

C_6H_5Cl

1968

Захаров А.А.

Уч. зан. Моск. обл.

Труды. Муз., 1968, 165,
№ 7, 227.

Determination of the
heat capacity of the internal
degrees of freedom of a
liquid on basis of
calorimetric data
(Chem. Cell 4) I

C_v

C-H-Cl

Бер А.

1969

ΔH_f°

ΔG_f°

Многор. соед. Гес. н. - и.
проектн. ин-та атомн.
проект. прог. орг. синтеза
N1 (с 1), 57.

(Сол. СС₄)₁

1969

Bittreich H. Y.,
Kindl R.

ΔH_v

Wiss. Z. Tech. Hochschule
Chem. Leuna-Merseburg,
1969, 11, n3, 222

 (C₆H₅CCl₄) I

$C_2H_2Cl_4$ C_2HCl_3 Bp - 1124 - XIV 1969
 $C_2H_4Cl_2$ Bhat N.A.

(odor)

Chem. Age India,

m.g. g.

1969, 20, ~10, 839.

Kp.

(Chem. C_2Cl_4) I

1969

C_2H_4Cl

Franklin J. A.,
Huybrechts G. H.

Int. J. Chem. Kinet,
1969, 1, 21, 3.

мерная
связь

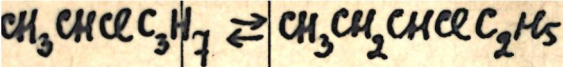
(C-Cl; C-C),

оценка ΔH_f

~~оценка~~



(Сил. C_2H_5Cl) I



1969

9 Б1076. Равновесие изомеризации вторичных монохлорпентанов и дегидрохлорирования 2-хлорпентана. Карасева С. Я., Андреевский Д. Н. «Ж. физ. химии», 1969, 43, № 9, 2203—2207

Распад 2-хлорпентана (I) при использовании в кач-ве Кт NiCl_2 в т-рном интервале $120-174^\circ$ включает равновесную изомеризацию в 3-хлорпентан (II) и равновесное дегидрохлорирование в пентены нормального строения. При всех т-рах равновесный состав смеси I : II равен 64 : 36. II поддается распаду и изомеризации значительно труднее, чем I. Равновесие $\text{I} \rightleftharpoons \text{II}$ дополнительно изучено при $174-243^\circ$ (Кт — NiCl_2 и Al_2O_3). Во всем интервале т-р $\lg K_p = -0,253$. Для ср. т-ры $460,5^\circ \text{K}$ $\Delta H_T^0 = 0 \pm 100$ кал/моль и $\Delta S_T^0 = -1,16 \pm 0,34$ э. е.

Kp
и т.-г.

X. 1970 9

Arkun. xapugor

1969

C-Cl-H

91037b Vapor pressure of primary n-alkyl chlorides and alcohols. Kemme, Herbert R.; Kreps, Saul I. (Newark Coll. of Eng., Newark, N.J.). *J. Chem. Eng. Data* 1969, 14(1), 98-102 (Eng). The vapor pressures of 1-alkyl chlorides and of 1-n-alkanols were detd. by D.T.A. between 5 and 760 torr. The exptl. data were correlated by the Antoine vapor pressure equation, and the Antoine consts. for the compds. are presented.

RCJP

p

+1

C.A. 1969

70.20



$\text{CHCl}_2\text{-CHCl}_2$, $\text{CHF}_2\text{-CHCl}_2$ (Cp, S, H₁-H₂, F-H₂) 1969

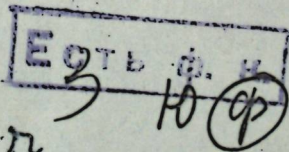
Kennedy R. G., Lielmezs J. 14 XIV 1675
J. Chem. and Eng. Data, 1969, 14, N2,
217-219 (англ.)

Thermodynamic functions for 1,1,2,2-
tetrachloroethane and 1,1-difluoro-2,2-
dichloroethane.

РЖХим., 1970

15690

6. 08. 70



1969

$C_2Cl_4H_2$

$CHCl_2 \cdot CHCl_2$

Layne & J., Wadso J.

БТТ, 1969, №12, 28 стр.

$\Delta H_{25} 25^\circ C$

1969

C-H-02

54347c Correlation of thermodynamic properties of chloromethanes. Seshadri, D. N.; Viswanath, Dabir S.; Kuloor, Narasing R. (Indian Inst. Sci., Bangalore, India). *J. Chem. Eng. Data* 1969, 14(3), 322-8 (Eng). A correlation for entropy and enthalpy based on the 2-parameter law of corresponding states and the reference substance concept has been obtained. For 199 points tested, the overall av. abs. deviation and the max. deviations in the calcd. values of entropy with the available data are 0.74 and 7.20%. The corresponding deviations of enthalpy are 1.86 and 15.0%, resp. A compressibility chart for chloromethanes has been made and shown to be superior to existing charts. For 102 points tested, the av. abs. and max. deviations in the compressibilities were 1.80 and 19.5%, resp. RCJP

mepuag
cb-ha

C.A. 1969. 71. 12

Cancel

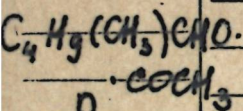
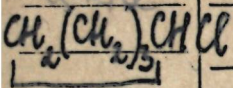
1969

Preuss H. et al

ΔH_f

J. Mol. Struct., 1969, 3(4-5),
423-8

C-H-Cl



(P)

X. 1971. 11

11 Б718. Давление насыщенного пара хлорциклопентана и 4-метилпентанола-2. Андреевский Д. Н., Бражников М. М. «Вестн. Белорус. ун-та», 1970, сер. 2, № 3, 14—18

Давления насыщ. пара хлорциклопентана (I) и 4-метилпентанола-2 (II) измерены в эбулиометрах Свенто-славского в интервале т-р 49,5—113,2 и 80,2—130,5° для I и II соотв. Для обоих в-в получены ур-ния Антуана $\lg P \text{ (мм)} = A - B/(C + t)$ и Кокса $\lg P \text{ (атм)} = A_K(1 - T_{\text{кип}}/T)$, где $A = 7,01254$ (I) и $7,94859$ (II); $B = 1370,14$ (I) и $1751,56$ (II); $C = 218,50$ (I) и $215,22$ (II). Для ур-ний Кокса найдено: $\lg A_K = \alpha + \beta t + \gamma t^2$, где $\alpha = 0,69982$ (I) и $0,84298$ (II); $\beta = +0,0000237$ (I) и $-0,0010484$ (II); $\gamma = -0,00000188$ (I) и $+0,00000397$ (II). Рассчитаны значения т-р кипения обоих препара-тов для общепринятых давл. 0,1; 1,0; 10,0; 30,0; 100,0; 400,0 и 760,0 мм, а также скрытые теплоты испарения: $\Delta H^\circ_{298,15}$ 9,18 (I) и 14,03 ккал/моль (II); $\Delta H^\circ_{\text{т. н. кип.}}$ 8,13 (I) и 10,57 ккал/моль (II).

Резюме

1870

(+1)

(X)

$[C(CH_3)_4 - CCl_4]$

1940

39420 Heat capacities and thermodynamic properties of globular molecules. XV. The binary system tetramethylmethane-tetrachloromethane. Chang, Elfreda T.; Westrum, Edgar F., Jr. (Dep. of Chem., Univ. of Michigan, Ann Arbor, Mich.). *J. Phys. Chem.* 1970, 74(12), 2528-38 (Eng). Heat capacities and derived thermal properties on 5 compns. of the system tetramethylmethane-tetrachloromethane (mole fraction $CCl_4 = 0.200, 0.334, 0.501, 0.666, \text{ and } 0.826$) were detd. by adiabatic calorimetry from 5 to 300°K. The temp., enthalpy, and entropy increments of each of the transitions, including fusion, in each compn. were detd. The results indicated the effects on the reorientational-rotation transitions of the pure components due to the change of mol. environment and provided a tentative partial phase diagram for this system below room temp.

RCKG

Cp

C. H. 1940.

12.8

G₂ ClH

1940

Kloster - Jensen Else
at all

Do

Helv. chim. Acta,

1940, 53, 48, 8109-8118

I

(Ces. G₂H₂) III

$C_6H_4Cl_2$

1970

12 Б880 Деп. Измерение теплоемкости и скачка плотности при фазовом переходе в парадихлорбензоле. Кожин В. М., Годовский Ю. К., Ценева М. А. (Редакция «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1970. 7 с., ил., библиогр. 7 назв. (№ 2504-71 Деп.

Волюмометрическим методом измерены коэф. объемного расширения низкот-рной (α) и высокот-рной фазы (β) *n*-дихлорбензола, они соотв. равны $652 \cdot 10^{-6}$ и $692 \cdot 10^{-6}$. Получена т-рная зависимость плотности α - и β -фаз

(т-ра фазового равновесия равна $30,8^\circ$). Найдено, что при превращении α в β происходит уменьшение плотности в-ва на величину $\Delta\rho = 0,002 \text{ гсм}^{-3}$. Микрокалориметрич. методом определен тепловой эффект фазового перехода, равный $0,188 \text{ кал/г}$ или $27,6 \text{ кал/моль}$. Полученные малые значения теплового эффекта хорошо согласуются с очень малым изменением плотности при $\alpha \rightarrow \beta$ -переходе. Автореферат

АН

X. 1971. 12

1970

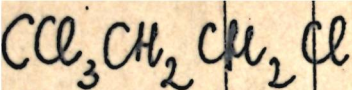
C₃H₄Cl₂ $\Delta H_{\text{сгор}}$ ΔH_f

-X-

1970. 23

23 Б667. Стандартная энтальпия образования 1,1-дихлорциклопропана. Колесов В. П., Томарева Э. М., Шостаковский В. М., Нефедов О. М., Скуратов С. М. «Ж. физ. химии», 1970, 44, № 6, 1548—1550

В описанном ранее (РЖХим, 1967, 23Д27) калориметре с вращающейся бомбой определена энтальпия сгорания жидк. 1,1-дихлорциклопропана при 25°: $\Delta H^\circ = -423,57 \pm 0,28$ ккал/моль. Вычислена стандартная энтальпия образования этого в-ва: $\Delta H^\circ(\text{обр.}) = -6,51 \pm 0,28$ ккал/моль. На основе последней величины и полученной ранее энтальпии образования транс-1,2-диметил-3,3-дихлорциклопропана предложены ф-лы для приближенного расчета $\Delta H^\circ(\text{обр.})$ алкильных производных 1,1-дихлорциклопропана. Автореферат



1970

 CCl_3CH_2 ΔH_f°

X. 1971-6

6 Б956. Стандартная энтальпия образования 1,1,1,3-тетрахлорпропана. Колесов В. П., Томарева Э. М., Скуратов С. М. «Ж. физ. химии», 1970, 44, № 11, 2776—2778

В калориметре с вращающейся бомбой, покрытой изнутри платиной, определена энтальпия сгорания $\text{CCl}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$ (жидк.) (I) (чистота 99,9%) при 25°, $\Delta H^\circ = -391,5 \pm 0,27$ ккал/моль. Вычислена стандартная энтальпия образования I, ΔH° (обр., 298,15) = $-49,87 \pm 0,27$ ккал/моль. Автореферат

C₃H₄Cl₄

1970

shf
(46326s) Standard enthalpy of formation of 1,1,1,3-tetrachloro-
propane. Kolesov, V. P.; Tomareva, E. M.; Skuratov, S. M.
(Khim. Fak., Mosk. Gos. Univ. im. Lomonosova, Moscow,
USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1970, 44(11), 2776-8 (Russ). Using a
rotating bomb calorimeter, the combustion enthalpy of the title
compd. at 298.15°K was detd. to be -391.5 kcal/mole, and the
std. enthalpy of formation at this temp. was detd. to be -49.87
kcal/mole. M. Hoseh

C.A. 1971. 74. 10.

$\text{CH}_3\text{CHClCH}_3$

1970

$\text{CH}_3\text{CHClCH}_3$

3 Б796. Определение энтальпии образования 2-хлорпропана по данным о равновесии. Norén I. Sun-
ner S. The enthalpy of formation of 2-chloropropane
from equilibrium studies. «J. Chem. Thermodyn.», 1970, 2,
№ 4, 597—602 (англ.)

Изучено равновесие процесса 2-хлорпропан—пропен+
+HCl в интервале т-р 444—574° К. Определена зависи-
мость константы равновесия от т-ры, а также рассчита-
на энтальпия этого процесса: $\Delta H_{298} = 72,38 \pm 0,8 \text{ кДж/моль}$.
Энтальпия образования 2-хлорпропана равна $\Delta H^\circ_{298} =$
 $-144,6 \pm 0,85 \text{ кДж/моль}$. С. А. Ивашин

ΔH_f

X. 1974. 3

G.H.C. (12)

1970

ΔH_f°

(124257r) Enthalpy of formation of 2-chloropropane from equilibrium studies. Noren, Isa; Sunner, Stig (Chem. Center, Univ. Lund, Lund, Swed.). *J. Chem. Thermodyn.* 1970, 2(4), 597-602 (Eng). The equil. const. was detd. for the dehydrochlorination reaction $2\text{-chloropropane} \rightarrow \text{propene} + \text{HCl}$ at 444-574°K. The enthalpy of reaction was calcd. and used to derive a value of the std. enthalpy of formation of gaseous 2-chloropropane: $\Delta H_f^\circ (\text{g}, 298.15^\circ\text{K}) = -(144.60 \pm 0.85) \text{ kJ mole}^{-1}$.
RCSM

C.A. 1970.73.24

C-H-Cl

1970

C₃H₆Cl₂

C₃H₅Cl

23 Б680. Равновесие дегидрохлорирования 2,2-дихлорпропана. Шевцова Л. А., Рожнов А. М., Андреевский Д. Н. «Ж. Физ. химии», 1970, 44, № 6, 1529—1533

В проточной системе в области т-р 100—140° на Кт (NiCl₂ на акт. угле) исследовано равновесие: CH₃CCl₂CH₃ (I) $\rightleftharpoons$ CH₂CClCH₃ (II) + HCl. Для константы равновесия получено выражение: $\lg K_p = 8,20 - 3130/T$. Для ср. т-ры интервала 392° К вычислено: $\Delta H_T^0 = 14,3 \pm 0,2$ ккал/моль, $\Delta S_T^0 = 37,5 \pm 0,5$ э. е. Потенциальный барьер, ограничивающий вращение метильных групп в молекуле I, оценен в 4200 кал/моль. По мо-

К равновес

(+I)(II)

⊗

X. 1970. 23

лек. и спектральным данным рассчитаны термодинамич. функции II и I при 298,16° K; равные, соотв. для II и I $S_T^0 = 70,66$ э. е., $\Delta H^0(\text{обр.}) = -5,90$ ккал/моль, $\Delta Z^0(\text{обр.}) = 5,46$ ккал/моль; $S_T^0 = 77,76$ э. е.; $\Delta H^0(\text{обр.}) = -42,23$ ккал/моль, $\Delta S^0(\text{обр.}) = -20,38$ ккал/моль.

Автореферат

$(\text{CH}_3)_n\text{CCl}_{4-n}$

$\text{C}-\text{Cl}-\text{H}$

1970

$n=0-4$

полиморф.

4 Б983. Полиморфизм кристаллических метилхлорметановых соединений. III. Исследование методом дифференциальной сканирующей калориметрии. Silver Lawrence, Rudman Reuben. Polymorphism of the crystalline methylchloromethane compounds. III. A differential scanning calorimetric study. «J. Phys. Chem.», 1970, 74, № 16, 3134—3139 (англ.)

Исследование с целью систематизации и уточнения данных о фазовом поведении и величине энтальпий перехода в-в типа $(\text{CH}_3)_n\text{CCl}_{4-n}$, где $n=0-4$, высокотермические формы к-рых являются «пластичными кристаллами» (ротационно-крист. состояние в-ва). При охлаждении расплава CCl_4 , метилхлороформа и 2,2-дихлорпро-

X. 1971. 4

пана последовательно возникают 2 ротационно-крист. фазы, Ia и Ib, однако при нагревании наблюдается только переход II—Ib—L. У других в-в указанного типа всегда обнаруживается только одна ротационно-крист. фаза. Почти для всех наблюдаемых переходов измерены энтальпии перехода. Полученные результаты сопоставлены с литературными. Пред. сообщ. см. РЖХим, 1969, 13Б815. Ю. Мнюх

$C_{10}H_7Cl_7$ (P)

1971.

Бессараб Н.А., Черноглазова Ф.С.,
Мартынов Ю.М.

Ж. орг. химии, 1974, 48 (1),
235-6.

Измерение давления пара дигидро-
гектахлора в интервале 60-80°.

С.Ж. 1974. 80. N20. 112833g.

C-H-O

1971

Kp

ΔH ,

ΔS

18 Б692. Равновесие дегидрохлорирования и термодинамические свойства хлорциклогексана. Бражни-ков М. М., Кабо Г. Я., Андреевский Д. Н., Юр-ша И. А. «Изв. высш. учебн. заведений. Химия и хим. технол.», 1971, 14, № 4, 510—514

Изучено равновесие дегидрохлорирования хлорцикло-гексана (I) в т-рном интервале 173—210°. Из значения констант равновесия получено: $\Delta H^\circ_{464,5} = 15\,900 \pm \pm 370$ кал/моль, $\Delta S^\circ_{464,5} = 35,10 \pm 0,80$ э. е. и $\lg K_p = = 7,67 - 15\,900/4,5757 \cdot T$. Это соответствует $S^\circ(I), 464,5 = = 101,2 \pm 0,8$ э. е. и $\Delta H^\circ(I) = -42,8 \pm 0,37$ ккал/моль. По спектральным и молек. данным вычислены значения тер-

X. 1971. 18

термодинамич. функций e -формы в интервале t -р $298,15$ — 700°K и для a -формы при t -ре $464,5^\circ \text{K}$. С учетом энтропии смешения двух форм рассчитаны термодинамич. функции смеси в интервале $298,15$ — 500°K и ΔH° (обр.) от $298,15$ до 700°K . Значения для смеси форм: $S^\circ_{298,15} = 85,1$ э. е., $S^\circ_{464,5} = 101,5$ э. е., $\Delta H^\circ_{298,15} = -39,3$ ккал/моль и $\Delta H^\circ_0 = -30,6$ ккал/моль. Сопоставлены инкременты замены атома водорода на галоген в циклогексане с аналогичными характеристиками для алканов.

Автореферат

CH₃Cl

C₂H₅Cl

(ΔH_{comb})

1941

7362x Measurements of heats of combustion by flame calorimetry. 7. Chloromethane, chloroethane, 1-chloropropane, and 2-chloropropane. Fletcher, R. A.; Pilcher, G. (Chem. Dep., Univ. Manchester, Manchester, Engl.). *Trans. Faraday Soc.* 1971, 67(Pt. 11), 3191-201 (Eng). A flame calorimeter, designed to measure the heats of combustion of gaseous chloroalkanes is described and the following heats of combustion to give products CO₂(g) and HCl (600 H₂O)(l) at 25° and 1 atm are reported: chloromethane(g) = -764.01, chloroethane(g) = 1413.05, 1-chloropropane(g) = -2072.11, and 2-chloropropane(g) = -2059.62 kJ mole⁻¹. The derived heats of formation agree with those obtained from studies of equil. involving alkenes, HCl, and chloroalkanes, but disagree with those obtained by other calorimetric methods. The heats of formation of

chloroalkanes are discussed in terms of the Allen bond-energy scheme.

C.A. 1941. 26. 2

1971

C_3H_4Cl

Fletcher R. A.,
Pilcher G.

ΔH_c

Trans. Faraday Soc.,

1971, 67, 211, 3191.

($C_{60}Cl_3Cl$) I

С-Н-С

1971

8 Б995. Теплофизические свойства гексахлорбутадиена. Геллер З. И., Симонов В. Д., Любарский М. В., Брахфогель Е. А., Мейзлер Л. М., Парамонов И. А. «Изв. высш. учебн. заведений. Нефть и газ», 1971, № 11, 71—74.

