; Konyaeva, G. P.; Cholakova, G. N. (Odess. Tekhnol. Inst. im. Lomonosova, Odessa, USSR). *Izv. Vyssh. Ucheb. Zaved., Energ.* 1969, 12(5), 72-7 (Russ). The properties of Freon-30 can be approximated by  $\sigma_1 = \sigma_0 + (K_1 - K_0)(\sigma_1 - \sigma_0)/(K_2 - K_0)$  where  $\sigma_0$  and  $\sigma_1$  are the properties of the Freons 13 and 41, resp., and  $\sigma = PV/(RT)$ . The values of the K's are  $K = P_c V_c / (R T_c)$  where  $P$ ,  $V$ ,  $R$ ,  $T$ , and the index  $c$  are pressure, vol., gas const., temp., and crit., resp. An expression is given for the value of  $\sigma$  related to the d. and crit. temps. The enthalpy and entropy for Freon 30 were calcd. and are tabulated for the range 0.3-200 bars and 280-680°K.

D. Meranda

C.A. 1969. 4. 16

CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>

крист  
стр-ра;  
ратов.  
исп.

8 Д 569. ИК-спектр кристаллического CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> и CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>.  
Фазовый переход и дублетная структура в смешанных  
криSTALLах. Manzelli P., Marzocchi M. P., Califano S. Infrared spectrum of crystalline CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> and  
CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>. Phase transition and doublet structure of mixed  
crystals. «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 3, 1409—1410  
(англ.)

При т-ре 85° К по ИК-спектрам поглощения обнаружена новая фаза (II) кристаллич. CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> и CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, образующаяся при сублимации на поверхность CsJ. В отличие от фазы I в фазе II частоты всех фундаментальных колебаний расщеплены. Наличие дублетной структуры также и в изотопноразбавленном кристалле свидетельствует о нерезонансной природе расщепления. Обсуждены две модели, объясняющие наблюденный эффект: снятие вырождения вследствие низкой симметрии фазы II и туннельный переход между двумя эквив. ориентациями молекулы в кристалле.

Б. М. В.

80-1971

8D



+1



$\text{CD}_2\text{Cl}_2$

Marzelli P., et al.

1971

крист  
стп-ра;  
разобр.  
неп.

J. Chem. Phys., 1971,  
54, № 3, 1409.

●  $(\text{cu. } \text{CH}_2\text{Cl}_2)^{\text{III}}$

CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> (kp)

1971

61347w Infrared spectrum of crystalline dichloromethane and dichloromethane-d<sub>2</sub>. Phase transition and doublet structure of mixed crystals. Manzelli, P.; Marzocchi, Mario P.; Califano, Salvatore (Ist. Chim. Fis., Univ. Firenze, Florence, Italy). *J. Chem. Phys.* 1971, 54(3), 1409-10 (Eng). A 2nd metastable cryst. form of CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> and CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> (M. and M., 1970), vapor-deposited on CsI at temps. 105-120°K, probably has a unit cell with 2 equiv. sets of sites: unit cell symmetries possible are C<sub>2</sub>, C<sub>i</sub> (site C<sub>1</sub>) and C<sub>s</sub><sup>3</sup>, C<sub>2h</sub><sup>2</sup> (site C<sub>s</sub>). All fundamentals in the ir spectrum, except ν<sub>3</sub>, were split into doublets. None of the crystal splittings disappeared in solid solns. of 2% CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> in CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> or CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> in CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>. At temps. >120°K, the metastable form transformed irreversibly to the room temp. form. The solid soln. spectra clearly show the Cl isotope effect. FBJN

T<sub>t<sub>2</sub></sub>

C.A. 1971

74.16



(+)

☒

1971

CD<sub>2</sub> Cl<sub>2</sub>(<sub>kp</sub>)

Manzelli P., et al.

J. Chem. Phys., 1971,

T<sub>tr</sub>

54, 3, 1409.

(Cor. CH<sub>2</sub> Cl<sub>2</sub>)  $\overline{r}$

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$

1972

Bhattacharyya, Subirnath,  
et al.

(4Hf) I. J. Quant. Chem. I972, 6(5), 935-48.

(cav.  $\text{CH}_3\text{F}$ ; I)

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$

1972

Besublik T., Aim K.

(P)

Collect. Czech. Chem. Com-  
muni., 1972, 37, N 11,  
3513-3521.