Р Экспериментально исследованы давл. насыщ. пара гексахлорбутадиена в интервале т-р 70—210°, плотность, вязкость и поверхн. натяжение жидкости в интервале 10—80°. Результаты с хорошей точностью аппроксимированы аналитич. зависимостями. Расчетным путем с использованием опытных данных найдены нормальная т. кип., теплота парообразования в интервале 70—210°, крит. параметры, мол. рефракция, паракор и коэф. вязкости пара при атмосферном давл. в интервале 480—720° К.

Автореферат

X. 1972. 8



Δ, S

Kp

Craig Norman C,
"gr"

1971

"J. Phys. Chem."

1971, 75, N10, 1453-1460

($Cu. C_2H_2 ClH$)/I

1971

C-H-Nal 45931. Смирнов Ю. Н.,
Ткаченко В. А.

Nal = Cl

"Ж. прикл. химии",
1971, 44, ~ 10, 2358.

T_{t2} "Определение теплоты
 ΔH_{tx} растворения и теплот плавления
перехода и перекристаллизации
хлорида" криоскопическим методом

дом определен т-р
и тежкото неавесие
пораженими хлорида
и параклорид хлорида.

Аксоредерет.

1971

 $(CH_3)_3CCl$

15 Б604. Калориметрическое, диэлектрическое и инфракрасное исследование трет-бутилхлорида. Urban Stanisław, Janik Jerzy A., Lenik Janusz, Mayer Jacek, Waluga Tadeusz, Wróbel Stanisław. Calorimetric, dielectric, and infra-red investigations of solid t-butyl chloride. «Rept. Inst. fiz. jadr. Krakowie», 1971, № 784, 31 pp., ill. (англ.; рез. польск., рус.)

 T_{tr}

Проведены калориметрич. диэлектрич. ИК-измерения крист. трет-хлоризобутила $(CH_3)_3CCl$. Калориметрич. данные подтверждают наличие двух фазовых переходов в крист. фазе. Переходы при $181,1^\circ K$ и $219,4^\circ K$ интерпретированы как переходы 1-го рода, в то время как переход при $248,4^\circ K$ (точка плавления) относится к переходу 2—1 согласно классификации Мак-Коллафа. Диэлектрич. проницаемость в МВ-диапазоне измерялась в области т-р от 200 K до т-ры плавления. Данные указы-

X. 1972. 15

вают на наличие диэлектрич. дисперсии в этой области частот и подтверждают данные др. авторов. Результаты для пластически-крист. фазы подчиняются зависимости Кол — Кол с параметром распределения диэлектрич. времен релаксации α , равным нулю. Диэлектрич. времена релаксации вычислены для нескольких т-р от 220 до 300° К, а активационные энергии оценивались на основе трех моделей. ИК-спектры в диапазоне 400—1500 см⁻¹ показывают, что спектр фазы I почти идентичен со спектром жидкости, а в фазе II все четыре полосы расщепляются на две составляющие (давыдовское расщепление). Это расщепление увеличивается с понижением т-ры и более отчетливо выражено для III фазы.

По резюме

1972.

C₅H₉Cl)

8 Б815. Равновесие дегидрохлорирования хлорциклопентана. Бражников М. М., Кабо Г. Я. «Ж. физ. химии», 1972, 46, № 11, 2739—2742

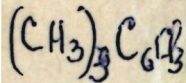
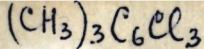
Изучено равновесие дегидрохлорирования хлорциклопентана (I) в т-рном интервале 138,9—195,6°. Из значения констант равновесия получено ΔH^0 (р, 440,4) =

14 590 ± 140 кал/моль, ΔS (р 440,4) = 33,50 ± 0,32 э. е. и $K_p = 7,32$ —14592/4,5757T, что соответствует S^0 (I, газ., 440,4) = 91,83 ± 0,32 э. е. и ΔH^0 (I, газ., обр., 440,4) = -31,41 ± 0,15 кал/моль. Для т-ры 440,4 и 298,15° К сделан расчет термодинамич. св-в I по молек. и спектральным данным и результаты сопоставлены с величинами, оцененными из эксперим. данных. Автореферат

Kp.

x. 1973. n 8.

1972



9 Б767. Исследование теплоемкости хлорпроизводных гексаметилбензола от 30 до 300° К. I. 1,2,3-трихлор-4,5,6-триметилбензол. Lagarrigue Michele. Etude de la chaleur spécifique des dérivés chlorés de l'hexaméthylbenzène entre 30 et 300 K. I. 1,2,3-trichloro-4,5,6-triméthylbenzène. «Mol. Cryst. and Liquid Cryst.», 1972, 17, № 3—4, 237—249. (франц., рез. англ.)

(Cp)

В адиабатическом калориметре в интервале 17—286° К измерена теплоемкость C_p тв. 1,2,3-трихлор-4,5,6-триметилбензола. В интервале 20—300° К вычислены сглаженные значения C_p , энтальпии, энтропии и изобарно-изотермич. потенциала. Результаты табулированы. В интервале 140—270° К обнаружено аномальное возрастание C_p λ -типа, соотв-щее переходу порядок—беспорядок. В результате анализа кривых $C_p = f(T)$ и $C_p/T = f(T)$ вычислены энтальпия и энтропия перехода 194 ± 1 кал/моль и $0,908 \pm 0,003$ э. е. соответственно.

И. Васильев

X. 1973. № 9

1972

 $\text{Cl}_2\text{CH}-$
 $-\text{CHCl}_2$
 (ΔH_v)

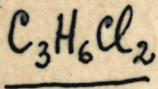
11 Б696. Энтальпии испарения органических соединений. IX. Некоторые галогензамещенные углеводороды и эфиры. Laynez José, Wadsö Ingemar. Enthalpies of vaporization of organic compounds. IX. Some halogen substituted hydrocarbons and esters. «Acta chem. scand.», 1972, 26, № 8, 3148—3152 (англ.)

При $25,00 \pm 0,02^\circ$ калориметрически определены энтальпии испарения $\text{Cl}_2\text{CH}-\text{CH}_3$, $\text{Cl}_3\text{C}-\text{CH}_3$, $\text{Cl}_2\text{CH}-\text{CH}_2\text{Cl}$, $\text{Cl}_2\text{CH}-\text{CHCl}_2$, $\text{ClCH}_2-\text{COOCH}_3$, $\text{Cl}_2\text{CH}-\text{COOCH}_3$, $\text{Cl}_3\text{C}-\text{COOCH}_3$, $\text{ClCH}_2-\text{COOC}_2\text{H}_5$, $\text{Cl}_2\text{CH}-\text{COOC}_2\text{H}_5$, $\text{Cl}_3\text{C}-\text{COOC}_2\text{H}_5$, CH_2Br_2 , и CHBr_3 , равные, соотв., $30,62 \pm 0,14$; $32,47 \pm 0,06$; $40,28 \pm 0,06$; $45,78 \pm 0,16$; $46,73 \pm 0,06$; $47,72 \pm 0,10$; $48,33 \pm 0,12$; $49,47 \pm 0,08$; $50,60 \pm 0,04$; $50,97 \pm 0,12$; $36,97 \pm 0,10$ и $46,05 \pm 0,10$ кДж/моль. Проведено сопоставление изменений величин $\Delta H_{(\text{исп.})}$ с изменением структурных параметров и с точками кип. соедине-

ний, полученных в данной работе и ранее. Сообщ. VIII см. РЖХим, 1971, 18Б688. В. К. Камышова

х. 1973 N 11

(+3)



Miltenburg J.C.

1972

(Cp)

"J. Chem. Thermodyn.", 1972, 4,
N 5, 773-782.

(corr. C_7H_{16} , I);

1972

C-C-H

17 Б719. Номограмма для оценки давления паров первичных н-алкилхлоридов. Ramaswamy V. Nomogram to estimate vapour pressures of primary n-alkyl chlorides. «BCE and Process Technol.», 1972, 17, № 3, 250 (англ.)

Предложена номограмма для расчета давл. паров 1-хлоралканов от C_3 до C_{16} в интервале т-р от -20 до 250° .

И. Васильев

P(atm)

X. 1972. 17

20911.7095
СГ, X

$(C_2H_5)_2$ (кр. и м. д. с.)
00787
XIV 4135

Определение термодинамических характеристик
комплексообразования в системе бром-
трихлорэтилен методом ядерного магнитно-
го резонанса. Зенин С. В., Пинский Д. Л.,
Сергеев Г. Б.

"Ж. физ. химии", 1972, 46, № 8; 1974-1979

690 692

0703

ВИНИТИ

1973

 $C_2H_3Cl_3$

5 В 126. Термодинамические свойства алифатических галогензамещенных соединений. II. Теплоемкость 1,1,1-трихлорэтана. Andon R. J. L., Counsell J. F., Lee D. A., Martin J. F. Thermodynamic properties of aliphatic halogen compounds. Part 2. Heat capacity of 1,1,1-trichloroethane. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1973, Part I, 69, № 9, 1721—1726 (англ.)

(ср) Теплоемкость тв. и жидк. 1,1,1-трихлорэтана (I) измерена в интервале 11—315 К с помощью адиабатич. калориметра. Фазовый переход 1-го рода обнаружен при 224,80 К с энтальпией 7490 ± 5 дж/моль. Определена т. пл. I, равная 243,1 К и энтальпия плавления 2350 ± 5 дж/моль. Табулированы сглаженные значения термодинамич. функций в интервале 10—310 К с шагом в 10° . Для жидк. фазы при 298,15 К получено $H - H_0^\circ = 35\,220$ дж/моль, $C_p = 144,4$, $S^\circ = 226,7$, $-(G_0 - H_0^\circ)/T = 108,6$ дж/град·моль. В интервале 330—450 К в проточном калориметре изме-

X. 1974 N 5

рена теплоемкость пара I. она представлена зависи-
 мостью $C_p = C_p^\circ + p(Ca^2/T^2)\exp(a/T)$, где C_p° — тепло-
 емкость идеального пара I, p — давление, c и a — констан-
 ты. С использованием МПК рассчитаны значения $c =$
 $= 3,668 \cdot 10^{-7}$ и $a = 875$ и т-рная зависимость теплоемкос-
 ти идеального пара C_p° (дж/моль·град) $= 29,766 +$
 $+ 0,254297 T - 0,00014744 T^2$. Измерены энтальпии испа-
 рения при 347,233; 334,658 и 315,464 К, равные 29 708,
 30 420 и 31 474 дж/моль соотв. Их т-рная зависимость
 представлена в виде функции приведенной т-ры с ис-
 пользованием $T(\text{крит.}) = 545 \text{ К}$: $\Delta H(\text{исп.}) = 43 978 (1 -$
 $- T/545)^{0,387}$ дж/моль. Для второго вирального коэф. по-
 лучено ур-ние $B = 0,000556 - 3,668 \cdot 10^{-7} \exp(875/T)$. Рас-

считана энтропия I в состоянии идеального газа при
 298° К и $p_{\text{нас.}} = 101,325 \text{ кПа}$ $S^\circ = 320,4$ дж/моль·град.
 Пред. сообщ. см. РЖХим. 1973, 19Б596. П. М. Чукуров

1973

$C_6H_4Cl_2$

Д 7 Б876. К вопросу о связи полиморфных превращений и фазовых переходов. Архангельский К. В. В сб. «Кинетика и механизм кристаллизации». Минск, «Наука и техн.», 1973, 29—32

фазовые
переходы

Полиморфное превращение в парадихлорбензоле сопоставлено с аналогичным процессом в др. пр-ном бензола — нитробензоле, к-рый является одним из компонентов бинарных жидких смесей с крит. т-рой смешения. На основе эксперим. данных показано, что существует связь полиморфного $\alpha \rightleftharpoons \beta$ -превращения в п-дихлорбензоле с мезофазными и критич. переходами в двойных жидких смесях с нитробензолом. Резюме

Х. 1974 № 7

$\text{CH}_2\text{CHCHCl-H}$.

1973

Alfassi Ze'ev B., et al.

(Do)

"Int. J. Chem. Kinet"

1973, 5, N^o 1, 155-167.

● (C₄. CH_2CHCHPH ; I)



1973

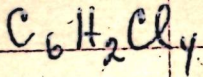
20 Б573. Термохимия изомеризации 3-галопропенов (аллилгалонидов) в 1-галопропены; вклад в энтропию и энтальпию образования группы $\text{C}_d\text{-(H)(X)}$. Alfassi Ze'ev B., Golden David M., Benson Sidney W. The thermochemistry of the isomerization of 3-halopropenes (allyl halides) to 1-halopropenes; entropy and enthalpy of formation contribution of the $\text{C}_d\text{-(H)(X)}$ group. «J. Chem. Thermodyn.», 1973, 5, № 3, 411—420 (англ.)

$\Delta H; \Delta S$

Исследована температурная зависимость констант равновесия газовых реакций изомеризации $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{Cl}$ (I) $\rightarrow$ цис- $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCl}$ и I $\rightarrow$ транс- $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCl}$ в интервале 573—681° К в присутствии J_2 и смеси $\text{HBr} + \text{Br}_2$ в качестве катализаторов. Вычислены ΔH и ΔS обеих реакций. В результате анализа эксперим. и лит. данных рекомендованы значения энтальпии образования и энтропии при 298,15° К ряда соединений. Далее приведены: соединение, S° (э. е.), ΔH°

Х. 1973. № 20

(обр., ккал/моль): AlIF ; 70,6; —39,1; AlICl ; 73,3; —0,15; AlIBr ; 75,8; 11,8; AlIJ ; 77,9; 22,9; транс-FPro; 69,0; —41,3; цис-FPro; 69,0; —42,1; транс-ClPro; 71,5; —2,8; цис-ClPro; 71,5; —3,7; транс-BrPro; 74,5; 11,5; цис-BrPro; 74,5; 10,7; транс-JPro; 76,7; 23,0; цис-JPro; 76,7; 21,8; винилхлорид; 63,1; 5,0; где $\text{Al}=\text{CH}_2=\text{CHCH}_2-$; Pro = $-\text{CH}_3\text{CH}=\text{CH}-$. В развитие аддитивного метода Бенсона (см. РЖХим, 1970, 5Б1004) вычислены для 298,15° К вклады структурных групп и поправки на структуру ряда галогенсодержащих групп. Далее приведены: группа, ее вклад в энтропию (э. е.) ее вклад в энтальпию образования (ккал/моль), поправка к энтальпии образования для цис-структуры (ккал/моль): $C_d(\text{H})(\text{F})$; 32,8; —39,8; —0,8; $C_d(\text{H})(\text{Cl})$; 35,4; —1,3; —0,9; $C_d(\text{H})(\text{Br})$; 38,3; 13,0; —0,8; $C_d(\text{H})(\text{J})$; 40,5; 24,5; —1,2; $C(C_d)(\text{H})_2(\text{F})$; 35,0; —54,0; —; $C(C_d)(\text{H})_2(\text{Cl})$; 37,7; —15,0; —; $C(C_d)(\text{H})_2(\text{Br})$; 40,2; —3,0; —; $C(C_d)(\text{H})_2(\text{J})$; 42,3; 8,1; И. Васильев



(Кс)

1975
4 Б621. Изучение равновесия между изомерами тетрахлорбензола. Ерыкалов Ю. Г., Спрысков А. А., Лекомцева Н. Б. «Изв. высш. учеб. заведений. Химия и хим. технол.», 1973, 16, № 9, 1456—1458

Экспериментально исследовано равновесие р-ции взаимной изомеризации 1,2,3,5-(I), 1,2,4,5-(II) и 1,2,3,4-(III) тетрахлорбензолов при 280° и I и II при 300. Р-цию проводили в запаянных стеклянных ампулах. Кт служил расплав $AlCl_3$ (58,9%) + $NaCl$. Продукты р-ции анализировали хроматографически. Время достижения равновесия составляло 9—10 час при 280° и 4—5 час при 300°. Равновесная смесь содержит около 50% I, 35% II и 15% III и ее состав при 280 и 300° одинаков вследствие близости значений термодинамич. св-в I—III. Содержание пентахлорбензола в продуктах р-ции не превышало 1%, а трихлорбензолы не обнаружены. Результаты одной из серии опытов табулированы. Предв. исследования показали, что на Кт $AlCl_3$, промотированном водой, р-ция идет очень медленно и образуются преимущественно продукты диспропорционирования I—III.

И. Васильев

X1974 К4

C₅H₁₂Cl

1973

17 Б659. Равновесие и термодинамика изомеризации метилхлорбутанов. Есипенок Г. Е., Кабо Г. Я.,

Андреевский Д. Н. «Ж. физ. химии», 1973, 47, № 3, 739—740

По равновесным данным для р-ции изомеризации 2-метил-2-хлорбутана в 2-метил-3-хлорбутан в интервале 0—100° в жидк. фазе получены значения ΔH_T° (жидк.) = 1890 ± 50 кал/моль, ΔS_T° (жидк.) = $1,75 \pm 0,2$ э. е.

Резюме

ΔH_T°

X. 1973 N17

1973

 $C_3H_5Cl_3$

5 Б750 Деп. Равновесие дегидрохлорирования 1,1,1-трихлорпропана. Измайлов В. Д., Карасева С. Я., Рожнов А. М. (Редколлегия ж. «Изв. высш. учеб. заведений. Химия и хим. технол. Иваново, 1973. 5 с., библиогр. 12 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 28 сент. 1973 г., № 6841-73 Деп.).

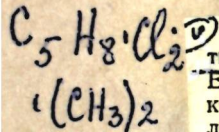
Исследовано равновесие дегидрохлорирования 1,1,1-трихлорпропана в паровой фазе в интервале 138—214,5°С на катализаторе (хлористый никель на акт. угле). Р-ция проводилась в проточном реакторе, обогреваемом парами устойчиво кипящих жидкостей, конденсат анализировался хроматографически. Для ср. т-ры 449,5°К получено $\Delta H_T^\circ = 13460 \pm 100$ кал/моль, $\Delta G_T^\circ = -2170 \pm \pm 190$ кал/моль и $\Delta S_T^\circ = 34,78 \pm 0,20$ э. е. На примере

ряда однотипных р-ций дегидрохлорирования показано, что введение хлора в метильную группу алкана снижает величину энтальпии р-ции, при этом бессимметричное изменение энтропии изменяется незначительно.

Автореферат

Кр: ΔH

X. 1974 № 5



2 Б819. Термодинамика реакций изомеризации метилхлоридов алканов и межрядовые инкременты. Кабо Г. Я., Есипенок Г. Е., Роганов Г. Н. В сб. «Шестая Всес. конф. по калориметрии, 1973. Расшир. Тезисы докл.» Тбилиси, «Мецниереба», 1973, 151—154

1973

В запаянных стеклянных ампулах изучено равновесие реакций изомеризации жидк. хлоргексанов, хлорпентанов и хлорпропана: 2-метил-2-хлорпентан (I) → 2-метил-3-хлорпентан (II) (1); 3-метил-3-хлорпентан (III) → 3-метил-2-хлорпентан (IV) (2); I → III (3); I → 2-метил-4-хлорпентан (V) (4); II → V (5); II → IV (6); III → II (7); 2-хлоргексан → 3-хлоргексан (8); 2-метил-2-хлорбутан → 2-метил-3-хлорбутан (9); 2-хлорпентан → 3-хлорпентан (10); 1-хлорпропан → 2-хлорпропан (11). По результатам эксперимента вычислены ΔH° (ккал/моль) и ΔS° (кал/моль·град) для р-ций (1) — (11) соотв.: $1,85 \pm 0,13$ и $2,14 \pm 0,4$; $2,05 \pm 0,16$ и $3,40 \pm 0,4$; $0,67 \pm 0,03$ и $1,18 \pm 0,08$; $0,84 \pm 0,04$ и $0,18 \pm 0,1$; $-1,01$ и $-1,96$; $0,87$ и $2,44$; $1,18$ и $0,96$; $-0,15$ и $-0,09$; $1,89 \pm 0,05$ и $1,75 \pm 0,2$; $-0,13$ и $-1,47$; $2,7$ и $-2,6$.