•  $\text{CuCS}_2$ ; I

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$	A.S. Rodgers, R.C. Wilhoit, B.J. Zwolinski	1972
$\text{CD}_2\text{Cl}_2$		—
(T.g. q)	" Nat. Bureau of Standards — office of Standards reference data.	100
(ΔH <sub>v</sub> )		—

1972; 18-25

(over)

CHCl<sub>3</sub>  
CDCl<sub>3</sub>

A.S. Rodgers, R.C. Wilhoit,  
B.J. Zwolinski

1972

100

(T.99) "Nat. Bureau of Standards -  
(4490) - office of Standards reference  
data

1972, 25-31

(current)

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$

Bsp - 4550 - XIV

1973

13 Б480. Кристаллическая структура дихлорметана,  
 $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ . Kawaguchi Takemi, Tanaka Kazuo,  
Takeuchi Togi, Watanabe Tokunosuke. The  
crystal structure of methylene dichloride,  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ . «Bull.  
Chem. Soc. Jap.», 1973, 46, № 11, 62—66 (англ.).

( $T_m$ ) Кристалл  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  (т. пл.  $-96,8^\circ$ ; I) был выращен  
путем медленного охлаждения до т-ры несколько ниже  
т. пл., структура I изучена при  $-120^\circ$  (метод Вейсен-  
берга  $\lambda \text{ Cu}$ , 226 отражений). Кристаллы ромбич.,  $a$  4,249,  
 $b$  8,138,  $c$  9,492А,  $Z=4$ , ф. гр.  $Pbcn$ , молекула на оси 2.  
Координаты атомов С и Cl определены с помощью  
трехмерного паттерсоновского синтеза и уточнены МНК  
в изотропном приближении до  $R=0,109$ . По результа-  
там разностного Фурье — синтеза определены координа-

X. 1973 N 13

ты атомов Н. Межатомные расстояния в I: С—Н  
0,99  $\pm$  0,13, С—Cl 1,768, Cl—Cl 2,932 Å. Угол ClCCl 112,  
HСН 112  $\pm$  7°. Эти данные находятся в согласии с ре-  
зультатами микроволновых исследований в газовой фа-  
зе. Межмолек. расстояния близки к суммам соотв-щих  
ван-дер-ваальсовых радиусов. Найденная в работе  
структура хорошо согласуется с результатами расчетов  
энергии решетки I. Отмечено различие структуры I, с  
одной стороны, и структур CH<sub>2</sub>Br<sub>2</sub> и CH<sub>2</sub>J<sub>2</sub> — с другой.

С. III. Шильштейн

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$

Philippe R.  
et al.

1973

"J. Chem. Thermodyn"<sup>4</sup>

(p)

1973, 5, N3, 431-444.

• (au  $\text{CHBr}_3$ ; I)

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$

Dougherty Ralph C. 1974

"Org. Mass Spectrum"

1974, 8, Jan, 77-79 (cont.)

(see  $\text{CH}_3\text{Cl}$ ; I)

CH<sub>2</sub>Cl + Cl

1974

24 Б995. Реакции  $S_N2$  в газовой фазе. Эффекты нуклеофильности. Dougherty Ralph C., Roberts J., David.  $S_N2$  reactions in the gas phase. Nucleophilicity effects. «Org. Mass Spectrom.», 1974, 8, Jan., 81—83 (англ.)

Для 5 р-ций ассоциации в газовой фазе:  $\text{CH}_3\text{Cl} + \text{Cl}^-$ ,  $\text{CH}_3\text{Br} + \text{Br}^-$ ,  $\text{CH}_3\text{J} + \text{J}^-$ ,  $\text{CH}_3\text{Br} + \text{Cl}^-$  и  $\text{CH}_3\text{J} + \text{Cl}^-$  найдены теплоты образования ассоциатов  $\text{CH}_3\text{XY}^- - \Delta H = 8,6; 9,2; 9,0; 10,9$  и  $9,8$  ккал/моль и  $-\Delta S^0 = 15,3; 14,0; 16,4; 12,8$  и  $7,3$  гиббс/моль. Аналогичные р-ции ( $S_N2$  — обмен  $\text{RX} + \text{Y}^- \rightarrow \text{RY} + \text{X}^-$ ) в ац. имеют энергии активации  $E$  соотв.  $20,2; 15,8; 15,7; 15,7$  и  $16,0$  ккал/моль. Из сравнения  $-\Delta H$  и  $E$  следует, что для р-ции в р-ре р-ционная способность реагента (в данном случае его нуклеофильность) полностью определяется растворителем.