ΔH° ; ΔS°

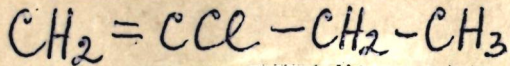
с. 1974

N2

По лит. данным приведены значения ΔH° и ΔS° для сходных р-ций углеводородов в жидк. фазе. Рассчитаны изменения энтропии $\Delta S'$ для р-ций (1) — (11). и р-ций углеводородов, учитывающие изменение чисел симметрии компонентов и наличие стереоизомеров. Установлено, что при изомеризации втор. и трет. метилхлорпентанов миграция C1 в α -положение по отношению к метильной группе в р-циях (1) и (2) сопровождается небольшим изменением $\Delta S'$ 0,7 э. е., а миграция Me-группы из положения 2 в центр углеродной цепи в р-циях (3) и (6) вызывает возрастание $\Delta S'$ до 1 э. е. Отмечается нек-рая

нерегулярность значений ΔH° и ΔS° внутри рядов хлоралканов и углеводородов и между рядами этих соединений, причиной чего могут быть неточность величин энтальпий образования и энтропии углеводородов, а также своеобразие параметров внутреннего вращения в отдельных изомерах. Указано, что расчет термодинамич. св-в галогеналканов методом инкрементов по данным о св-вах алканов может привести к заметному расхождению с эксперим. данными.

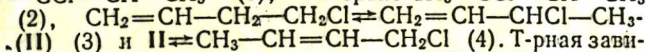
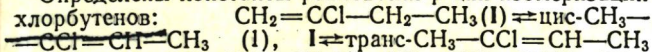
И. Васильев



1973

2 Б816. Некоторые особенности в теплотах реакции изомеризации хлорбутенов. Леванова С. В., Родова Р. М., Шевцова Л. А., Рожнов А. М. В сб. «Шестая Всес. конф. по калориметрии, 1973. Расшир. тезисы докл.» Тбилиси, «Мецниереба», 1973, 176

Определены константы равновесия р-ций изомеризации хлорбутенов:



мость $\lg K_p$ выражена уравнениями $456/T - 0,175$, $724/T - 0,25$, $876/T - 0,394$ и $200/T - 0,25$ для р-ций (1) — (4) соотв. Значения $-\Delta H_T^\circ$ составили 2,1; 3,3; 4,0 и 0,9 ккал/моль.

а ΔS° 0,8; —1,15; —1,8 и —1,15 э. е. при ср. т-рах 568, 568, 548 и 478° К соотв., для р-ций (1) — (4). Обсуждены нек-рые особенности р-ционноспособности изученных соединений и определены отклонения, возникающие в теплотах образования хлоралкенов за счет взаимодействия двойной связи с галогеном и метильной группой.

А. Гузей

$\Delta H_{\text{реакции}}$

х. 1974

№

$C_2H_2Cl_4$

Взр - 4489 - XIV

1973

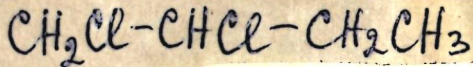
Макитра Р. Р.
и др.

(ΔH_m)

"не. обш. химии"

1973, 43, № 1, 146-49.

● (см. C_2Cl_4 ; I)



1973

✓ 2 Б817. Некоторые закономерности в теплотах реакций изомеризации дигалогеналкенов. Рожнов А. М., Черкасова Р. И., Нестерова Т. Н. В сб. «Шестая Всес. конф. по калориметрии, 1973. Расшир. тезисы докл.» Тбилиси, «Мецниереба», 1973, 166—169

Исследованы равновесия изомеризации дихлорбутанов:
 $\text{CH}_2\text{Cl}-\text{CHCl}-\text{CH}_2\text{CH}_3 \text{ (I)} \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{Cl}-\text{CH}_2-\text{CHCl}-\text{CH}_3 \text{ (II)}$
 $\text{(II)} \rightleftharpoons \text{I}$, $\text{CH}_2\text{Cl}-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl} \text{ (III)} \rightleftharpoons \text{I} \text{ (2)} \text{ и } \text{III} \rightleftharpoons \text{II} \text{ (3)}$
 при 0, 30, 60, 90 и 120° в жидк. фазе в присутствии Kt AlCl_3 . Анализ равновесных смесей проводился методом ГЖХ. Для т-рных зависимостей $\lg K_p$ р-ций (1)—(3) получены ур-ния $374/T - 0,1$, $142/T + 0,012$ и $516/T - 0,088$ соотв. Значения энтальпий этих р-ций составили $-\Delta H_T^\circ = 1,71, 0,65$ и $2,36$ ккал/моль, а энтропий $\Delta S_T^\circ - 0,46; 0,06$ и $-0,40$ э. е. Полученные данные

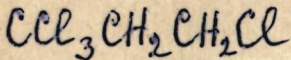
ΔH_T°

х. 1974

N2

сравниваются с значениями тепловых эффектов изомеризации дибромалканов. Обсуждаются общие колич. закономерности изомеризации дигалогеналканов в сравнении с соотв-щими моногалогенпроизводными. Установлены закономерности изменения теплот изомеризации в зависимости от типа р-ции. Показано, что они определяются только положением связи углерод—галоген независимо от типа галогена.

А. Гузей



1973

2 Б764. Теплоемкость и фазовые превращения при низких температурах тетрахлорпропана, пентафторхлорпропана и тетрахлордифторэтана. Воробьев В. Н., Колесов В. П., Саржина Е. А. В сб. «Шестая Всес. конф. по калориметрии, 1973. Расшир. тезисы докл.» Тбилиси, «Мецниереба», 1973, 363—366

В вакуумном адиабатич. калориметре измерена низкот-рная теплоемкость 1,1,1,3-тетрахлорпропана (I), 1,1,1,3,3-пентафтор-3-хлорпропана (II) и 1,2-дифтор-1,1,2,2-тетрахлорэтана (III). Далее для указанных соединений следует т-ра ($^{\circ}\text{K}$) и энтропия (э. е.) твердофазового превращения, т-ра и энтропия плавления, теплоемкость и энтропия при 298 K, $-\Delta G^{\circ}$ (обр., жидк., ккал/моль), соотв.: I 219,9; 2,40; 237,74; 10,57; 46,94; 67,95; 45,67, II —; —; 165,42; 15,12; 46,96; 74,48; 245,40, III 90; —; 299,7; 2,95; —; —; —. Результаты сравнены с данными для $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{CCl}_3$, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{CHCl}_2$ и $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$. Обсуждается влияние структуры соединения на подвижность молекул и их фрагментов в тв. фазе.

А. Гузей

 $\Delta G^{\circ}(\text{ж})$ $C_p; T_{\text{тв}}$ S₂₉₈

x. 1974

N2

С.Н.С.

оттиски 3145 1973

Сирванна Б. Г.

Гилебдургу М. М.

АНЗ

Материалы Т. Вее.

Совещ. по химическим
вопросам, 1973 стр 134
г. Москва

$C_{15}H_{10}Cl_2$

1973

фазовые
превращения

2 E525. Фазовые превращения в молекулярных кристаллах. Williams J. O. Phase transformations in molecular crystals. «J. Mater. Sci.», 1973, 8, № 9, 1361—1362 (англ.)

С помощью ПЭМ обнаружено, что при фазовом превращении в молекулярных кристаллах 1:8 дихлор-10-метилантрацена новая фаза образуется в виде тонких пластин, параллельных направлению $\langle 103 \rangle$, при этом между решетками двух фаз имеется определенное ориентационное соотношение.

И. М. Р.

ф. 1974 № 2

CH_3Cl

CH_2Cl_2

CHCl_3

$\text{CH}_4 - \text{Cl}_2 - \text{MF}$ Черняк Г.П.

система

$\left(\begin{array}{l} \Delta H_f, \text{кр}, \\ \Delta S, \text{ср} \end{array} \right)$

Деп N 133

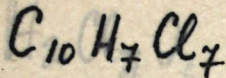
1974

Рук. деп. ВЛННТЦ

хс. фгу. мш.

N 1646-74 деп

1974



(P)

112833g Measurement of the vapor pressure of dihydroheptachlorine in the range 60-80°. Bessarab, N. A.; Chernoglazova, F. S.; Martynov, Yu. M. (USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1974, 48(1), 235-6 (Russ). The abs. temp. (T) dependence of vapor pressure (P) of dihydroheptachlor at 60-80° is $\log P = (-4110/T) + 9.35$. The P was detd. by the effusion method.

C.A.1974.80. N20

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl}$, CH_3CHCl_2 , CH_3CCl_3 , $\text{CH}_2\text{ClCCl}_2$ | 1974
 $\text{CHCl}_2\text{CCl}_3$, CCl_3CCl_3 (C_p , S , H_f-H_o , G_f-H_o , ΔH_f , ΔG_f , K_p)

Chao J., Rodgers A.S., Wilhoit R.C.,

Zwolinski B.J.

J. Phys. and Chem. Ref. Data, 1974, 3, N1, 141-162 (continued)
XIV-6446

Ideal gas thermodynamic properties of six
chloroethanes.

PHI Sum., 1975

2151000

HO (CP)

CHCl

Dougherty Rolph C. 1974

"Org. Mass Spectrom"

$\Delta H, \Delta S$

1974, 8, Jan 77-79 (ann)

(see CH₃ Cl; I)

Cl-D... O(CH₃)₂
(комплекс)

1974

(Kp)

114532g Thermodynamics and spectroscopy of the hydrogen-bonded complex formed between hydrogen (deuterium) chloride and dimethyl ether in the gas phase by Raman scattering. Gilbert, A. S.; Bernstein, H. J. (Div. Chem., Natl. Res. Council, Canada, Ottawa, Ont.). *Can. J. Chem.* -1974, 52(4), 674-7 (Eng). The equil. const. K_p was obtained for the complex Cl-D... OMe₂ at 22-132° by monitoring the integrated intensity of the Raman scattered band from unassociated DCl in a mixt. with Me₂O. By applying the relation $\ln K_p = -\Delta H/RT + \Delta S/R$ the quantities ΔH , ΔG , and ΔS were evaluated. Broad v_{cl} and v_{cl}-n complex bands were obsd. and are polarized.

C.A. 1974. 80. N20

1974

C7H8

23 Б751. Теплофизические свойства некоторых хлорпроизводных толуола и п-трет-бутилтолуола. Фельдман И. Н., Латенко Б. В., Коньшин В. И., Трусилов В. В. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1974. 8 с., ил., библиогр. 9 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 17 июня, 1974 г., № 1615—74 Деп.)

Cp; ΔH

Определены калорич. характеристики ряда пр-ных толуола: теплоемкость C_p (дж/кг·град) коэф. теплопроводности λ (дж/м·сек·град) и теплота парообразования в н. т. кип. ΔH (кдж/кг). Т-рные зависимости C_p и λ определены в интервале 20—200° и представлены графически. Значения C_p , λ при 20° и ΔH составили соотв. п-третбутилтолуол 1620; 0,133; 300,9; п-хлортолуол 1390; 0,116; 319,1; 2,3,6-трихлортолуол 1220; 0,103; 239,2; о-хлор-п-третбутилтолуол 1470; 0,099; 244,8; 2,3,6-трихлор-4-отрет-бутилтолуол 1190; 0,090; 213,8 со ср. отклонениями от расчетных значений 6,5; 6,9 и 3% соотв. Считается, что точность полученных результатов достаточна для инженерной практики. А. Гузей

x. 1974.
N23

$C_6H_5)(C_6H_5)_2$

1974

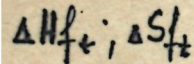
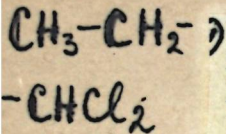
18 Б799. Исследование теплоемкости о-хлордифени-
ла в интервале 12—327 К. Гейдаров Х. И., Джа-
фаров О. И., Карашарли К. А., Кострю-
ков В. Н. «Ж. физ. химии», 1974, 48, № 5, 1147—1149

(C_p)

В адиабатич. калориметре в интервале т-р 12—327° К
измерена теплоемкость тв. и жидк. о-хлордифенила (I).
Несколько выше 285° К на кривой т-рной зависимости
 C_p наблюдалась λ -образная аномалия. Величина ее
уменьшилась в 4 раза после очистки образца методом
зонной плавки. Это соответствовало снижению приме-
сей от 1,28 до 0,34 мол.%. С учетом пропорциональ-
ности величины аномалии кол-ву примесей допущено,
что аномалия вызвана не фазовым переходом, а плав-
лением эвтектики, образованной примесью и I. При об-
работке результатов теплота ложного перехода не
учитывалась. Экстраполирование к 0° К проводилось по
ур-нию Дебая с $\Theta = 54,46^\circ \text{К}$. Значения C_p , S_T и $H_T - H_S$
табулированы в интервале 20—330° К с шагом 10°. При
298,15° К они составили соотв. 49,72 кал/моль·град,
72,60 э. е. и 9089 кал/моль. Для энтальпии и т-ры
плавления I получено 3470 ± 20 кал/моль и $304,94 \pm$
 $\pm 0,02^\circ \text{К}$. Последнее значение рассчитано для чистого
I экстраполированием данных для очищенного образца.

А. Гузей

Х. 1974
N18



Х. 1974
N 19

1974

19 Б906. Исследование дегидрохлорирования и изомеризации 1,1-дихлорпропана. Измайлов В. Д., Шевцова Л. А., Шаронов К. Г., Рожнов А. М. «Изв. высш. учеб. заведений. Химия и хим. технол.», 1974, 17, № 5, 706—709

В интервале 150—230° исследовано дегидрохлорирование 1,1-дихлорпропана (I) в пар. фазе, протекающее по ур-нию $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CHCl}_2 \rightleftharpoons \text{HCl} + \text{CH}_3-\text{CH}=\text{CHCl}$ (смесь цис- и транс-форм). Дегидрохлорирование I изучалось в реакторе проточного типа в присутствии Ni и Вi ан акт. угле. Состав продуктов р-ции определялся хим. и хроматографич. методами. Определены т-рные зависимости константы равновесия энтальпии и энтропии дегидрохлорирования и изомеризации I: $\lg K = 7,33 - 3,05 \cdot 10^3/T$, $\Delta H_T^\circ = 13,96 \pm 0,45$ ккал/моль и $\Delta S_T^\circ = 33,54 \pm 0,30$ э. е. (дегидрохлорирование); $\lg K = -0,16 - 0,86 \cdot 10^3/T$, $\Delta H_T^\circ = 3,925 \pm 0,728$; $\Delta S_T^\circ = -0,74 \pm \pm 1,96$ (изомеризация). С использованием лит. данных рассчитаны термодинамич. параметры р-ции дегидрохлорирования с образованием только цис-изомера $\lg K = 7,32 - 3,0 \cdot 10^3/T$, $\Delta H_T^\circ = 13,74 \pm 0,40$; $\Delta S_T^\circ = 33,53 \pm \pm 0,27$ и транс-изомера $\lg K = 7,36 - 3,15 \cdot 10^3/T$, $\Delta H_T^\circ = 14,44 \pm 0,50$, $\Delta S_T^\circ = 33,52 \pm 0,45$. П. М. Чукуров

C-H-Cl.
C-H-F

(соединения)

1974

3 Б883. Разделение энергии с помощью масс-спектрометра: хлоралканы и хлоралкены. Kim K. C., Beynon J. H.; Cooks R. G. Energy partitioning by mass spectrometry: chloroalkanes and chloroalkenes. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 4, 1305—1314 (англ.)

Масс-спектральным методом изучены р-ции отщепления (РО) HCl от молек. ионов хлоралканов [CH₃CH₂Cl, CH₂Cl—CH₂Cl, CH₃CHCl₂, CH₂Cl—CHCl₂, CCl₂—CH₂Cl, CHCl₂—CHCl₂; CHFCl—CHFCl, C₆H₅CH₂CH₂Cl, CH₃CH₂—CH₂Cl, CH₃CHClCH₃, CH₂ClCH₂CH₂Cl, CH₂ClCHClCH₃, 1-C₄H₉Cl, 2-C₄H₉Cl, 1,4-C₄H₈Cl₂, 1,2-C₄H₈Cl₂, (d, l)-2,3-C₄H₈Cl₂, мезо-2,3-C₄H₈Cl₂ и хлоралкенов (CH₂=CHCH₂Cl, CH₂=CH—CHClCH₂Cl, CH₃CH=CHCH₂Cl, хлороциклобутан, хлороциклогексан, HOCH₂(CH₂)₂CH₂—CH₂Cl, CH=CHCHClCH₃, CH₂ClCHClCH₂CH₃, CH₃CHCl—CHClCH₃). По ширине пиков соотв-щих метастабильных

(кр).

х. 1975. №3

ионов определены кинетич. энергии РО. Обнаружены два класса РО для хлоралканов — с кинетич. энергиями 430—630 и 15—40 мэв. Установлено, что РО 1-го типа протекают по механизму 1,2-отщепления, 2-го — 1,3-отщепления. Обнаружены р-ции, в к-рых механизмы 1,2 и 1,3 конкурируют. На основании эксперим. данных по Пт появления ионов и Пт, ионизации и лит. данных рассчитаны термодим. характеристики для РО-1,2. С помощью статистич. теории скоростей рассчитан вклад активированного комплекса и крит. энергии в полную внутреннюю энергию реагирующего иона для 1,2-РО. Для РО 1,3 предположено, что значения крит. энергии невелики и существенный вклад в выделяющуюся кинетич. энергию вносит энергия активированного комплекса.

М. В. Коробов



40917.1316

Ex-C, Ch, Ph, TC

CCl₃CH₂CH₂Cl

40891

of 1974

CF₃CH₂CH₂Cl

(c)*

4-6289

Kolesov V.P., Vorob'ev V.N., Sarzhina
E.A., Pentin Yu. A., Timoshenkova Yu. D.
Heat capacity from 12 to 300 K, phase
transitions, and thermodynamic functions
of 1,1,1-trifluoro-3-chloropropane and
1,1,1,3-tetrachloropropane.

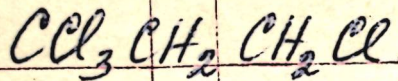
"J. Chem. Thermodyn.", 1974, 6, N7,
613-628 (англ.)

155

159

0131

ВИНИТИ



аммиа 4305 1974

Россов В. П.
и др.

(ср, м. гр)

Ж. Chem. Thermod.
1974, 6, 613-28.

$C_3Cl_4H_4$

(ср)

ж. 1974. №24

1974

Kolesov V.P. Vorob'ev V.N.

"J. Chem. Thermodyn" 1974, 6, №7,
613-628 (англ.)

теплоемкость в интервале
от 12 до 300°K, фазовые переходы
и термодинамические ф-ции
1,1,1-трифтор-3-хлорпропана и
1,1,1,3-тетрахлорпропана.

($C_3Cl_3F_3H_2$; I)

1974

 C_6H_5Cl

✓ 6 Б963. Экспериментальное исследование изохорной теплоемкости C_v хлорбензола на линии насыщения, включая критическую точку. Керимов А. М., Сулейманов Я. М., Акперов Ф. А. «Сб. тр. Энерг. ин-т им. Г. М. Кржижановского», 1974, вып. 16, 48—52

 (C_v)

Измерены изохорные теплоемкости хлорбензола на 20 изохорах в т-рном интервале $\sim 290—700$ К, охватывающих докритическую, крит. и закрит. области. Суммарная ошибка в крит. области достигала 5%, при удалении от нее на $0,3^\circ$ погрешность составляла 2%, а далее с возрастанием т-ры снижалась до 1—1,5%. Результаты измерений C_v представлены графически. Обсуждается зависимость функции $C_v(V, T)$ от фазового состава. Экс-

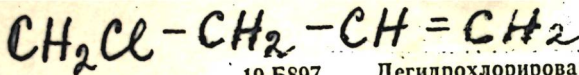
① Р. Г



ж. 1975. №6

перим. данные по изохорам вблизи крит. точки аппроксимированы экспоненциальной зависимостью $C_v^k = a_{\pm} \exp[-b_{\pm}(T_{\text{крит}} - T^{0,1})]$, где $a_{\pm} = 6,851$ и $5,082$ кал/град·г, а $b_{\pm} = 2,234$ и $2,442$ соотв. На основе теории масштабных преобразований эксперим. данные по C_v описаны уравнением $C_v = A_{\pm}|t|^{-\alpha} + B_{\pm}$, где A_{+} и B_{+} соответствуют $t = (T - T_{\text{крит}})/T_{\text{крит}} > 0$, а A_{-} и $B_{-} = (T - T_{\text{крит}})/T_{\text{крит}} < 0$. Наиболее вероятные значения α для хлорбензола лежат в окрестности $\alpha = 0,14$, а константы $A_{\pm} = 0,256$ и $0,564$, $B_{+} = -0,288$ и $-0,722$. Неравенство B_{+} и B_{-} свидетельствует о неодинаковом характере возрастания C_v при подходе к крит. точке с обеих сторон, что позволило сделать заключение о конечной величине C_v^k .

А. Гузей



1974

19 Б897. Дегидрохлорирование 1,3-дихлорбутана.
Леванова С. В., Родова Р. М., Рожнов А. М.,
Шевцова Л. А. «Ж. физ. химии», 1974, 48, № 5,
1263—1264

В работе приведены результаты эксперим. исследо-
вания дегидрохлорирования 1,3-дихлорбутана (1,3-
ДХБ) в проточной системе в газ. фазе в т-рном ин-
тервале 170—240°. Дегидрохлорирование 1,3-ДХБ про-
текает с образованием $\text{CH}_2\text{Cl}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}_2$ (1),
 $\text{CH}_2\text{Cl}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_3$ (2) и $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CHCl}-\text{CH}_3$ (3),
(причем 4-хлорбутен-1 (4-ХБ-1) составляет более 90%
в расчете на сумму хлорбутанов). Для р-ции образо-
вания (1) рассчитаны K_p , ΔH и ΔS : $\lg K_p = 7,50 - 3,78 \cdot$
 $\cdot 10^3/T$ $\Delta H^\circ (478^\circ \text{K}) = 18,04 \pm 0,27$ ккал/моль. ΔS°
 $(478^\circ \text{K}) = 35,87 \pm 0,54$ э. е. С использованием теплоты
дегидрохлорирования 1,3-ДХБ и данных по изомериза-
ции хлорбутенов рассчитаны величины $\Delta H^\circ_{\text{обр}}$ при
298,16° К для 4-ХБ-1, 3-ХБ-1 и 1-ХБ-2: $\Delta H^\circ = -6,9$, $\Delta H^\circ =$
 $= -10,9$, $\Delta H^\circ = -11,8$ ккал/моль, соответственно.

Автореферат

(K_p ; ΔH ; ΔS)
 ΔH_f

Х. 1974 № 19

40819.9091

Ph, Ch, TC

96559

$H_2-C_2H_5Cl$

1974

02-4-5983

Zuczyński Z., Winceł H.

Ion-molecule reactions in ethyl chloride. "Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.", 1974, 14, N 1, 29-44

(англ.)

0173

138-142

ВИНИТИ

CHCl-CH-CH₂-CH₃

1974

15 Б1052. Исследование дегидрохлорирования 1,1-дихлорбутана и изомеризации хлорбутенов. Родова Р. М., Шевцова Л. А., Леванова С. В., Рожнов А. М., Гаркушин И. К. «Изв. высш. учеб. заведений. Химия и хим. технол.», 1974, 17, № 3, 379—381

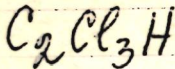
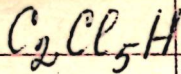
(Kp)

В реакторе проточного типа исследованы равновесия р-ций дегидрохлорирования 1,1-дихлорбутана (I) с образованием цис- и транс-изомеров 1-хлорбутен-1 (II) в т-рном интервале 170—230° на Kт NiCl₂ и BiCl₃. Изучено также равновесие геометрич. изомеризации II в области т-р 150—300° под влиянием УФ-облучения. Т-рные зависимости констант изученных равновесий представлены ур-ниями вида $\lg K_p = A + B/T$, коэф. к-рых для соотв-щих р-ций составили: $I \rightarrow HCl + \Sigma II$ 7,01 и —3244, $I \rightarrow HCl + II$ -цис 6,73 и —3193, $I \rightarrow HCl + II$ -транс 6,75 и —3342, II -транс $\rightarrow II$ -цис —0,02 и 148. Результаты

сопоставлены с лит. данными для изомеризации 1-хлорпропена-1 и дегидрохлорирования 1-хлорбутана.

А. Гузей

X/1974 N15



сравнение
превращ.

(+1) ☒

X 1976 NF

1974

7 Б1032 Д. Влияние строения молекулы на термодинамическое поведение хлорпентафторэтана и хлортрифторэтилена в их конденсированных фазах. Rieger Klaus. Einfluss des Molekülbaus auf das thermodynamische Verhalten von Chlor-Pentafluorathan und Chlor Trifluoräthylen in ihren kondensierten Phasen. Diss. Dokt. Naturwiss. Fak. Math. und Naturwiss. Techn. Univ. Hannover, 1974. 85 S., ill. (нем.)

Методом ДТА и тензиметрии исследовано термодинамич. поведение хлорпентафторэтана (I) и хлортрифторэтилена (II). Показано, что твердофазное превращение I может быть отнесено к ориентац. превращениям. II при т. пл. и разных давл. претерпевает превращение, при к-ром образуются две упорядоченные крист. фазы и две стеклообразные фазы. Св-ва I и II сравниваются со св-вами молекул этана и этилена и обсуждаются в зависимости от строения молекул. По резюме

Дел. N 43

1974

C₆H₁₂Cl₂

Рожков А.М., Черкасова Р.И.
Шаронов К.П.

(Кр, ДМ)

Рукопись деп. ВИННИТИ
N 3347 - 74 Дел.

равновесие
1,4 - 1,5 - дихлоргексанов и телло
ны образ. дихлоралканов

50307.4804

Ch, TC

96559 (ΔH_{solvat}), 1974
 $\text{CH}_3\text{ClH}^+(\text{CH}_3\text{Cl})_n$ * 45-8274

Łuczyński Z., Malicki W., Wincel H. Positive ion reactions of methyl chloride in the gas phase. "Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.", 1974, 15, N 3, 321-332

(англ.)

0316

292 294

ВИНИТИ

50307.4804

Ch, TC

96559

(АН^о содоби), 1974
 $\text{CH}_2\text{Cl}^+(\text{CH}_3\text{Cl})_n$ *4-8274

Zuczyński Z., Malicki W., Wincel H. Positive ion reactions of methyl chloride in the gas phase. "Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.", 1974, 15, N 3, 321-332

(англ.)

0316

292 294

ВИНИТИ

50307.4804

Ch, TC

96556

(ΔH solvat.)

1974

$[H_3CClCH_3]^+(CH_3Cl)_n$ X-8274

Zuczyński Z., Malicki W., Wincel H. Positive ion reactions of methyl chloride in the gas phase. "Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.", 1974, 15, N 3, 321-332

(англ.)

0316

292 294

ВИНИТИ

CH_3Cl

CH_2Cl_2

CHCl_3

CCl_4

S, SH

Den 13/1

1975

Чертков Г.П. и др.

Ген. ден. БУХУТУ

ж. гос. арх.

N 1328-75 Den

$C_5H_{10}Cl_2$

Den N 110

1948

Тепрасово Г.У.

Рук. ден. Блнннн

дс. спус. денн.

N 986 - 45 Den

кр

C₆H₄Cl₂

6 Б806. Термодинамические свойства трех твердых фаз п-дихлорбензола. Dworkin A., Figuière P., Ghelfenstein M., Szwarc H. Thermodynamic properties of the three solid phases of p-dichlorobenzene. «4ème Conf. int. thermodyn. chim., Montpellier, 1975. Vol. 2.» S. 1., s. a., 5—11 (англ.)

1975

(Cp) В интервале т-р 18—322 К в адиабатич. калориметре измерены теплоемкости п-дихлорбензола. Установлено существование трех фаз: I от 304,35 до т. пл. 326,14, II от 271,77 до 304,35, III < 271,77 К. Значения энтальпий (дж/моль) и энтропий (дж/моль·град) плавления и фазовых переходов составили: плавление 18187 и 55,76, переход I ↔ II 214,5 ± 0,9 и 0,705, переход II ↔ III 1256 ± 4 и 4,62. Отмечена близость значений энергий межмолек. взаимодействия во всех фазах. Отношение между энтропией и изменением объема при фазовых переходах подчиняется ур-нию Клапейрона: $\Delta V / \Delta S = dT / dP$. Величина dT / dP (град/Па) имеет след. значения: жидкость ↔ I (2,3—3,1) · 10⁻⁷, I ↔ II — 3 · 10⁻⁸, II ↔ III 3,2 · 10⁻⁷. Соотв. значения $\Delta V / V$ 0,131—0,188; — 2,1 · 10⁻⁴; 1,48 · 10⁻².
Е. Кочетов

X. 1977. 6

50317.1363

Me1, Ch, Ph

31603

1975
Cl₃ CCH₃ / H₁-H₀, Cp, XIV 6232

S, D, H, A, G

Frankiss S.G., Harrison D.J.

Thermodynamic properties of aliphatic
halogen compounds. III. Vibrational
spectra and thermodynamic functions of
1,1,1-trichloroethane.

"Spectrochim. acta", 1975, A31, N1, 29-39
(англ.)

295 298

0322 пик ВИНТИ

1975

12 Б764. Исследование истинной теплоемкости п-хлордифенила в интервале $12-370^\circ \text{K}$. Гейдаров Х. И., Джафаров О. И., Карашарли К. А., Кострюков В. Н. «Ж. физ. химии», 1975, 49, № 2, 493—494

В интервале $12-370^\circ \text{K}$ в вакуумном адиабатич. калориметре с автоматич. системой термостатирования адиабатич. экранов измерена теплоемкость пара-хлордифенила (I) в конденсированных фазах. Теплота и т-ра плавления I составили $\Delta H_{\text{пл}} = 13318 \pm 54$ дж/моль и $T_{\text{пл}} = 348,55 \pm 0,11^\circ \text{K}$. При $298,15$ энтальпия, теплоемкость и энтропия тв. I составили соотв. 36911 ± 109 дж/моль, $243,8$ и $256,90 \pm 0,75$ дж/град·моль.

Автореферат

x. 1975, № 2

C-H-Cl

(Cp, T, g, q)

1975

16 Б843 Деп. Теплоемкость и термодинамические функции β -цианэтилтрихлорсилана в конденсированной фазе. Кострюков В. Н., Саморуков О. П., Саморукова Н. Х., Чаплыгина Е. К. (Редколлегия «Ж. физ. химия» АН СССР). М., 1975. 8с., ил., библиогр. 3 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 10 марта 1975 г., № 586—75 Деп.).

Теплоемкость β -цианэтилтрихлорсилана (I) измерена в интервале от 13,4 до 322,5° К. Определены т-ра и теплота плавления: $307,90 \pm 0,02^\circ \text{К}$ и 5077 ± 12 кал/моль, соотв.; кол-во примесей (по депрессии $T_{\text{пл}}$) равно 0,3 мол.%. По третьему закону вычислена абс. величина энтропии жидк. I при 320° К, равная $78,82 \pm \pm 0,12$ э. е. и табулированы значения термодинамич. функций для интервала 0—320° К. Для $T=298,15^\circ \text{К}$ получено: $C_p=44,49$; $S=58,79$ кал/моль К; $H_T-H_0=8469$ кал/моль. В предположении, что для кристаллов, образованных молекулами с заторможенным внутренним вращением тяжелых и пространственно протяженных волчков, $C_{\text{реш}}$ в первом приближении распределяется на $6+n$ степеней свободы (n —число волчков), теплоемкость I при низких т-рах представлена выражением вида $C_p=C_s=8D(114,5/T)$. Автореферат

1975 N/6

Cl (C₆H₅)₂

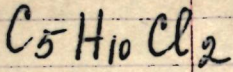
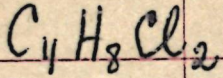
1975

6 E353. Исследование истинной теплоемкости n-хлордифенила в интервале 12—370° К. Гейдаров Х. И., Джафаров О. И., Карашарли К. А., Кострюков В. Н. «Ж. физ. химии», 1975, 49, № 2, 493—494

(Cp) Теплоемкость n-хлордифенила измерена в адиабатическом вакуумном калориметре. Определены термодинамич. ф-ции, найдены теплота плавления и т-ра тройной точки.

CP1975 №6

1975



(P)
(ΔH_v)

X 1975 N 19

19 Б821 Деп. Давление насыщенного пара и теплоты испарения дигалогеналканов. II. 1,2-дихлорбутан, 1,2-, 1,4-, 1,5-дихлорпентан, 1,2-дихлоргексан. Писарев В. В., Рожнов А. М., Варущенко Р. М., Саркисов А. Г. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1975. 8 с., библиотр. 114 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 24 июня 1975 г., № 1881-75 Деп.).

Эбуллиометрическим методом в области 30—700 мм определены т-ры кипения 1,2-дихлорбутана (I), 1,2-дихлорпентана (II), 1,2-дихлоргексана (III), 1,4-дихлорпентана (IV) и 1,5-дихлорпентана (V). Погрешность определения т-ры $\pm 0,01^\circ$, давления 0,1—0,2 мм. Получены ур-ния $\lg P[\text{атм}] = -a/T - b \lg T + c$ (1) и $\Delta H_T(\text{исп. ккал/моль}) = 1,98726 \cdot (2,302585 a - bT) (1 - P_r/T_r^3)^{1/2}$ (2), где P_r и T_r — приведенные давл. и т-ра. Приведены константы a, b, c ур-ний (1) и (2), $T_{н.т.к.} \Delta H(\text{исп. н.т.к. ккал/моль})$ равные соотв. для I: 2757,043; 5,12385; 20,2584; 397,17; 8,15 $\pm$ 0,12; II: 2959,780; 5,17741; 20,6124; 421,44; 8,73 $\pm$ 0,13; III: 3220,072; 5,54991; 20,9296; 445,43; 9,30 $\pm$ 0,14; IV: 3329,776; 6,28700; 24,1620; 442,29; 9,21 $\pm$ 0,14 и V: 3513,043; 6,46052; 24,8806; 456,16; 9,70 $\pm$ 0,15. Автореферат

50324.6054

40891

1975

Ch, TC

Хлороалканы

C-H-Cl

8375

соедин.

Strick G., Sunner S.

Enthalpies of formation of some 1-chloroalkanes and the CH_2 -increment in the 1-chloroalkane series.

"J. Chem. Thermodyn.", 1975, 7, N2, 161-168

(англ.)

0330 пик

296 300

0322

ВИНИТИ

Зак. 8750

1975

11 Б1044. Применение газожидкостной хроматографии для определения термодинамических свойств полихлорбензолов. Запрёметов А. Ю., Янотовский М. Ц., Ерыкалов Ю. Г., Белокурова А. П. «Изв. высш. учеб. заведений. Химия и хим. технол.», 1975, 18, № 11, 1711—1714

Из измеренных методом ГЖХ объемов удерживания на жидких неподвижных фазах разной полярности найдены энтальпии образования газ. полихлорбензолов при т-рах соотв. 298, 373, 500 К. Рассчитаны энтальпии испарения и образования жидк. полихлорбензолов при 423, 473 и 500 К. Полученные величины не зависят от типа применявшихся фаз и эксперим. т-ры. Значения ΔH^0 (обр.) в газ. фазе при 298 К составили: 1,3- $C_6H_4Cl_2$ $6,2 \pm 0,1$; 1,4- $C_6H_4Cl_2$ $5,9 \pm 0,1$; 1,2- $C_6H_4Cl_2$ $7,2 \pm 0,1$; 1,3,5- $C_6H_3Cl_3$ $2,2 \pm 0,1$; 1,2,4- $C_6H_3Cl_3$ $2,4 \pm 0,3$; 1,2,3- $C_6H_3Cl_3$ $3,3 \pm 0,3$; 1,2,4,5- $C_6H_2Cl_4$ $0,1 \pm 0,1$; 1,2,3,5- $C_6H_2Cl_4$ $-0,4 \pm 0,1$; 1,2,3,4- $C_6H_2Cl_4$ 0; C_6Cl_6 $-8,4 \pm 0,2$ ккал/моль. Найденные величины соответствуют лит. данным для газ. полихлорбензолов. Ж. Василенко

x 1976 N11

$C_6H_4Cl_2$ (mb.)

1976

85: 167632z Heat capacities, enthalpies of transition, and thermodynamic properties of the three solid phases of *p*-dichlorobenzene from 20 to 330 K. Dworkin, A.; Figuiere, P.; Ghelfenstein, M.; Szwarc, H. (Lab. Phys. Chim. Rayonnem., Univ. Paris-Sud, Orsay, Fr.). *J. Chem. Thermodyn.* 1976, 8(9), 835-44 (Eng). The heat capacity of *p*-dichlorobenzene [106-46-7] was measured by means of adiabatic calorimetry between 20 and 330°K. Two phase transitions were found at 271.77 and 304.35°K with transition enthalpies of (1256 ± 4) and (214.5 ± 0.9) J mole⁻¹, resp. Melting occurs at 326.155°K with $\Delta H = 18187$ J mole⁻¹. Thermodyn. functions were calcd. from these results. At 298.15°K, the heat capacity at satn. pressure C_s , the entropy S° , and the function $\{G^\circ(T) - H^\circ(0)\}/T$ are 144.76, 174.49, and -88.25 J°K⁻¹ mole⁻¹, resp. The 3rd-law entropy of the gas under std. conditions is (336.54 ± 1.5) J°K⁻¹ mole⁻¹.

measuring
cb-ba

C.A. 1976 85 N 22

$C_6H_4Cl_2$

1976

5 Б811. Теплоемкости, теплоты переходов и термодинамические свойства трех твердых фаз п-дихлорбензола в интервале от 20 до 330 К. Dworkin A., Figuerie P., Ghelfenstein M., Szwarc H. Heat capacities, enthalpies of transition, and thermodynamic properties of the three solid phases of p-dichlorobenzene from 20 to 330 K. «J. Chem. Thermodyn.», 1976, 8, № 9, 835—844 (англ.)

$C_p, T_{tr}, \Delta H_{tr}$

В низкот-рном адиабатич. калориметре в интервале т-р 20—330 К измерена теплоемкость п-дихлорбензола (I). Наблюдались три крист. фазы. Низкот-рная фаза стабильна ниже 271,77 К. Теплота перехода при этой т-ре равна 1256 ± 4 дж/моль. Переход от α -фазы к β -фазе происходит при 304,35 К с теплотой $214,5 \pm \pm 0,9$ дж/моль. Обнаружено, что низкот-рная фаза до-

х. 1977 N 5

пускает перегрев. Плавление происходит при 326,155 К, теплота плавления $\Delta H = 18\,187$ дж/моль. На основании полученных результатов в интервале 20—330 К рассчитаны и табулированы значения термодинамич. функций I. При 298,15 К значения теплоемкости при давл. насыщения, энтропии и $\{G^\circ(T) - H_0^\circ(0)\}/T$ равны 144,76; 174,49 и $-88,25$ дж/град·моль соотв., а энтальпии $H^\circ - H_0^\circ$ равна 25 712 дж/моль. Энтропия газ. I при станд. условиях, рассчитанная по 3-му закону, равна $336,54 \pm \pm 1,5$ дж/град·моль. Обсуждены крист. структура и энергии крист. решеток I.