Г. М. Назин

X. 1976 N. 24

(74)

↗

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$

1974

$\Delta H_S, \Delta H_f$

Rodgers A.S et al.,  
J. Phys. and Chem. Ref. Data.,  
1974, 3, N1, 117-140



(see  $\text{CH}_3\text{Cl}$ ; I)

H-CHCl<sub>2</sub>

art. 4824

1975

CHCl<sub>2</sub> (a4f) Kerr J. A., et al.

(Dc) Handbook chem. Phys.,  
55 th Ed., 1974-75.

CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>

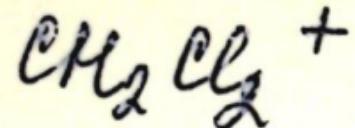
1976

Yoshikawa Y, et al.

Bunseki Kagaku, 1976,  
25, N5, 341-3.

( $\Delta H_v$ )

Tell (CH<sub>3</sub>OH) I



1974

Rosenstock H. M. et al

J. Phys. Chem. Ref. Data,  
1974, 6. Suppl. N<sup>o</sup>, p 1468

T.g.  
EBBa

$\text{C}_{17}\text{H}_2\text{Cl}_2$

ammirec 5890 1977

Madeccega

M. Guir.

cb-f

watson R.T.

J. Phys. and Chem. Ref. Data,  
1977, 6, 916-17.

CH2Cl2

сммннса 7418

1978

Конесов Б.Н.

(диф)  
Черезу зорицел,  
1978, 44(4) 1845-98

*CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>*

(C<sub>p</sub>)

15 Б718. Термодинамические свойства метиленхлорида. Мосеева Е. М., Рабинович И. Б., Бусыгина Г. И., Сафонов В. А., Овчинников Е. Ю.

«Термодинам. орган. соедин.» (Горький), 1978, № 7, 8—11

В интервале т-р 15—300 К в адиабатич. калориметре измерена теплоемкость  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  (I) (чистота 99,97 масс. %). Истинная т-ра и энталпия плавления I составили  $178,23 \pm 0,01$  К и  $6160 \pm 30$  дж/моль. На т-рной зависимости  $C_p$  жидк. I отмечен слабо выраженный минимум около 225 К. Рассчитаны и табулированы в изученном интервале т-р термодинамич. функции I. При 298,15 К значения  $C_p$ ,  $H^\circ - H_0^\circ$ ,  $S^\circ$  и  $-(G^\circ - H_0^\circ)$  составили 102,3; 25 650; 174,5 и 26 400 (ед. измерения дж, моль, град).

А. Б. Кисилевский

2: 1979, N 15

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$

1979

Kyselka P. et al.

Collect. Czech. Chem. Communs.,  
1979, 44, n 2, 307-312.

$\Delta H_{\text{v}}$

rec.  $\text{CS}_2$ ; I )

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$

omega 7667 1979

Singh R. P. et al.

(P-V-T.) J. Chem. Thermodyn.  
1979, 11, 205-213.

Сентябрь 10206

1980

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$

$\text{CHCl}_3$

$\text{CCl}_4$

$\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$

$\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}_3$

$\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_4$

(440°) +5

Х. 1981 № 2

У 2 Б768. Энталпии испарения и когезионные энергии для группы хлорсодержащих углеводородов. Majer V., Sváb L., Svoboda V. Enthalpies of vaporization and cohesive energies for a group of chlorinated hydrocarbons. «J. Chem. Thermodyn.», 1980, 12, № 9, 843—847 (англ.)

В интервале т-р 298—360 К с шагом 15 К калориметрич. методом определены энталпии испарения 9 хлорсодержащих углеводородов — дихлор-, трихлор-, тетрахлорметана (I—III соотв.), 1,2-дихлор-, 1,1,1-трихлор-, 1,1,2-трихлор-, 1,1,2,2-тетрахлорэтана (IV—VII), трихлор- и тетрахлорэтилена (VIII, IX). Эксперим. данные табулированы. Для получения аналитич. зависимости эксперим. и наиболее надежные лит. данные обрабатывались в соответствии с ур-нием  $\Delta H(\text{исп.}) = K(1 - T_{\text{пр}})^{\alpha}$ , где  $K$  и  $\alpha$  — корреляц. постоянные,  $T_{\text{пр}}$  — приведенная т-ра. Значения  $K$  и  $\alpha$ , принятой для расчетов крит. т-ры, т-рного интервала и  $\Delta H(\text{исп.}, 298,15)$  соотв. равны: I 39,75 кДж/моль, 0,3652, 510,0 К, 298—328 К и 28,84 кДж/моль, II 49,28, 0,3829, 536,4, 298—353 и

31,14, III 43,30, 0,3764, 556,4, 298—358 и 32,43, IV  
 46,83, 0,3785, 561,2, 298—358 и 35,16, V 44,26, 0,3947,  
 548,4, 298—358 и 32,47, VI 53,89, 0,4277, 602,0, 298—358  
 и 40,23, VII 61,12, 0,4685, 644,6, 298—358 и 45,69, VIII  
 45,29, 0,3680, 571,0, 298—358 и 34,51, IX 50,89, 0,3808,  
 620,0, 298—394 и 39,64. По лит. и оценочным величинам  
 термодинамич. св-в и полученным  $\Delta H$ (исп.) рассчитана  
 когезионная энергия  $\Delta U$ , определяемая как разность  
 энергий идеального газа и жидкости. Т-рная зависи-  
 мость  $\Delta U$  аппроксимирована ур-нием вида  $\Delta U =$   
 $= K[(1 - T_{\text{пр}}) \exp(-T_{\text{пр}})]^{\beta}$ . Величины констант  $K'$  и  $\beta$   
 и  $\Delta U$  (298,15) соотв. составили: I 40,86 кДж/моль,  
 0,2950 и 26,54 кДж/моль, II 44,04, 0,3113 и 28,77, III  
 44,48, 0,3021 и 30,00, IV 48,69, 0,3079 и 32,74, V 45,85,  
 0,3159 и 30,14, VI 55,50, 0,2981 и 37,76, VII 63,25,  
 0,3542 и 43,09, VIII 46,90, 0,3009 и 32,09, IX 53,55,  
 0,3196 и 37,24.

ллав  
в

Р. Г. Сагитов

*CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>*

*1982*

20 Б192. МД-моделирование хлористого метиlena (ЕМЛГ — публикация). Evans M. W. Molecular dynamics simulation of liquid methylene dichloride (EMLG publication). Invited Papers from the 15 European Congress on Molecular Spectroscopy, Norwich, Sept., 1981. «J. Mol. Struct.», 1982, 80, 389—392 (англ.)

Проведены расчеты методами молекулярной динамики (МД) системы из 108 молекул CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> с помощью 3×3 и 5×5 атом-атомного потенциала. Найденные траектории движения позволяют определить авто- и кросс-корреляционные функции динамич. переменных, а также любые термодинамич. средние. Эксперим. спектры в длинноволновой ИК-области лучше описываются расчетами, выполненными с помощью 5×5 потенциала. Полученная информация включена в банк данных ЕМЛГ — проекта Салфордского университета.

С. Гёмкин

*X. 1982, 19, N 20*

CH2Cl2

1982

97: 79311m Pressure-volume-temperature relationships of liquid dichloromethane and trichloromethane. Kumagai, Akibumi; Takahashi, Shinji (Chem. Res. Int. Non-Aqueous Solutions, Tohoku Univ., Sendai, Japan 980), *Chem. Lett.* 1982, (7), 971-2 (Eng). The sp. vols. of liq. CH2Cl2 and CHCl3 were measured at const. temp. by the variable vol. method using a glass piezometer at 273 to 348 K and in the pressure  $\leq 100$  MPa. The sp. vol. vs. pressure isotherms are expressed by the Tait equation within an accuracy of 0.07%.

P-V-T gas-  
ktc

⑦ ~~A~~ CHCl3

c.a. 1982, 97, n10

*CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>*

1982

24 Б920. Соотношения давление — объем — температура для жидких дихлорметана и трихлорметана. Kumagai Akibumi, Takahashi Shinji. Pressure-volume-temperature relationships of liquid dichloromethane and trichloromethane. «Chem. Lett.», 1982, № 7, 971—972 (англ.)