В. Ф. Байбуз

C_6H_5Cl

1976

20 Б773. Применение газо-жидкостной хроматографии для определения термодинамических свойств полихлорбензолов. Ерыкалов Ю. Г., *Запрометов А. Ю., Янотовский М. Ц. «Изв. высш. учеб. заведений. Химия и хим. технол.», 1976, 19, № 5, 691—695

(C_p) Сравнительным методом с использованием данных ГЖХ вычислены изменения теплоемкости (ΔC_p) в р-циях монохлорбензол $\rightarrow$ полихлорбензол и теплоемкость (C_p) соотв-щих полихлорбензолов при 400° К. Даны т-рные зависимости теплоемкости три- и тетрахлорбензолов в интервале 298—500° К и рассчитаны станд. энтропии этих соединений при 473 и 500° К. Вычислены термодинамич. функции (энтальпия, энтропия испарения, энтропия жидк. и газ. в-в) изомерных ди-, три- и тетрахлорбензолов при 423, 473 и 500° К соотв. Рассчитаны энергии Гиббса и константы равновесия взаимных превращений изомерных ди- и трихлорбензолов.

П. М. Чукуров

X, 1976, N 20.

60409.7578

Ch, Ex-C, TC

40771

 ΔH_f° (HClly)

1976

4189

Lam S.Y., Louis C., Benoit R.L.

Thermodynamic study of hydrogen bonding
to chloride ions. "J. Amer. Chem. Soc.",
1976, 98, N 5, 1156-1160 (англ.)

0588 2111

575 575

580

ВИНИТИ

6III5.9678

X

00787

ВЗССН2Сс/а.нр)

1976
XIV-7856

Лицофазное дегидрохлорирование
несимметричного тетрахлорэтана. Леванова
С.В., Бушневa Л.И., Родовa Р.М., Рожнов
А.М., Трегер Ю.А.

"Х. физ. химии", 1976, 50, № 10, 2701-2702

0744 ЛМК

М

727 73I 7 3 6

реф ВИНТИ

$C_3H_6Cl_2$

Den N 125

1976

$C_4H_8Cl_2$

Леванова С.В. и др.

Рук. деп. ВНИИТМ

кр.

от. гос. зап.

N 469-76 деп

C_2Cl_5H

ΔH_{cr} , ΔH_{ac} .

Miskiewicz Stefan

1976

Ber. Bunsenges Phys.
Chem 1976, 80(5) 395-405

(Ger)

(see C_2H_2 ; I)

1976

C₄H₈Cl₂

3 Б792 Деп. Давление насыщенного пара и теплоты испарения дигалогеналканов. III. 1,1- и 2,2-дихлорбутаны. Писарев В. В., Рожнов А. М., Саркисов А. Г. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1976. 22 с., ил., библиогр. 22 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 20 окт. 1976 г., № 3719—76Деп.).

Эбуллиометрическим методом определены т. кип. 1,1-дихлорбутана (I) и 2,2-дихлорбутана (II) в области давл. 30—700 мм. Погрешности определения т-ры и давл. $\pm 0,01^\circ\text{C}$ и 0,1—0,2 мм (p — T)-данные аппроксимировали зависимостью $\Delta G_T^\circ = \Delta H_T^\circ - T\Delta S_T^\circ$ в приближении $\Delta C_p^\circ = g + hT$. Получены ур-ния: $\lg p[\text{атм}] = a + b/T + c \lg T + dT$, (1), $\Delta H_{\text{исп.}, T}[\text{кал/моль}] = R/[2,302585(dT^2 - b) + cT](1 - p_r/T_r^3)^{1/2}$, (2), $\Delta C_p^\circ, T[\text{кал/град} \cdot \text{моль}] = R(4,60517 dT + C)$, (3), где $R = 1,98717$ кал/град·моль, p_r и T_r — приведенные давл. и т-ра. Ниже для I и II даны константы, a, b, c, d ур-ний (1) — (3) и величины $\Delta H_{\text{исп.}, 298}$, ккал/моль. Соединение I a 41,49160, $-b$ 3338,267, $-c$ 13,50167, $d \cdot 10^2$ 0,530810, $\Delta H_{\text{исп.}, -298}$ $9,41 \pm 0,15$; II 45,56127; 3333,028; 15,16016; 0,624212; $8,76 \pm 0,14$. Сообщ. II см. РЖХим, 1975, 19Б821. Автореферат

(T_m)

X, 1977, №3

$C_7H_{14}Cl_2$

Den 159

1975

Есепінок Т.Е. 2 гр

Дук. ден. BLH/LITLI

ЖС. Жу. хм.

N 2386-75 ден

КР

$C_4H_8Cl_2$

$C_5H_{10}Cl_2$

$C_6H_{12}Cl_2$

p. 141

Den. n. 76

1975

Иванов Р. Р. и др.

Пух. ден. БИЛЕТЫ
и др. изд. 1975.

№ 1881-75 Ден

$C_4H_8Cl_2$

Ден N109

1975

Матюнов К.Т. и др.

кр
Дуп. ден. ВКМММ
дс. гпу. дссс.

N 984 - 75 ден

C-H-Cl

C-H-Br

(p)

2 Б843. Давление насыщенного пара и энтальпии испарения некоторых дигалогеналканов. Писарев В. В., Варущенко Р. М., Рожнов А. М., Саркисов А. Г. В сб. «II Всес. конф. по термодинамике органич. соедин., Горький, 1976. Тезисы докл.» Б. м., 1976, 53—54

Эбулиометрическим методом в интервале давл. 30—700 мм определены т. кип. 1,3- и 1,4-дихлорбутанов, 1,3-дибромбутана и 1,3-дибромпропана. $P-T$ -данные аппроксимировали зависимостью $\Delta G_T = \Delta H_T - T\Delta S_T$ в приближении $\Delta C_p = g + hT$. В результате обработки данных МНК с использованием ортогональных ф-ций получены ур-ния: $\lg P(\text{атм}) = -a/T - b \lg T + cT + d$; $\Delta H_{\text{исп. } T} [\text{кал/моль}] = R[2,302585(a + cT^2) - bT] \cdot (1 - P_r/T_r^3)^{1/2}$; $\Delta C_p T [\text{кал/моль} \cdot \text{град}] = R(4,60517 cT - b)$, где P_r и T_r — приведенные давл. и т-ра. Значения энтальпии испарения $[\Delta H_v(298)]$ для 1,4-дихлорбутана

и 1,3-дибромпропана в пределах погрешностей совпали с калориметрич. данными, соотв., $11,08 \pm 0,01$ и $11,34 \pm 0,01$ ккал/моль.

Резюме

X1977W2

1976

DMF.HCl

DMF.HF

1976

DMF - guaranteed good quality.

Tb, Tm

87: 141961x Solubility of light metals in dimethylformamide adducts of hydrogen chloride or hydrogen fluoride.. Yoshimura, Chozo; Utsumi, Shigenori (Kinki Univ., Fuse, Japan). *Aruminyumu Kenkyu Kaishi* 1976, 103, 103-4 (Japan). Solid DMF.HCl (m. 18, b. 51°), DMF.HF (m. 106, b. 125°), and a 1:1 DMF.HCl + DMF.HF mixt. (m. 106, b. 110°) are useful solvents for Al, Mg, Sn, and their alloys, esp. since misting did not occur during dissoln. DMF.HCl was obtained by passing dry HCl through dry DMF (b. 153°), filtering off the white crystals formed, and washing with Et₂O. DMF.HF was prepd. by passing HF generated by heating aq. HF and drying the gas formed with concd. H₂SO₄. Al 1100 was dissolved by heating with an excess of 1:1 DMF.HF + DMF.HCl; the soln. was then dild. with DMF and titrated conductometrically with EDTA. The dissoln. occurs via direct reaction of the solid adduct with the metal to yield a DMF adduct of the metal halide and H₂ gas.

C. A. 1977, 87 N 18

Критические константы C-H-Cl (соединения)

1977

✓) 2 Б924 Деп. Критические константы хлоруглеводородов. Фельдман И. Н., Кравецкий Л. И., Потапова С. А. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1977. 8 с., библиогр. 6 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 5 окт. 1977 г., № 3910—77 Деп.)

Выполнена оценка погрешности расчета крит. свойств хлоруглеводородов различными эмпирич. методами, описанными в лит-ре. Результаты, полученные при обработке массива данных для 37 соединений, позволяют рекомендовать след. методы для инженерных расчетов: $P_{кр}$ — Риделя, $T_{кр}$ и $V_{кр}$ — Воулеса, $Z_{кр}$ — по уравнению $Z_{кр} = P_{кр} V_{кр} / RT_{кр}$. Погрешность расчета (мин., макс., среднее, %): $P_{кр}$ 0,12; 7,97; 3,03, $T_{кр}$ 0,03; 1,90; 0,56, $V_{кр}$ 0; 18,5; 3,96, $Z_{кр}$ 0,03; 7,1; 4,2. Автореферат

д. 1978, № 2

C-H-Ce

1974

24 Б853 Деп. Дегидрохлорирование 1,1-дихлор-3-метилбутана и геометрическая изомеризация хлорметилбу-
тенов. Мегедь В. М., Леванова С. В., Шевцо-
ва Л. А., Рожнов А. М. (Редколлегия «Ж. физ. хи-
мии» АН СССР). М., 1977. 5 с., библиогр. 6 назв. (Ру-
копись деп. в ВИНТИ 29 авг. 1977 г., № 3498—77 Деп.)

Изучено равновесие р-ций дегидрохлорирования 1,1-
дихлор-3-метилбутана и цис-, транс-изомеризации 1-хлор-
3-метилбутена-1. На основании полученных данных вы-
ведены ур-ния логарифмич. зависимости констант рав-
новесия от т-ры и определены термодинамич. характе-
ния моно- и дихлоралканов C_3-C_5 . _____ Автореферат

(Кр)

И. 1974 № 24

cmcl⁺

1977

Rosenstock H. M. et al

J. Phys. Chem. Ref. Data,
1977, 6. Suppl. N1, p 1-461

T. G.

ebba

1977

CaMce +2

Rosenstock M. M. et al

J. Phys. Chem. Ref. Data,
1977, 6. suppl. n1, p 1-46.2

T. g.
Cbba

1977

Ca HCl^+

Rosenstock H. M. et al

J. Phys. Chem. Ref. Data,
1974, 6. Suppl. v1, p 1-46a

T. g.
cb-ba

1977

$C_3H_3Cl^+$

$C_3H_3Cl^+$ Rosenstock M. M. et al

J. Phys. Chem. Ref. Data,
1977, 6. Suppl. N1, p 1-463,
1-466

T. G.
CBBa

1977

CMe_2^+

Rosenstock H. M. et al

J. Phys. Chem. Ref. Data,
1977, 6. Suppl. v1, p 1-466

T.g.
cvba

$\text{CaH}_2 \text{Cl}^+$

1977

Rosenstock H. H. et al

J. Phys. Chem. Ref. Data,

1977, 6. Suppl. v1, p1-462

T. J.
cb-ba

1977

$C_3H_4Cl_2^+$

$C_xH_yCl_z^+$

Rosenstock M. M. et al

J. Phys. Chem. Ref. Data,

1977, 6. Suppl. Vol. 1, p 1-467

T. G.

CB 6a

C-H-Cl

C₅-H₁₀Cl₂

(ΔH_f)

24 Б852 Деп. Дегидрохлорирование 2,2-дихлорпентана. Шишинова В. И., Леванова С. В., Шевцова Л. А., Рожнов А. М., Токаревский В. А. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1977. 5 с., библиогр. 7 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 29 авг. 1977 г., № 3496—77 Деп.)

Экспериментально исследовано дегидрохлорирование 2,2-дихлорпентана в газовой фазе. Рассчитаны термодинамич. характеристики изученной р-ции. С использованием полученных данных рассчитаны стандартные энтальпии образования нек-рых хлорпентенов. Проведено сравнение тепловых эффектов р-ций дегидрохлорирования моно- и дихлоралканов C₃—C₅. Автореферат

1977

Л. 1977 N 24

C₂HCl₅

1977

Яковлев А. и др.

(T_m)

М. обл. Химии, 1977,
47, №1, 184-7.



(св. CCl₄; I)



1978

13 Б792. Термодинамические свойства алифатических галоидзамещенных соединений. 4. Энтальпия сгорания 1,1,1,2-тетрахлорэтана. Gundry H. A., Head A. J. Thermodynamic properties of aliphatic halogen compounds. 4. The enthalpy of combustion of 1,1,1,2-tetrachloroethane. «J. Chem. Thermodyn.», 1978, 10, № 2, 195—200 (англ.)

В калориметре с вращающейся бомбой для энтальпии сгорания 1,1,1,2-тетрахлорэтана (I) по р-ции $I(\text{жидк.}) + 1,5 O_2(\text{газ.}) + H_2O(\text{жидк.}) = 2 CO_2(\text{газ.}) + 4 HCl(600 H_2O)$ получено $-973,90 \pm 1,28$ кдж/моль. Станд. энтальпия образования жидк. I составила $-193,45 \pm 1,35$ кдж/моль. С использованием оценочного значения ΔH (исп., 298,15 K) $= 41,1 \pm 0,2$ кдж/моль найдено $\Delta H(\text{обр., газ. I}) = -152,35 \pm 1,4$ кдж/моль. Сравнение с данными для этана и др. хлорэтанов показало, что в энергетике этих соединений очень большую роль играют стерич. и(или) диполь-дипольные взаимодействия, что обуславливает переменность инкремента $\Delta\Delta H(\text{обр.})$. С использованием лит. данных вычислено $\Delta G(\text{обр., I, газ., 298,15 K}) = -83,1$ кдж/моль. А. Б. Кисилевский

$\Delta H_{\text{сгор.}}$; ΔH_f
 ΔG_f

ж. 1978
№ 13

$\text{CH}_4\text{-Cl}_2$

1978

J 90: 77269k Precise method for computing chemical equilibriums and its realization on a small computer. Mindin, V. Yu. (Gruz. Politekh. Inst., Tiflis, USSR). *Izv. Akad. Nauk Gruz. SSR, Ser. Khim.* 1978, 4(3), 279-82 (Russ). A free energy minimization method for precise chem. equil. calens. is described for use on the Nairi-type computer. The method is illustrated for the $\text{CH}_4\text{-Cl}_2$ system at 600 K.

Минин.
патентное

C.A. 1979, 99, N10

$C_{10}H_7X$,
(743)

т.г. сб-вг

ж. 1978, № 20

$X = F, Cl, Br, J$

1978

20 Б818. Термодинамические функции α -галогено-нафталинов в области давлений от 0,25 до 16 атм. McFee D. C., Lielmezs J. Thermodynamic functions of α -halonaphthalenes from 0,25 to 16 atmospheres. «Thermochim. acta», 1978, 24, № 1, 39—54 (англ.)

С использованием лит. данных по термодинамич. функциям галогенонафталинов в состоянии идеального газа в интервале 273—1200 К вычислены термодинамич. функции α -галогенонафталинов $C_{10}H_7X$, где $X = F, Cl, Br, J$ (I—IV соотв.) в реальном газ. состоянии. При коррекции использовано ур-ние состояния Бертло. При давл. 0,25, 0,50, 1,00, 2,00, 4,00, 8,00 и 16,00 атм и т-рах 273—1200 К табулированы значения C_p , $(H-H_0)/T$, $-(G-H_0)/T$ и S кал/моль·град. При 16 атм и 298,15 К они составили соотв.: I 67,58, 2,51, 68,14 и 70,65; II 79,73, -1,99, 71,92 и 69,93; III 80,92, -1,62, 74,38 и 72,76; IV 88,89, -4,98, 77,49 и 72,52. Т-рные зависимости термодинамич. функций аппроксимированы ур-ниями $\Lambda = a + bT + cT^2 + dT^3 + eT^4$, коэф. к-рых табулированы при всех указанных давл. Обсуждается правомочность использованных корреляций и точность полученных результатов.

А. Б. Кисилевский

Hell ommea 6574 1978

Li Wai-Kee, et al.

(ΔHf) Chem. Phys. Lett., 1978,

57 (2), 211-213

MISO/3. Study of substituted
methylenes ● CCl_2 , HCl,
 CH_3Cl .

C-Cl-H
реакция

1949

13 Б837. О хлорировании перхлорэтилена. Бушнев Л. И., Леванова С. В., Родова Р. М., Рожнов А. М., Трегер Ю. А., Попов В. С. «Ж. прикл. химии», 1979, 52, № 2, 445—447

Изучена кинетика хлорирования перхлорэтилена (I) до гексахлорэтана (II) и четыреххлористого углерода (III) в реакторе проточного типа. В кач-ве функции отклика выбран суммарный выход продуктов хлорирования $\Sigma II + III$, к-рые получались по р-циям: $I + Cl_2 \rightarrow II$.

термодинамика

оль
и

2.1979, N/3

(1) $I+2Cl \rightarrow 2II$, $II+Cl_2 \rightarrow 2III$. После обработки результатов эксперимента по ф-лам регрессионного анализа получено ур-ние, к-рое в натуральном виде выглядит след. образом: $y = -17,5 + 0,540t + 13,5000n + +0,9600\tau - 0,0013\tau t$. Выход продуктов хлорирования зависит от всех трех параметров: t , n , τ , однако удельный вклад каждого из них разный. Самым реактивным фактором является молярное отношение n ; при одних и тех же τ и t в зависимости от n можно получить $\Sigma II+III$ от 4 до 30 мол.%. Время контакта τ оказывает значительное влияние на выход продуктов хлорирования при низкой т-ре (в кинетич. области), так при 150° за $\tau=35$ сек. получен такой же выход как, при 600 , при $t > 500^\circ$ τ практически не влияет на выход продуктов, что свидетельствует о том, что в этих условиях система находится под воздействием термодинамич. факторов и приближается к равновесию. Т-ра является позитивным фактором при любом n и τ , характер воздействия t меняется в зависимости от τ (при $\tau \rightarrow 0$ t влияет в большей степени). Подобраны условия для равновесия р-ции (1) ($t=600^\circ$, $\tau \geq 4$ сек., или $t=500-550$, Кт $CuCl_2/C$). Рассчитаны константы равновесия (т-ра $500-600^\circ$) и термодинамич. параметры р-ции (1): $\Delta H_T^\circ = -31,20 \pm 0,45$ ккал/моль, $\Delta H_{f298,16}^\circ (1) = -35,8$ ккал/моль, $-\Delta S_T^\circ = 35,80 \pm 1,2$ э. е. П. И. Валов

$C_2H_4Cl^+$

Оттиск 7697

1979

стабиль-
ность

Berman L. W., et al.

ΔH_f

J. Amer. Chem. Soc.,
1979, 101(5), 1239-48

$C_2 H_x X_y$
 $X = \text{галоген}$

(ΔH_f)

1979
2 Б852. Энтальпии образования хлорпроизводных этана и этилена. Бушнева Л. И., Леванова С. В., Родова Р. М., Рожнов А. М. «8-я Всес. конф. по калориметрии и хим. термодинам, Иваново, 1979. Тез. докл. I—НОР». Иваново, 1979, 107

Экспериментальные данные по равновесию р-ций дегидрохлорирования и изомеризации хлорэтанов и хлорированию хлорэтиленов (всего 12 р-ций), полученные в широком т-рном интервале, позволили рассчитать энтальпии образования хлорпр-ных C_2 (всего 14 соединений) в жидк. и газовой фазах. Для оценки полученных значений привлекались корреляц. методы, отражающие зависимость св-в в-ва от его строения. Резюме

2-1980. NR

HCCL

smmcc 8628

1979

(ΔHf)

Dewar M. J. J., et al.
J. Chem. Soc. Faraday
Trans. II, 1979, 75 (6)

829-40

$C_6H_5^+$

АНФ



2.19.49, N21

21 Б121. Влияние энергетики реакций на масс-спектры химической ионизации производных галогенбензолов. Оценки теплот образования замещенных фенил-катионов. Leung Hei-Wun, Harrison Alex. G. Effect of reaction energetics on the hydrogen chemical ionization mass spectra of halobenzene derivatives. Estimates of the heats of formation of substituted phenyl cations. «J. Amer. Chem. Soc.», 1979, 101, № 12, 3168—3173 (англ.)

Изучение масс-спектров хим. ионизации (с газом-реагентом H_2) пр-ных галогенобензолов XC_6H_4L ($X=F, Cl, Br$; $Y=NH_2, OCH_3, F, Cl, Br$), изомеров дихлоранилина и N,N-диметиланилинов показало, что в результате распада протонированных молекул NH^+ указанных соединений образуются $YC_6H_5^+ + X$ либо $YC_6H_4^+ + HX$. В нек-рых случаях $YC_6H_4^+$ вступает в р-цию с H_2 . Образование необычных для хим. ионизации продуктов с нечетным числом электронов $YC_6H_5^+ + X\cdot$ объяснено большей термохим. стабильностью $YC_6H_5^+$ по сравнению с $YC_6H_4^+$. Из данных о распаде ионов NH^+ получены оценки теплот образования ΔH_f° замещенных фенилкатионов: для $H_3CC_6H_4^+$, $H_2NC_6H_4^+$, $CH_3OC_6H_4^+$, $FC_6H_4^+$, $ClC_6H_4^+$ и $BrC_6H_4^+$ ΔH_f° равно соотв. 253, 253, 225, 227, 264 и 275 ккал/моль с точностью (± 4 ккал/моль).
Е. Николаев

19.49

$C_4H_8Cl_2$

1979

Д 3 Б769. Энтальпии и энтропии испарения дигалоген-
алканов. Варущенко Р. М., Писарев В. В., Мед-
ведев В. А. «8-я Всес. конф. по калориметрии и хим.
термодинам.», Иваново, 1979. Тез. докл. I—НОР», Ива-
ново, 1979, 114

Калориметрическим методом определены энтальпии
испарения 1,2-дихлор(-бутана, -пентана и -гексана),
1,5-дихлорпентана и 1,2-дибромпропана при 25° с точ-
ностью 0,2—0,4%. Данные согласуются с значениями
 $\Delta H_{\text{исп}}$, полученными авторами ранее из прецизионных
 P — T -зависимостей. Термодинамич. параметры процесса
испарения ΔH и ΔS зависят от положения заместителей
в ряду дигалогеналканов. Возрастание энтальпий и эн-
тропий испарения при переходе от 1,2- к 1,4- и 1,5-ди-
галогеналканам, согласующееся с увеличением диполь-
ных моментов, вызвано возрастанием полярной состав-
ляющей межмолек. взаимодействий в жидк. фазе и, сле-
довательно, увеличением внутренней упорядоченности
жидкостей. Увеличение $\Delta H_{\text{исп}}$ и $\Delta S_{\text{исп}}$ в ряду 1,2-ди-
хлор-н-алканов C_4 — C_6 связано с усилением дисперсион-
ных взаимодействий.

Резюме

ΔH_v , ΔS_v

X-1980.113

$\text{CHCl}_2 \text{ CHCl}_2$

1979

$\text{CF}_2 \text{ BrCF}_2 \text{ Br}$ Мосен Д. Ю. и др.

ср. 8

8 Всесоюзная конференция по
химической термодинамике.

25-27 сентября 1979г. г. Ива-
ново. Тезисы докладов. стр. 351

$C_{11}H_{15}Cl$

Chi haza H. udr. | 1980

Bull. Chem. Th.
N23, p. 363

C_p

3-300K

ΔH_{t2}

1980

 $C_2H_5C_6H_4Cl$

15 Б862 Деп. Энтальпии образования этилхлорбензолов. Ковзель Е. Н., Нестерова Т. Н., Рожнов А. М. Куйбышев. политехн. ин-т. Куйбышев, 1980. 6 с., ил., библиогр. 4 назв. (Рукопись деп. в ОНИИТЭхим г. Черкассы 15 апр. 1980 г., № 371хп—Д80 Деп.)

(ΔH)

Исследовано равновесие р-ций изомеризации этилхлорбензолов (ЭХБ) в жидк. фазе в присутствии катализаторного комплекса на основе $AlCl_3$ в кол-ве 5—10 вес.%, в расчете на исходную смесь, в т-рном интервале 0—100°. Для р-ции пара-ЭХБ $\rightleftharpoons$ мета-ЭХБ (1): $\lg K_N = = 47,1/T + 0,272$ и для — орто-ЭХБ $\rightleftharpoons$ пара-ЭХБ (2): $\lg K_N = 67,4/T - 0,308$. Вычислены энтальпии и энтропии р-ций (1) и (2), равные соотв. $\Delta H_T^\circ = -0,21 \pm 0,20$ и $\Delta S_T^\circ = 1,24 \pm 0,62$; $\Delta H_T^\circ = -0,31 \pm 0,32$ ккал/моль и $\Delta S_T^\circ = -1,41 \pm 0,82$ э. е. Рассчитаны величины станд. энтальпий образования ΔH° обр., 298 ккал(моль) и энтропий S° 298 э. е. этилхлорбензолов в жидк. фазе: для орто-ЭХБ ($-11,60 \pm 0,38$) и ($67,55 \pm 1,03$); пара-ЭХБ ($-11,91 \pm 0,20$) и ($66,16 \pm 0,62$); мета-ЭХБ ($-12,12$) и ($67,40$).
Автореферат

X 1980 N 15

$\text{CHCl}_2\text{CHCl}_2$ [оттиски 10206] 1980
Majer V., et al.

(ΔH°) J. Chem. Thermodyn.,
1980, 12, 843-47

• см. CH_2Cl_2 , I

CH_3SiH^+

1981

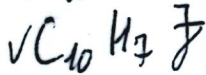
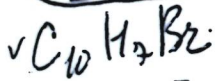
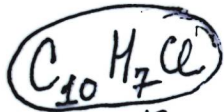
1 Б969. Устойчивость алкилхлорониевых ионов простых хлоралканов в масс-спектрометре с химической ионизацией ионом H_3^+ . Colosimo M., Bucci R. The stability of alkylchloronium ions during H_3^+ -CIMS of simple chloroalkanes. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1981, 39, № 2, 145—149 (англ.)

В масс-спектрометре с хим. ионизацией ионом H_3^+ : $\text{H}_3^+ + \text{RCl} \rightarrow (\text{RClH})^+ + (\text{R} = \text{Me}, \text{Et}, \text{n- и изо-Pr}, \text{n-, втор-, изо- и трет-Bu})$ при т-ре в ионизац. камере 180°C и давл. H_2 1 мм по интенсивностям пиков $(\text{M}+1)^+$, $(\text{M}-1)^+$ и R^+ , где M — молек. вес RCl , определена устойчивость алкилхлорониевых ионов (АХИ) $(\text{RClH})^+$. Сделан вывод, что при эксперим. условиях MeCl дает долгоживущий АХИ, из EtCl и 1- и 2- ClPr образуются малоустойчивые АХИ, АХИ хлорбутанов очень нестабильны. Это заключение согласуется с теор. предсказаниями. С использованием лит. величин сродства к протону радикала Me 160 или 158 ккал/моль для $-\Delta H$ р-ции $\text{H}_3^+ + \text{MeCl} \rightarrow \text{MeClH}^+ + \text{H}_2$ получено 59 или 57 ккал/моль соотв., для $-\Delta H$ р-ции $\text{MeClH}^+ \rightarrow \text{Me}^+ + \text{HCl}$ 9,8 или 7,8 ккал/моль. Р. Г. Сагитов

ΔH

X.1982, 1946, N1.

1981



термодинам.

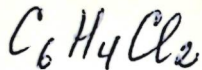
+2

X, 1982, 19, 15

5 Б917. Термодинамические исследования при плавлении некоторых α - и β -галогенпроизводных нафталина. Khanna M. S., Khetarpal S. C., Lal Krishan, Bhatnagar Hari L. Thermodynamic studies on melting of some α - & β -halogen derivatives of naphthalene. «Indian. J. Chem.», 1981, A20, № 6, 544—546 (англ.)

Определены t -ры и энтальпии плавления, коэф. объемного расширения тв. и жидк. фаз (α_s и α_l соотв.) и плотности при т. пл. нек-рых α - и β -галогенпр-ных нафталина. Из этих данных вычислены мол. объемы V при т. пл., изменение т. пл. с давлением и коэф. сжимаемости тв. соединений. Величины т. пл., ΔH_m , $\alpha_s \cdot 10^4$, $\alpha_l \cdot 10^4$, V_s и V_l составили соотв.: α -хлор- 270,7 К, 12,90 кДж/моль, 4,5 К⁻¹ (260—266 К), 8,9 К⁻¹ (273—293), 121,99 и 132,36 мл, α -бром- 275, 15,16, 3,8 (260—266), 10,6 (280—286), 124,52 и 136,60, α -йод- 280, 15,91, 3,8 (267,5—275), 8,5 (287—298), 131,84 и 143,97, β -хлор- 332, 14,70, 4,8 (305—325), 9,9 (334—344), 130,31 и 139,43, β -бром- 332, 11,97, 8,7 (302—329), 11,9 (334—343), 134,83 и 142,51, β -йоднафталин 327,5; 16,04; 3,2 (312—321), 7,2 (332—344), 139,60 и 150,35.

Р. Г. Сагитов

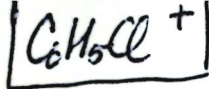
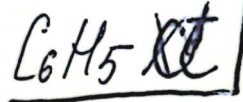


1981

Ttr

94: 215498v A sensitive inexpensive DTA system. Koga, Yoshikata (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 1Y6). *J. Phys. E* 1981, 14(3), 297-8 (Eng). The DTA system described has a signal-to-noise ratio 10 times higher than that of a com. model. The app. was used to study the polymorphic transition between the α and β phases of sublimed p - $C_6H_4Cl_2$ [106-46-7].

P.A. 1981.94 N 26



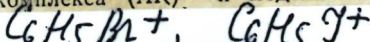
1981



X. 1982, 19, N 7.

7 Б1497. Фотоионизационное исследование кинетики мономолекулярного разложения галоидбензольных ионов. Pratt S. T., Chupka W. A. Photoionization study of the kinetics of unimolecular decomposition of halobenzene ions. «Chem. Phys.», 1981, 62, № 1—2, 153—163 (англ.)

Методом масс-спектрометрии изучена кинетика молекул. распада в газовой фазе ионов $C_6H_5X^+$ ($X = Cl, Br, I$) с отщеплением атомов X при фотоионизации молекул C_6H_5X монохроматич. светом с различными длинами волн. Установлено, что средняя кинетич. энергия, освобождаемая при диссоциации $C_6H_5X^+$ с образованием атомов $Cl, ^{79}Br, ^{81}Br, I$ равна $(0,055 \pm 0,02), (0,042 \pm 0,02), (0,048 \pm 0,02), (0,036 \pm 0,015)$ эВ соотв. Измерены абс. скорости отщепления X как функции внутренней энергии $C_6H_5X^+$ и кинетич. энергии, освобождаемой при этом. Эксперим. данные сопоставлены с расчетными данными для модели рыхлого активированного комплекса (АК) и модели жесткого АК.



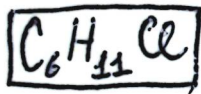
В случае $X=J$, Вг обе модели дают результаты, согласующиеся с экспериментом. Однако теплота образования иона $C_6H_5X^+$ $\Delta H_0=274\pm 1$ ккал/моль в случае модели рыхлого АК и $\Delta H_0=271\pm 1$ ккал/моль в случае модели жесткого АК. Для $X=Cl$ результаты расчета согласуются с экспериментом только для модели жесткого АК. Неприменимость модели рыхлого АК в этом случае связывается с дальнедействующим взаимодействием нон-индуцированный диполь и крит. радиусом рыхлого АК, равным при $X=Cl$ 7,24 А, тогда как этот радиус равен 8,24 и 9,66А при $X=Вг$ и J соответственно.

Ю. И. Дорофеев

C-H-Ce соедин.

1981

хлорцикло-
гексан



термод.
ф-ше

5 Б253. Определение разности энтропий конформаций по ИК спектрам поглощения. Фишман А. И., Ремизов А. Б., Столов А. А. «Докл. АН СССР», 1981, 260, № 3, 683—686

Предложен способ определения разности энтропий ΔS_0 двух конформаций молекул по ИК-спектрам поглощения, учитывающий т-рные изменения интегральных коэф. поглощения. Проведено исследование т-рной зависимости интенсивностей ИК-полос поглощения а- и е-конформаций хлорциклогексана (т-рный интервал 100—230 К, р-р в пропане, $C \approx 0,03$ моль/л при $T = 230$ К). Определены разности энтальпий $\Delta H_0 = 480 \pm \pm 50$ кал/моль и энтропии $\Delta S_0 = -0,1 \pm 0,8$ кал/(моль·К).
Автореферат

Х. 1982, 19, №5.

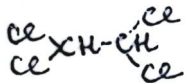
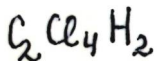
C₆H₅Cl

1982

/ 97: 28918g Second virial coefficient and viscosity coefficient of chlorobenzene vapor and its description using statements for intermolecular potential. Ahlmeyer, Edith; Bich, Eckard; Opel, Guenther; Schulze, P.; Vogel, Eckhard (Sekt. Chem., Wilhelm-Pieck-Univ., DDR-2500 Rostock, Ger. Dem. Rep.). Z. Phys. Chem. (Leipzig) 1982, 263(3), 519-28 (Ger). The 2nd virial coeff. (B) of PhCl was detd. at 439-625 K by pressure measurements (74-207 kPa) at const. vol. The viscosity coeff. (η) was measured at 318-630 K and 4.7-10.7 kPa. Lennard-Jones ($m-n$) and ($m-6-8$) potentials were used to describe $B(T)$ and $\eta(T)$.

2-й этап
анализа
коэффициентов.

C.A. 1982, 97, N4



1982

23 Б856. Теплоемкость, термодинамические функции и полиморфизм 1,1,2,2-тетрахлорэтана в интервале 8—300 К. Косарукина Е. А., Колесов В. П., Курамшина Г. М., Пентин Ю. А. «Термодинам. орган. соедин.» Горький, 1982, 11—17

Теплоемкость C_p 1,1,2,2-тетрахлорэтана измерена в вакуумном адиабатич. калориметре в интервале 8—300 К. Обнаружено, что двум воспроизводимым кривым плавления $T_l—1/F_l$ соответствуют две воспроизводимые кривые $C_p—T$ в области предплавления, на каждой из к-рых имеется переход λ -типа. Из анализа эксперим. и лит. данных сделан вывод, что полученные кривые $C_p—T_l$ и $T_l—1/F_l$ относятся к двум модификациям. Определены след. термодинамич. функции для модификаций I и II: ΔH_m (I) = 9172 ± 25 Дж/моль; ΔS_m (I) = $39,79 \pm 0,12$ Дж/моль·К; T_m° (I) = $230,8 \pm 0,1$ К; ΔH_m (II) = 9521 ± 74 Дж/моль; ΔS_m (II) = $41,54 \pm 0,38$ Дж/моль·К; T_m° (II) = $230,3 \pm 0,5$ К. Рассчитаны и

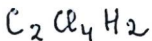
$C_p, T_m, \Delta H_m$

X. 1983, 19, ~ 23

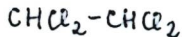
табулированы в интервале 0—300 К значения $C_p \cdot [H^\circ(T) - H^\circ(0)]/T$, $S^\circ(T) - S^\circ(0)$ и $[G^\circ(T) - H^\circ(0)]/T$; при 298,15 К они соотв. равны, $165,4 \pm 0,2$; $127,5 \pm 0,4$; $244,3 \pm 0,7$; $116,8 \pm 1,1$ для модификации I и $165,4 \pm 0,2$; $129,4 \pm 0,5$; $247,0 \pm 0,9$ и $117,6 \pm 1,4$ Дж/моль·К для модификации II. Модификация I является более упорядоченной. На основании анализа термодинамич. функций и изучения ИК-спектров в области λ -перехода показано, что обнаруженный переход не связан ни с вращением молекул в крист. решетке $\text{CHCl}_2\text{CHCl}_2$, ни с внутримолек. вращением.

Автореферат





1982

1,1,2,2-Тетрахлор-,
этан
$$C_p, T_{tr};$$

99:129171e Heat capacity, thermodynamic functions, and polymorphism of 1,1,2,2-tetrachloroethane in the 8-300 K range. Kosarukina, E. A.; Kolesov, V. P.; Kuramshina, G. M.; Pentin, Yu. A. (Mosk. Gos. Univ., Moscow, USSR). *Termodin. Org. Soedin.* 1982, 11-17 (Russ). The heat capacity (C) of 1,1,2,2-tetrachloroethane [79-34-5] was measured at 6.64-296.47 K. At >165 K, 2 sep. curves C vs T appear, due to the existence of 2 modifications, both obtained by overcooling the liq. The modifications show γ -type transformations with max. C_s values at 207.3 and 204.8 K. The temps., heats, and entropies of fusion as well as of transformation were detd. and the std. thermodyn. functions were derived. No plastic crystal is formed, but the natures of the obsd. λ -transformations are not fully understood.

C.A. 1983, 99, N16

$\text{CHCl}_2\text{CCl}_2(2)$ [Om. 21314] 1982

Mc Millen D.F., Golden D.M.,

$\Delta_f H;$ Ann. Rev. Phys. Chem. 1982,
33: 493-532.

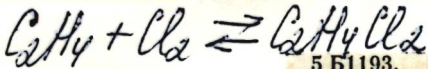
$\text{CHCl}_2(2)$ [Om. 2/3/4] 1982

McMillen D.F., Golden D.M.,

$\Delta_f H;$

Ann. Rev. Phys. Chem. 1982,
33: 493-532.

1983



5 Б1193. Инфракрасное спектроскопическое исследование комплекса этилен—хлор в жидком этане. An infrared spectroscopic study of the ethylene—chlorine complex in liquid ethane. Nelander B., Persson B. «J. Mol. Struct.», 1983, 101, № 3—4, 269—273 (англ.)

В области 450—600 см⁻¹ изучены ИК-спектры поглощения р-ров этилена и хлора в жидком этане при т-рах от 77 К до комн. и разл. конц-ях реагентов. Наблюдаемая полоса поглощения отнесена к комплексу C₂H₄·Cl₂ состава 1:1. Обнаружено, что поглощение комплекса увеличивается с т-рой до 120—126 К (максимум соответствует полному р-рению комплекса в этане) и затем уменьшается практически до нуля при 150 К. Определены коэф. интегральный поглощения комплекса ε и константа равновесия р-ции комплексообразования K(T). Рассчитаны термодинамич. характеристики р-ции: $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{Cl}_2 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$ в жидком этане при 140 К: $\Delta G = 0,9 \pm 0,6$ кДж/моль, $\Delta H = -8,6 \pm 2$ кДж/моль, $\Delta S = -70 \pm 20$ кДж/К⁻¹·моль⁻¹. Общая интегральная интен-

термодин.
св - ва

X. 1984, 19, N 5

сивность полосы комплекса $C_2H_4 \cdot Cl_2$, рассчитанная в предположении наложения трех лоренцовских контуров, положение к-рых и соотношение интенсивностей соответствуют содержанию изотопов хлора в естественной смеси, составляет $1,7 \pm 0,4$ км/моль. Положение максимума составляет $532,4 + (T - 140) \cdot 0,08$ см⁻¹, полуширина — $10,0 + (T - 140) \cdot 0,11$ см⁻¹. Отмечено, что экспериментально полученное значение ΔH вдвое меньше, чем теор., но хорошо согласуется с грубой оценкой на базе модельного расчета вкладов резонансного и вандер-ваальсового взаимодействий. С. Б. Осин

C-H-Ce

1983

Платонов, Валерий Андреевич.