*PVT;*

Методом переменного объема с использованием стеклянного пьезометра измерены при нескольких т-рах и давл. до 100 МПа уд. объемы жидк. дихлорметана и трихлорметана. Эксперим. данные с погрешностью 0,07 и 0,04% соотв. выражаются ур-нием Тайта  $V_p = V_0[1 - C \ln((P+B)/(P_0+B))]$ , где  $V_p$  — уд. объем при давл.  $P$ ,  $V_0$  — уд. объем при давл. насыщ. пара  $P_0$ ,  $C$  и  $B$  — параметры Тайта. Для  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  величины  $P_0 \cdot 10^{-5}$ ,  $V_0 \cdot 10^3$  и  $B \cdot 10^{-5}$  составили: 298,15 К 0,6 Па, 0,7593 м<sup>3</sup>/кг и 1001 Па, 323,15 К 1,4, 0,7874 и 793, 348,15 К 2,9, 0,8190 и 616, при всех трех т-рах  $C = 0,1010$ ;  $\text{CHCl}_3$ : 273,15 К 0,1, 0,6574 и 1108, 298,15 К 0,3, 0,6782 и 899,

X. 1982, 19, N 24

323,15 К 0,7, 0,7013 и 733, 348,15 К 1,6, 0,7266 и 583,  
при всех четырех т-рах  $C=0,0952$ . Р. Г. Сагитов

афи  
Y,

CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> (on. 28950) 26028 1987

Tschuikow-Roux E.,

Pddison S.,

$\Delta H_f$ ; Int. J. Chem. Kinet.,  
1987, 19, N1, 15-24.

*CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>*

1988

23 Б3163. Клатратообразование в системе вода — хлористый метилен при давлениях до 0,5 кбар. Дядин Ю. А., Журко Ф. В., Микина Т. В. «Изв. СО АН СССР. Сер. хим. н.», 1988, № 12/4, 65—69

Методом ДТА изучены фазовые соотношения в системе CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> (**I**) при давл. 1—5,0 кбар. I очищали промывкой и перегонкой. Плотность образцов I 1,335 г/см<sup>3</sup> при 20° С. Эмульсии готовили УЗ-перемешиванием с применением ПАВ. Приведена Р—Т-фазовая диаграмма системы, в к-рой образуются два гидраты (типа клатрата) (КЛ) с кубич. структурой: КЛ—I и КЛ—II. КЛ—I устойчив в обл. давл. до 0,6 кбар. Т. пл. I при 0,6 кбар 1,5° С. КЛ—II устойчив при давл. 0,6 кбар и более, т. пл. КЛ—II 23,0° С при 5,0 кбар.

Л. Г. Титов

X. 1988, N 23

*CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>*

1989

8 Б3142. Давление паров, критическая температура и критическое давление дихлорметана. Vapour pressure, critical temperature, and critical pressure of dichloromethane / García-Sánchez F., Romero-Martinez A., Trejo A. // J. Chem. Thermodyn.— 1989.— 21, № 8.— С. 823—826.— Англ.

В диапазоне т-р 292,5—506,6 К определено давл. паров ( $p$ ) дихлорметана, и для смеси газ—жидк. фаза визуальным методом (по исчезновению мениска) найдены критич. т-ра ( $T_c$ ) и критич. давл. ( $p_c$ ). Получено ур-ние  $\ln(p/p_c) = (T_c/T)(n_1\tau + n_2\tau^{1.5} + n_3\tau^{2.5} + n_4\tau^5)$ , где  $\tau = 1 - T/T_c$ ,  $n_1 = -7,41335$ ,  $n_2 = 2,66214$ ,  $n_3 = -3,04772$ ,  $n_4 = 6,05132$ ,  $T_c = 508,0\text{К}$  и  $p_c = 6355 \text{ кПа}$ , а также ур-ние  $\ln p = A + B/T + CT + DT^2$ , где  $A = 12,175$ ,  $B = -2156,03$ ,  $C = -1,389 \cdot 10^{-2}$  и  $D = 1,1343 \cdot 10^{-5}$ . Сделано сравнение с аналогичными лит. данными для 1,1-дихлорэтана и 1,2-дихлорэтана. В. А. Ступников

$(P, T_{kp}, P_{kp})$

X. 1990, N 8

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$

1989

111: 202273n Vapor pressure, critical temperature, and critical pressure of dichloromethane. Garcia-Sanchez, Fernando; Romeo-Martinez, Ascencion; Trejo, Arturo (Inst. Mex. Pet., Mexico City, Mex. 07730). *J. Chem. Thermodyn.* 1989, 21(8), 823-6 (Eng). Exptl. vapor pressure data of dichloromethane are reported. The crit. temp. and crit. pressure were detd. by direct observation of the disappearance of the gas-to-liq. meniscus. Coeffs. are given of Cragoe and of Wagner equations which fit the complete set of measured vapor pressures up to the crit. point.