Определение стандартных энтальпий образования полихлорбензолов : Автореф. дис. на соиск. учен. степ. канд. хим. наук. (02.00.04). — М., 1983. — 24 с.

В надзаг.: Гос. н.-и. и проект. ин-т хлор. пром-сти с опыт. з-дом и КБ. Библиогр.: с. 24 (6 назв.).

OK

№ 3213
А 9 № 163 [83-17354a]
ВКП 20—24 II 84

C-H-Ce

1983

Вихлакова, Ольга Леонидовна.

Давление насыщенного пара и термодинамические функции процесса парообразования жидких дихлоралканов C_2-C_{11} : Автореф. дис. на соиск. учен. степ. канд. хим. наук. (02.00.04). — М., 1983. — 20 с., граф.

В надзаг.: МГУ им. М. В. Ломоносова, Хим. фак.

P

№ 1966

A 9 № 94 [83-16152a]

ВКП 30 I — 3 II 84

$\text{CHCl} = \text{CCl}_2$

1984

Тюровакова Ю.Г.; Колесов В.П.

Вестн. Моск. Ун-та.

T_m ,
 ΔH_m ;

Сер. 2, химия, 1984, 25,
№ 3, 244-248.

(журнал есть
в библиотеке)

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

1984

Голованова Ю.П., Колесов В.П.

Тм, Вестн. Моск. Ун-та.
 ΔHm ; Сер. 2, Химия, 1984, 25,
 N 3, 244-248.

(Журнал есть
в библиотеке)

$C_6H_4Cl_2$ 1984
Koga Yoshikata.

T_{tz} ; 7. Cryst. Growth 1984,
66 (1), 35-44.

(see C_2Cl_6 ; I)

CH_2ClCH_2

Om. 19 999

1984

Minton T.K., Felder P.,
et al.,

$\Delta_f H^\circ$

J. Chem. Phys. 1984,
81 (4) 1759-1769.

$\text{CH}_2\text{ClCHCl}_2$ (24)

1985

Отчет „Комплексное исследование термодинамических свойств и молекулярных построений“, ИГУ, Иркутск, 1985 (годовой отчет за 1984г.)

ΔH_f°

C_2HCl_3

1984

10 Б3047. Стандартные энтальпии образования некоторых галогензамещенных метана, этана и этилена. Папина Т. С., Колесов В. П. «Пробл. калометрии и хим. термодинам. Докл. на 10 Всес. конф., 12—14 июня. 1984. Т. 1. Ч. 2». Черногоровка, 1984, 199—201

В калориметре с вращающейся в двух плоскостях бомбой определена энергия сгорания трихлорэтилена (I). Условия и продукты процесса сгорания тщательно охарактеризованы. Для образования жидк. I получено $\Delta H^{\circ}_{298,15} = -53,1 \pm 3,0$ кДж/моль. Правильность полученного значения подтверждена согласованием с данными процесса гидрохлорирования I. Обсуждены причины расхождения с имеющимися данными. Использование полученного значения для анализа процесса хлорирования I с образованием пентахлорэтана (II) показало ненадежность имеющихся эксперим. данных для $\Delta H_{обр.}$ (II) и правильность ранее оцененных авторами по методу Бернштейна величин $-\Delta H^{\circ}(обр., 298,15)$ газ и жидк. II 155,4 и 207,5 кДж/моль. А. С. Гузей

ΔH_f ;

Ⓜ

X. 1985, 19, N 10

C_2HCl_5

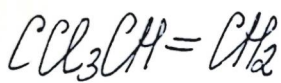
C_2HCl_5

1984

Ланьма Т. С., Колесов В. П.

Пробл. камерметрии и
мел. термохим. Докл. на
 ΔH_f ;
10 Всес. конф., 12-14 июня,
1984. Т. 1. Ч. 2. Черноголовка,
1984, 199-201.

(Сел. C_2HCl_3 ; I)



[Om. 19275]

1984



Traeger J. C.,

$\text{CY}_3\text{CH}=\text{CH}_2$ ⁽²⁾ Int. J. Mass Spectrom.
and Ion. Process, "1984, 58;

Fundam Aspects Gas Phase

Ion Processes. Collect. Invited
Pap. Dedicated Mem. M. M.
Rosenstock (1928-1982).

$\Delta_f H$;

$C_6H_5CHCl_2$

1985

18 Б3224. Фазовое превращение и молекулярная динамика кристаллического $C_6H_5CHCl_2$, исследованные методом ЯКР ^{35}Cl . A phase transition and molecular dynamics in crystalline $C_6H_5CHCl_2$ by ^{35}Cl NQR investigations. Kjustsel I. A., Mokeeva V. A., Soifer G. B., Shaposhnikov I. G. «Z. Naturforsch.», 1986, A 41, № 1—2: Proc. 8th Int. Symp. NQR Spectrosc., Darmstadt, July 22—26, 1985, 275—278 (англ.)

Измерены частота ЯКР (ν) и время спин-решеточной релаксации (T_1) ядер ^{35}Cl в крист. $C_6H_5CHCl_2$ при т-рах 77—180 К. Обнаружено фазовое превращение 2-го рода при т. крит. 94 К. В процессе нагрева при т. крит. низкот-рный спектр, состоящий из пяти линий, трансформируется в высокот-рный дуплет. Изучены особенности изменения ν и T_1 в окрестностях т. крит. Определены крит. показатели степени и скорость спин-

T_1
 t_2 ;

X. 1986, 19, N 18

решеточной релаксации. Выше 160 К наблюдается значит. уменьшение T_1 , а при 185 К сигналы ЯКР затухают, что обусловлено молек. вращат. движением в структуре, имеющим потенциальный барьер 33,9 кДж/моль. Проведена оценка величин T_1 , предэкспоненциального множителя и показателя степени высокот-рного вращат. движения.

В. Е. Смирнов



CCLH

1985

Lias S. G., Karpas Z.,
et al.

ΔH_f ;

J. Amer. Chem. Soc.,
1985, 107, N21, 6089-
-6096.

●
(cell. CF_2 ; I)

C_2HCl_3

1985

) 3 Б3036. Стандартная энтальпия образования трихлорэтилена. Папина Т. С., Колесов В. П. «Ж. физ. химии», 1985, 59, № 9, 2169—2172

В калориметре с бомбой, вращающейся в двух плоскостях, измерена энтальпия сгорания жидк. трихлорэтилена (I) $\Delta U_c^0 = -948,9 \pm 2,9$ кДж/моль. Рассчитаны энтальпии образования, $-\Delta H_f^0$, жидк. и газ. I, равные соотв. $53,1 \pm 3,0$ и $19,1 \pm 3,0$ кДж/моль. Из автореферата

ΔH_f ;

X. 1986, 19, ~ 3

C₆HCl₅

1985

21 Б3058. Стандартная энтальпия образования пентахлорбензола. Расчет $\Delta H_c^\circ(\text{г})$ и $\Delta H_f^\circ(\text{г})$ полихлорбензолов методом Татевского. Платонов В. А., Симулин Ю. Н., Розенберг М. М. «Ж. физ. химии», 1985, 59, № 6, 1378—1383

В прецизионном калориметре с вращающейся бомбой, футерованной платиной, определена станд. энтальпия сгорания пентахлорбензола (I): $\Delta H_c^\circ(\text{тв}) = -2502,1 \pm 0,8$ кДж/моль. С учетом лит. данных по энтальпии плавления и испарения вычислена станд. энтальпия образования I $\Delta H_f^\circ(\text{г}) = -41,5 \pm 1,1$ кДж/моль. МНК и способом трапециедалного преобразования системы ур-ний, описывающих структуры полихлорбензолов для метода Татевского по атомам с учетом второго окружения, на ЭВМ ЕС-1055 рассчитаны вклады в энергию связей для вычисления станд. энтальпий сгорания и образования.

Автореферат

ΔH_f ;

X. 1985, 19, № 21

$\text{CH}_3\text{ClCH}_3^+$ (2) | Om. 22039 1 1985

$\text{CH}_3\text{ClC}_2\text{H}_5^+$
 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl}_2^+$
Kp, A5H,

Sen Sharma D.K.,
Meza de Höjer S., et al.,
J. Amer. Chem. Soc.,
1985, 107, N13,
3757- 3762

$C_6H_6 \cdot HCl$
 $(C_6H_6 \cdot HCl)^+$

1985

5 Б3029. О структуре и термохимии вандерваальсовой молекулы $C_6H_6 \cdot HCl$ и ее фотоиона $(C_6H_6 \cdot HCl)^+$. On the structure and thermochemistry of the van der Waals molecule $C_6H_6 \cdot HCl$ and its photoion $(C_6H_6 \cdot HCl)^+$. Walters E. A., Grover J. R., White M. G., Hui E. T. «J. Phys. Chem.», 1985, 89, № 18, 3814—3818 (англ.)

Из измерений разности между порогами диссоциативной ионизации вандерваальсового комплекса $C_6H_6 \cdot HCl$ (I) и Пт ионизации C_6H_6 для энергии диссоциации I получено значение $4,79 \pm 0,12$ ккал/моль. Эта величина лежит в пределах лит. оценки глубины потенциальной ямы на основе анализа констант центробежной деформации I. В диапазоне длин волн 1280—1380 Å определена кривая эффективности фотоионизации образования $(C_6H_6 \cdot HCl)^+$ из I. Положение невысокого порога прямой ионизации (1357 ± 7 Å, или $9,14 \pm 0,05$ эВ) дает для энергии диссоциации катиона $7,3 \pm 1,2$ ккал/моль. Для ΔH° (обр.) I и $(C_6H_6 \cdot HCl)^+$ получены соотв. значения —10,4 и 204 ккал/моль. По резюме

ΔH°

X. 1986, 19, N 5

$C_6H_3Cl_3$

1985

104: 96856y Sublimation calorimeter and measurement of enthalpies of vaporization and sublimation of trichlorobenzenes. Yan, Haike; Gu, Jiangou; Hu, Riheng (Inst. Chem., Acad. Sin., Beijing, Peop. Rep. China). *Wuli Huaxue Xuebao* 1985, 1(6), 543-6 (Ch). A calorimeter was constructed for the measurements of the heats of sublimation and evapn. Expts. were made on trichlorobenzenes, water, decane and naphthalene.

$(\Delta_v H, \Delta_s H)$

c. A. 1986, 104, N 12

C₆H₅Cl

1986

18 Б3042. Изобарная теплоемкость жидкого хлор-бензола в интервале температур 293,15—633,15 К и давлений до 1,5 МПа. Ахундов Т. С., Абдуллаев Ф. Г., Ахундов Р. Т., Гусейнов А. А., Мордухав Н. М. «Изв. вузов. Нефть и газ», 1986, № 1, 56—59

G;

X. 1986, 19, N 18

C_6H_5Cl

1986

104: 214185d Isobaric heat capacity of liquid chlorobenzene at 293.15-633.15 K and pressures up to 1.5 MPa. Akhundov, T. S.; Abdullaev, F. G.; Akhundov, R. T.; Guseinov, A. A.; Mordukhaev, N. M. (Azerb. Inst. Nefti Khim., Baku, USSR). *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Neft Gaz* 1986, 29(1), 56-9 (Russ). The calorimetrically detd. heat capacities are tabulated for 15 isobars.

(G)

C.A. 1986, 104, N 24

$(\text{CH}_3)_2\text{CCl}$

1986

2 Б3145. Исследования методом дифференциального термического анализа и ядерного магнитного резонанса полиморфизма в твердом $(\text{CH}_3)_2\text{CCl}$. Polymorphism in solid $(\text{CH}_3)_2\text{CCl}$ as studied by the method of differential thermal analyses and nuclear magnetic resonance. Ohtani S., Hasebe T. «Chem. Lett.», 1986, № 8, 1283—1286 (англ.)

Методом ДСК в интервале 89,3—304,2 К при скоростях изменения т-ры 0,4—1,6 К/мин и путем измерения времени T_2 ЯМР ядер ^1H в интервале 93,2—250 К исследованы фазовые превращения в $(\text{CH}_3)_2\text{CCl}$. При т-рах 217,7—219,5 К под давл. насыщ. пара обнаружено существование ранее неизвестной фазы, появление которой связано с новым видом молек. движения: затрудненным вращением группы CH_3 и одноосным ориентационным смещением.

В. Е. Смирнов

(T_2)

Х. 1987, 19, № 2.

$\text{Cl}_3\text{C}_6\text{H}_3$

1986

24 БЗ203. Порядок — беспорядок в твердом 1,2,3-трихлорбензоле. Исследование монокристалла при помощи ЯКР на ^{35}Cl . Order-disorder in solid 1,2,3-trichlorobenzene. A single crystal ^{35}Cl NQR study. Sharma S., Weiden N., Weiss Al. «Ber. Bunsenges. phys. Chem.», 1986, 90, № 8, 725—730 (англ.)

В диапазоне т-р 140—250 К путем анализа данных ЯКР на ^{35}Cl для монокрист. 1,2,3- $\text{Cl}_3\text{C}_6\text{H}_3$ определены конусы нулевого зеемановского расщепления для 6-ти линий спектра. Найдены величины, направления и симметрия тензоров ядерного квадрупольного взаимодействия. Параметры симметрии и ориентации тензоров мало зависят от т-ры. Вследствие статич. перехода типа порядок—беспорядок возникает явление уширения линий спектра и изменение времени спинрешеточной релаксации. Вблизи т. пл. (255 К) сигналы ЯКР исчезают. Из данных по т-рной зависимости ширины линий спектра найдено 2 типа кристаллографически неэквивалентных молекул в элементарной ячейке с активац. энергиями 31 и 36 кДж/моль. В. А. Ступников

$\text{Cl}_3\text{C}_6\text{H}_3$

Х. 1986, 19, № 24

C₂H₄Cl₂

1987

' 107: 13282w Vapor pressure and critical constants of 1,1-dichloroethane. Garcia-Sanchez, Fernando; Trejo, Arturo (Inst. Mexicano Pet., TERPRO, Mexico City, Mex. 07730). *J. Chem. Thermodyn.* 1987, 19(4), 359-61 (Eng). Vapor pressures were measured for 1,1-dichloroethane. The measured values were fitted by the Cragoe equation and by Chebyshev polynomials. The crit. temp. and pressure were detd. by direct observation of the disappearance of the gas-to-liq. meniscus.

(P)

c.A. 1987, 107, N2

C₆H₁₁Cl(2) [Om. 26145] 1987

Gardiner D. J., Littleton C. J.,
et al.,

de. n., J. Raman Spectrosc.,
Kp; 1987, 18, n1, 9-11.

Ccl₄·C₆H₆(K) (om 27078) 1987

Goates S.R., Boerio-Goa-
tes J., et al.,

Δ₅H
J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1987, Pt 1, 83,
N5, ● 1553-1558.

C_6H_5Cl

[om. 29833]

1987

$\Delta_f H,$
теорет.
расчет

Jug K., Schulz F.,

J. Comput. Chem., 1987,
8, N 7, 1040-1050.

CHCL

[om: 29833]

1987

Jug K., Schulz J.,

Δ₅H,

J. Comput. Chem.,

neopem.
pacum

1987,

2, N7,

1040-

1050

$C_6H_2Cl_4$

1987

Mondieig D.,
Housty J. R., et al.

Calorim. et anal. therm.

T_{tz} ,

Vol. 18: Journées, Bordeaux,

ΔH_{tz} ;

25-27 mai, 1987. Marseille,

1987, 269● - 275.

(cf. $C_6H_2Br_4$; I)

$\text{CH}_3 \cdot \text{CHCl}$

DM 28912, 260201987

13 Б4372. Фотобромирование $\text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}$ в присутствии C_2H_6 . Теплота образования радикала CH_3CHCl и энергия диссоциации химической связи D_0 ($\text{CH}_3\text{CHCl}-\text{H}$). Photobromination of $\text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}$ in the presence of C_2H_6 . The heat of formation of the CH_3CHCl radical and the D^0 ($\text{CH}_3\text{CHCl}-\text{H}$) bond dissociation energy. Tschuikow - Roux E., Salomon D. R. «J. Phys. Chem.», 1987, 91, № 3, 699—702 (англ.)

Методом конкурирующих р-ций с использованием ГЖХ для анализа продуктов изучено газофазное фотобромирование $\text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}$ (I) в присутствии этана при т-рах 32—95° С, полном давл. ~32 Торр и семикратном избытке Ув над Br_2 . В этих условиях отщепление атома Н из молекулы I происходит практически только из группы CH_2Cl . На основании известных параметров уравнения Аррениуса для р-ции $\text{Br} + \text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{HBr} + \text{C}_2\text{H}_5$, а именно, $\lg A$ ($\text{см}^3/\text{моль} \cdot \text{с}$) = $14,135 \pm 0,056$; $E_a = 13,66 \pm 0,14$ ккал/моль, определены аналогичные параметры для р-ции $\text{Br} + \text{I} \rightarrow \text{HBr} + \text{CH}_3\text{CHCl}$: $\lg A$ ($\text{см}^3/\text{моль} \cdot \text{с}$) = $12,182 \pm 0,091$; $E_a = 9,14 \pm 0,16$ ккал/моль. В результа-

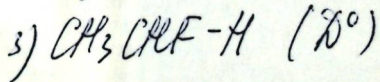
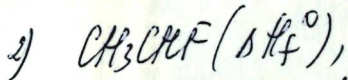
ΔH_f°

⊠
(+3)

X. 1987, 19, N 13

на об

те анализа этих кинетич. данных и известных из лит-ры термохим. параметров для родственных соединений определены след. теплоты образования ΔH_f^0 и энергии диссоциации хим. связей D^0 (ккал/моль): ΔH_f^0 ($\text{CH}_3\text{-CHCl}$) = $16,75 \pm 1,0$; D^0 ($\text{CH}_3\text{CHCl-H}$) = $95,7 \pm 1,0$; ΔH_f^0 (CH_3CHF) = $-17,7 \pm 1,1$; D^0 ($\text{CH}_3\text{CHF-H}$) = $97,3 \pm 1,1$.
Библ. 32. В. Е. Скурат



$C_3H_6Cl_2$ м. 25643 1987
Варуцкене Р. В.,
Носова О. И. и др.

$P, \Delta H_v$; Ж. физ. химии,
1987, 61, N1, 31-35.

(сер. $C_2H_4Cl_2$; I)

C₂H₄Cl₂

DM-25643

1987

106: 220335k Saturated vapor pressures and heats of evaporation of dichloroethane and dichloropropane isomers. Varushchenko, R. M.; Loseva, O. L.; Druzhinina, A. I. (Mosk. Gos. Univ., Moscow, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1987, 61(1), 31-5 (Russ). The vapor pressure of 1,1-dichloroethane, and 1,1-,2,2-, and 1,3-dichloropropane was detd. exptl. at $294-330\text{ K} < T < 33-393\text{ K}$ and $11-25\text{ kPa} < P < 97-101.6\text{ kPa}$. The normal b.p., enthalpy of vaporization (ΔH_{vap}), and crit. consts. (P_c , V_c , T_c) of the investigated dichlorides were calcd. The ΔH_{vap} values of 1,1- and 1,2-dichloropropane were detd. colorimetrically at 298 K.

(P, ΔH)

c.A. 1987, 106, N26

C-Cl-H

[Om. 27705]

1987

(дихлор-
алканы)

Варуценко Р.М., Ярем-
кина А.И. и др.,

(Р, Ткрит.) 2л. флу. химии, 1987,
61, N 9, 2327-2332.

Давление паров и критические
параметры дихлоралканов.

$C_6H_3Cl_3$

1987

11 Б3040. Стандартные энтальпии образования и энтальпии изомеризации трихлорбензолов. Van Hailke, Gu Jian-Guo, An Xu-Wu, Hu Ri-Heng. «Хуасюэ сюэбао, Acta chim. sin.», 1987, 45, № 12, 1884—1887 (кит.; рез. англ.)