$P$ ,  $T_{cp}$ ,  $P_{cp}$

C.A. 1989, 111, N22

CH<sub>2</sub> Cl<sub>2</sub>

1990

З Б3037. Термодинамический расчет образования токсических продуктов при термообезвреживании хлорорганических отходов химических производств / Евланов С. Ф. // Ж. прикл. химии.— 1990.— 63, № 9.— С. 2088—2090.— Рус.

На основе расчета состава продуктов горения в воздухе в-в, соотв-щих брутто-ф-ле  $CH_{2-x}Cl_{2+x}$  ( $-1 \leq x \leq +1$ ) изучены условия образования наиболее токсичных в-в, фосгена и свободного хлора, в интервале т-р 1200—2400 К при коэф. избытка воздуха 1,5. Показано, что в этих условиях фосген практически не образуется. Содержание свободного хлора как в молек., так и в атомарном состоянии находится в сильной зависимости от  $x$ , т. е. от соотношения атомов водорода и хлора в сжигаемом веществе.

А. Л. М.

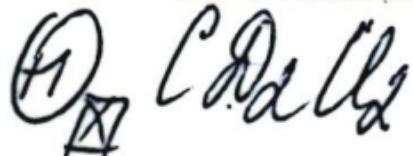
X·1991, №3

*CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>*

*1990*

112: 240850b Effect of deuterium substitution on the vapor pressure of dichloromethane. Jancso, G.; Marko, L.; Rebelo, L. P. N.; Toth, K.; Jakli, Gy (Cent. Res. Inst. Phys., 1525 Budapest, Hung.). *Fluid Phase Equilib.* 1990, 55(1-2), 147-58 (Eng). The vapor pressure difference between CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> and CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> was measured by differential capacitance manometry between -40 and +40°C. The results can be expressed by the equation  $\ln(p_H/Pa) = -(5.5133 \pm 0.0047)/T$  (K). The vapor pressure of CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> between -65 and +40°C has also been detd. and the expt. data can be described by the Antoine equation  $\log(p_H/Pa) = 9.1660 - 1122.5/(229.93 + t(^{\circ}C))$ . The exptl. obsd. H/D vapor pressure isotope effect was interpreted within the framework of the statistical mech. theory of condensed phase isotope effects. The results indicate that the rotation of the mols. about the axis parallel to the line joining the two chlorine atoms can be considered quasi free.

*P, SHW*



*c.A. 1990, 112, N 26*

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$

1993

Rychlicki B., Terzyk A.P.

изотермич  
агсорбции  
импр.  
менем,  
энтропии  
агсорбции

Zesz. nauk. AGH im.

Stanisława Staszica.

Chem. 1993, N 25. C.

119 - 128.

(ccl.  $\text{CH}_2\text{OH}$ ; I)

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$

1996

Berry R.J., Burgess D.R.F. (Jr.)  
et al.

$\Delta H_f^\circ$ ,  
pacrem

J. Phys. Chem. 1996, 100,  
N 18.C. 4405-4410.

(c.u.  $\text{CH}_3\text{Cl}$ ; I)

1996

F: CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>

P:1

11Б1116. Теоретические энталпии образования CH[m]Cl[n]. нейтральные молекулы и катионы. Theoretical enthalpies of formation of CH[m]Cl[n]: Neutral molecules and cations / Rodriguez Christopher F., Bohme Diethard K., Hopkinson Alan C. // J. Phys. Chem. - 1996. - 100, N 8. С. 2942-2949. - Англ. Место хранения ГПТБ

Неэмпирическими методами ХФ, МП2 и квадратичным методом конфигурационного вз-вия с учетом одно- и двухкратных возбуждений (ККВОД) оптимизированы равновесные структуры всех возможных нейтральных молекул и катионов CH[m]Cl[n], m+n=1-3. Термодинамические свойства (энталпии образования, адиабатические энергии ионизации и сродство к протону) рассчитаны на уровне ККВОД с частичным учетом трехкратных возбуждений и МПЧ с учетом одно- четырехкратных возбужденных конфигураций и использованием базисов высокого качества (6-311++ГФ(3df, 3pd), 6-311ГФ(2df, p)). Приведено сопоставление с эксперим. данными. Библ. 91.

X. 1996, N 11

$\text{CH}_2\text{Cl}_2$

[Om. 38553]

1997

Brenda Thies Colegrave,  
Tyler B. Thompson,

$\Delta \mu_f^{238}$  J. Chem. Phys., 1997,  
ab initio 106 (4), 1480.  
parom