При 298,15 К в калориметре с вращающейся бомбой определены энтальпии сгорания 1,2,3-, 1,2,4- и 1,3,5-трихлорбензола (I—III соотв.). На основе эксперим. данных вычислены энтальпии образования в конденс. и газ. состояниях, а также энтальпии изомеризации. Величины $-\Delta_c H^\circ$ и $-\Delta_f H^\circ$ конденсированных фаз, а также $\Delta_f H^\circ(g)$ составили для I $2793,76 \pm 1,63$, $66,91 \pm 1,67$ и $8,23 \pm 1,83$ кДж/моль; II $2810,46 \pm 1,45$; $50,21 \pm 1,49$ и $4,85 \pm 1,57$; III $2785,42 \pm 1,29$; $75,25 \pm 1,34$ и $-2,57 \pm 1,43$. По резюме

ΔH_f° ;

X-1988, 19, N 11

C₆H₃Cl₃

1987

108: 138790n Standard enthalpies of formation and enthalpies of isomerization of trichlorobenzenes. Yan, Haikē; Gu, Jianguo; An, Xuwu; Hu, Riheng. (Inst. Chem., Acad. Sin., Beijing, Peop. Rep. China). *Huaxue Xuebao* 1987, 45(12), 1184-7 (Ch). Enthalpies of combustion at 298.15 K were measured by rotating bomb calorimeter for 1,2,3-trichlorobenzene (1), 1,2,4-trichlorobenzene (2), and 1,3,5-trichlorobenzene (3), and the std. enthalpies of formation derived for these compds. in their liq. or solid and gaseous states. The results of $-\Delta H_c^\circ$ (l or s), $-\Delta H_f^\circ$ (l or s), and $\Delta H_f^\circ(g)$ in kJ.mol⁻¹ are 2793.76 $\pm$ 1.63, 66.91 $\pm$ 1.67, 8.23 $\pm$ 1.83 for 1; 2810.46 $\pm$ 1.45, 50.21 $\pm$ 1.49, 4.85 $\pm$ 1.57 for 2; 2785.42 $\pm$ 1.29, 75.25 $\pm$ 1.34, -2.57 $\pm$ 1.43 for 3 resp. The enthalpies of isomerization of these compds. in their gaseous states calcd. are given: 1 $\rightarrow$ 2, $\Delta H_1 = 3.38$ kJ.mol⁻¹; 1 $\rightarrow$ 3, $\Delta H_1 = 10.80$ kJ.mol⁻¹; 2 $\rightarrow$ 3, $\Delta H_1 = 7.42$ kJ.

$\Delta_f H, \Delta H_{iso}$
пересчитан

C.A. 1988, 108, N 16

C6H5Cl

1988

3 Б3022. Теплофизические свойства хлорбензола / Ахундов Т. С., Абдуллаев Ф. Г., Искендеров А. И., Ишханов Ю. Б., Гусейнов А. А., Ахундов Р. Т. // 8 Всес. конф. по теплофиз. свойствам веществ, Новосибирск, 20—22 сент., 1988: Тез. докл. Ч. 1.— Новосибирск, 1988.— С. 151.— Рус.

P, C_p ;

С помощью пьезометра постоянного объема исследованы P — ρ — T - и P_s — T_s -зависимости хлорбензола при t -рах 298—648 К и давл. 0,1—50 МПа. На основе эксперим. данных предложены уравнения состояния для газ. и жидк. фазы. В адиабатич. проточном калориметре измерена C_p при t -рах 298—648 К и давл. 0,1—25 МПа. Измерены динамич. вязкость и теплопроводность в жидк. и газ. фазах, включая крит. область. Из резюме

X.1989, №3

C-C-H

1988

23 Б3037. Метод оценки энтальпий образования. Галогензамещенные этаны и этены. Антонова З. А., Сачек А. И., Андреевский Д. Н. «Расчет. методы физ. химии». Калинин, 1988, 75—81

Предложена аддитивная схема расчета энтальпий образования методом «подобных структур», расширенная и дополненная введением поправок на взаимные влияния геминально и вицинально расположенных связей С—галоген. Впервые рассчитаны величины инкрементов $\Delta_f H^\circ$ полигалогензамещ. этена. Вычисл. описанным методом значения $\Delta_f H$ галогензамещ. этана и этена удовлетворительно согласуются с лит. эксперим. данными. Р. Г. Сагитов

$\Delta_f H^\circ$, метод
оценки

X. 1988, N 23

C₂H₃Cl₃

1988

110: 64688c Specific heat analysis in 1,1,1-trichloroethane. Martin, Carlos A.; Monti, Gustavo A. (Fac. Mat. Astron. Fis., Univ. Nac. Cordoba, 5000 Cordoba, Argent.). *Thermochim. Acta* 1988, 134, 27-34 (Eng). The temp. dependence of the sp. heat of 1,1,1-trichloroethane in the low temp. phase ($0 < T < 225$ K) is analyzed in a dynamical fashion, approximating the contributions of the acoustic and optic modes by means of the Debye and Einstein models, resp., and accounting for anharmonicity. A value for the Debye temp. of (26.9 ± 2.6) cm⁻¹ is deduced. The anal. also reveals the formation of lattice vacancies, producing values of (5.0 ± 0.3) K for the formation entropy and of (1929 ± 81) K for the formation energy. The excellent description achieved for the sp. heat data and the anal. of the values detd. for the various parameters, indicate that these are very reasonable ones.

(C_p, D₅D)

C.A. 1989, 110, N 8

СЧЗ АЗ

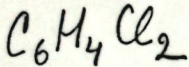
1988

8 БЗ019. Анализ теплоемкости 1,1,1-трихлорэтана.
Specific heat analysis in 1,1,1-trichloroethane / Martin
Carlos A., Monti Gustavo A. // Thermochim. Acta.—
1988.— 134.— С. 27—34.— Англ.

Проведен динамич. анализ τ -ной зависимости теплоемкости фазы II 1,1,1-трихлорэтана (обл. существования 0—225 К). Предположено, что вклад в C_p акустич. и оптич. мод м. б. аппроксимирован моделями Дебая и Эйнштейна соотв. с учетом ангармоничности. Для τ -ры Дебая получено $(26,9 \pm 2,6)$ см⁻¹. Показано образование решеточных вакансий с энтропией и энергией образования $S/k = 5,0 \pm 0,3$ и $E/k = (1929 \pm 81)$ К. Хорошее описание эксперим. данных по C_p и оценка на основе полученных величин различных параметров свидетельствуют о корректности результатов анализа. Р. Г. Сагитов

(Ср)

х. 1989, № 8



от 30716

1988

4 E271. Динамический анализ удельной теплоемкости *p*-дихлорбензола. Dynamical analysis of the specific heat in *p*-dichlorobenzene / Martin Carlos A., Monti Gustavo A. // Thermochim. acta.— 1988.— 134.— С. 35—39.— Англ.

Проанализирована экспериментальная температурная зависимость уд. теплоемкости $C_p(T)$ в области 30—180 К для α -фазы *p*-1,4- $\text{Cl}_2\text{C}_6\text{H}_4$ с целью извлечения частоты ν_B вращательного колебания двух молекул в примитивной ячейке вокруг оси, лежащей в плоскости бензольного кольца перпендикулярно направлению $\text{Cl}(1) - \text{Cl}(4)$, а также т-ры T_D Дебая и их температурных зависимостей. В анализе использованы экспериментальные температурные зависимости частот внутренних и внешних колебаний (кроме неизвестной частоты ν_B) кристалла. Найдено, что $\nu_B = 42,9 \text{ см}^{-1}$, а $T_D = 106,2 \text{ см}^{-1}$. Обе эти величины, как и их температурные зависимости, соответствуют ожидаемым. М. Б. Н.

C_p ;

ф. 1989, № 4

C-A-M

1988

23 Б3030. Давление насыщенного пара, энтальпии и энтропии испарения α, ω -дихлор- n -алканов C_6-C_8, C_{10} . Варущенко Р. М., Лосева О. Л., Дружинина А. И., Зорина Э. Ф. «Ж. физ. химии», 1988, 62, № 7, 1776—1780

Эбулиометрическим методом определена t -рная зависимость давл. насыщ. пара 1,6-дихлор- n -гексана (I)

1,7-дихлор- n -гептана (II), 1,8-дихлор- n -октана (III) и 1,10-дихлор- n -декана (IV), а также 1,3-дихлорпропана (V), 1,4-дихлор- n -бутана (VI) и 1,5-дихлор- n -пентана (VII), давл. насыщ. паров к-рых измерены авторами ранее в диапазоне давл. 3,9—97,5 кПа. Вычислены норм. t . кип. (T_n), энтальпии ($\Delta_{\text{вар}} H$) и энтропии ($\Delta_{\text{вар}} S$) испарения. Значения T_n , $\Delta_{\text{вар}} H$ (298) и $\Delta_{\text{вар}} H(T_n)$ равны соотв. для I—VII 478,466 K, $58,97 \pm 0,87$ и $43,46 \pm 0,47$ кДж/моль; 499,574; $64,91 \pm 1,70$ и $45,45 \pm 0,56$; 518,799; $71,42 \pm 1,30$ и $47,48 \pm 0,54$; 553,817; $82,55 \pm 3,90$ и $51,77 \pm 0,99$; 393,982; $41,05 \pm 0,54$ и $35,15 \pm 0,37$; 428,302; $46,32 \pm 0,48$ и $38,32 \pm 0,44$; 456,140; $51,73 \pm 0,63$ и $40,63 \pm 0,54$. Графически приведены зависимости T_n , $\Delta_{\text{вар}} H$ и $\Delta_{\text{вар}} S$ от числа атомов C.

А. Л. М.

($\Delta H, P$).

X.1988, N 23

$C_4H_8Cl_2$

1988

1 Б3027. Энергии испарения дихлоралканов / Варущенко Р. М. Лосева О. Л., Дружинина А. И. // Ж. физ. химии.— 1988.— 62, № 9.— С. 2329—2335.— Рус.

Определена т-рная зависимость плотностей α, ω -дихлор-н-алканов $C_4—C_8, C_{10}$ в интервале 293—343 К. С использованием плотностей и станд. энергий испарения рассчитаны плотности энергий сцепления S жидк. 1,1-, 1,2- и α, ω -дихлор-н-алканов в $C_2—C_{11}$, необходимые для получения коэф. активности. Проанализирована зависимость энергий испарения дихлоралканов от параметров, определяющих структуру жидк. фазы веществ. Резюме

ΔH_v ;

(45) Δ

X. 1989, N1



$C_5H_{10}Cl_2$

$C_8H_{16}Cl_2$

$C_6H_{12}Cl_2$

$C_{10}H_{20}Cl_2$

$C_7H_{14}Cl_2$

$C_5H_{10}Cl_2$

1988

Варуценко Р. М.,
Лосева О. Л. и др.

ΔH_v ;

не. физ. химии. - 1988.

62, н. 9. - С, 2329-2335.

(см. $C_4H_8Cl_2$; I)

$C_7 H_{14} Cl_2$

1988

Варуценько Р. М.,
Лосева О. Л. и др.

ΔH_v ,

ис. физ. химии. - 1988.

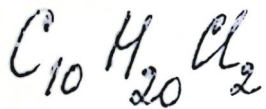
62, № 9. - С. 2329-2335.

(сир. $C_4 H_8 Cl_2$; I)

$C_8H_{16}Cl_2$ 1988
Варуценко Р. М.,
Лосева О. Л. и др.

ΔH_v ; И. физ. химии. - 1988.
62, № 9. - С. 2329-2335.

(сир. $C_4H_8Cl_2$; I)



1988

Варушченко Р. М.,
Лосева О. Л. и др.



Ж. физ. химии. - 1988.
62, N 9. - С. 2329-2335.

●
(см. $C_4H_8Cl_2$; I)

$C_6H_4Cl_2$

1989

111:230271q Determination of standard enthalpies of vaporization and sublimation of three dichlorobenzenes. An, Xuwu; Zheng, Xiaolin (Inst. Chem., Acad. Sin., Beijing, Peop. Rep. China). *Wuli Huaxue Xuebao* 1989, 5(4), 487-91 (Ch). The heats of evapn. of *o*- and *m*-dichlorobenzenes and sublimation of *p*-dichlorobenzene were measured calorimetrically at 298.15 K. Data for chlorobenzenes from this work and literature b.ps. and corresponding heats of evapn. or sublimation are tabulated. Not known values were estd.

(p, ΔH_3)

C.A. 1989, 111, N24

$C_6H_2Cl_4$

1989

114: 15190h Polymorphism of 1,2,4,5-tetrachlorobenzene and of 1,2,4,5-tetrabromobenzene. Mondieig, D.; Cuevas-Diarte, M. A.; Haget, Y. (Lab. Cristallogr. Phys. Crist., Univ. Bordeaux I, Talence, Fr.). *J. Therm. Anal.* 1989, 35(7), 2491-500 (Eng). The polymorphism of 1,2,4,5-tetrachlorobenzene and 1,2,4,5-tetrabromobenzene was studied using thermal, calorimetric and crystallog. characterizations. Tetrachlorobenzene has triclinic (P1) and monoclinic (P2₁1a) forms. Tetrabromobenzene has 2 monoclinic (P2₁1a) forms heats of transition and fusion were detd.

$T_{t2}, T_m,$
 $\Delta H_{t2}, \Delta H_m$ (4) $\otimes$

$C_6H_2Br_4$

c.A. 1991, 114, n 2

$C_4H_8Cl_2$

1990

114: 50720c Study on the electrostatic interaction in organic chlorocompounds. Enthalpies of combustion and formation of 1,3- and 1,4-dichlorobutanes. An, Xuwu; He, Jun; Hu, Riheng (Inst. Chem., Acad. Sin., Beijing, Peop. Rep. China). *Thermochim. Acta* 1990, 169, 331-7 (Eng). The heats of combustion and vaporization of 1,3- and 1,4-dichlorobutanes were measured in a tantalum-lined rotation bomb calorimeter and an LKB vaporization calorimeter and from these values the gaseous enthalpies of formation of the compds. were calcd. The electrostatic interactions in these mols. are discussed.

(ΔH_f)

c.A. 1991, 114, N 6

$C_7H_{15}Cl$ (OM 34596) 1990

Alberty R. A., Cheung M. B.

J. Phys. and Chem. Ref.

ΔH_f

Data 1990, 19, N2,

● 321 - 348.

$C_8H_{17}Cl$

(DM 34596)

1990

Alberty R. A., Cheung M. B.

J. Phys. and Chem. Ref.

ΔH_f

Data 1990, 19, N2,

321-348.

C_3H_7Cl

(DM 34596)

1990

Alberty R.A., Chung M.B.

J. Phys. and Chem. Ref.

ΔH_f

Data 1990, 19, N2,

321-348.

C4H9Cl

(on 34596)

1990

Alberty R.A., Ching M.B.
J. Phys. and Chem. Ref.
Data 1990, 19, N2,
321-348.

ΔH_f

C-Cl-H - соединение (34596) 1990

113: 85705k Standard chemical thermodynamic properties of isomer groups of monochloroalkanes. Alberty, Robert A.; Chung, Michael B. (Dep. Chem., Massachusetts Inst. Technol., Cambridge, MA 02139 USA). *J. Phys. Chem. Ref. Data* 1990, 19(2), 321-48 (Eng). The chem. thermodyn. properties of isomer groups of monochloroalkanes from C_2H_5Cl to $C_8H_{17}Cl$ in the ideal gas phase were calcd. from 298.15 to 1500 K by using new Benson group values from Bozzelli. Increments in isomer group properties per CH_2 were calcd. to show the extent to which thermodyn. properties of higher isomer groups may be obtained by linear extrapolation. Equil. mole fractions within isomer groups were calcd. for the ideal gas state. Values are given for all species of monochloroalkanes from CH_3Cl to $C_8H_{17}Cl$ in SI units for a std. state pressure of 1 bar. The values calcd. here are compared with values published by the Thermodyn. Research Center (Texas A&M University).

ΔH_f

(4) ☒ Термо химиче оп. в-в,
 ΔH_f , оценок

C. A. 1990, 113, № 10

C5H11Cl (DM 34596) 1990

Alberty R.A., Chung M.B.

J. Phys. and Chem. Ref.

ΔH_f

Data: 1990, 19, N2,

321 - 348.

$C_6H_{13}Ll$

(DM 34596)

1990

Alberty R.A., Cheng M.B.

J. Phys. and Chem. Ref.

ΔH_f

Data 1990, 19, N2,

321 - 348.

CyHgCl

1990

Goncalves R.M.C.

Simoes A.M.N.

J. Solution Chem.

ΔHag

1990, 19 (3), 315-20.

(see. CyHgBz; I)

C6H5Cl

1991

120: 200994k Saturated vapor pressure, orthobaric density and latent heat of vaporization of chlorobenzene. Abdullaev, F. G.; Akhundov, R. T.; Dzhabiev, Yu. A.; Guseinov, A. A. (USSR). *Teplofiz. Svoistva Veshchestv i Mater.* 1991, (30), 33-6 (Russ). From *Ref. Zh., Fiz. (A-Zh.)* 1991, Abstr. No. 9131. Title only translated.

(P)

C.A. 1994, 120, N 16

$C_6H_6 - C_6H_5Cl$

1991

17 Б3029. Изобарная теплоемкость смеси бензол-хлорбензол в паровой фазе / Ахундов Т. С., Абдуллаев Ф. Г., Мордухаев Н. М., Ахундов Р. Т. // Теплофиз. свойства веществ и матер.— 1991.— № 30.— С. 70—74.— Рус.

На экспериментальной установке, реализующей метод адиабатич. проточного калориметра с калориметрич. измерением расхода, измерена изобарная теплоемкость смеси бензол — хлорбензол в газовой фазе при соотношениях конц-ий 75—25, 50—50 и 25—75 мол.% от т-ры насыщения при давл. 0,5 МПа до т-ры 633 К и давл. до 4,0 МПа.

Смесь

Х. 1991, N 17

$C_6H_6 - C_6H_5Cl$

1991

9 И256. Изобарная теплоемкость смеси бензол — хлорбензол при концентрации (50—50)% / Ахундов Т. С., Абдуллаев Ф. Г., Мордухаев Н. М., Ахундов Р. Т. // Теплофиз. свойства веществ и матер.— 1991.— № 30.— С. 75—78

Методом адиабатического проточного калориметра с калориметрич. измерением расхода определена изобарная теплоемкость смеси бензол — хлорбензол при молярной конц-ии 50—50% в диапазоне т-р $298 \div 633$ К и давл. $0,1 \div 25,0$ МПа, включая жидкую, критическую сверхкритическую газовую области. Автореферат

62

ф. 1991, № 9

C₆H₅Cl

1991

9 И257. Изобарная теплоемкость хлорбензола в паровой области / Ахундов Т. С., Абдуллаев Ф. Г., Гусейнов А. А., Ахундов Р. Т. // Теплофиз. свойства веществ и матер.— 1991.— № 30.— С. 41—510

Методом проточного адиабатич. калориметра с калориметрич. измерением расхода в замкнутой схеме циркуляции проведено эксперим. определение изобарной теплоемкости хлорбензола в газовой фазе от т-ры насыщения до т-ры термич. разложения. По вириальному уровню состояния рассчитана теплоемкость и проведено сравнение с эксперим. значениями C_p . Различными методами молекулярно-кинетич. теории рассчитана теплоемкость в идеально-газовом состоянии; Полученные расчетные значения C_p сопоставлены с экспериментальными.

Автореферат

C_p

ф. 1991, № 9

Теплоемкость
смеси

1991

$C_6H_6 + C_6H_5Cl$

) 9 ИЗ5. Изобарная теплоемкость смеси бензол-хлор-бензол в паровой фазе / Ахундов Т. С., Абдуллаев Ф. Г., Мордухаев Н. М., Ахундов Р. Т. // Тепло-физ. свойства веществ и матер.— 1991.— № 30.— С. 70—74

На эксперим. установке, реализующей метод адиабатич. проточного калориметра с калориметрич. измерением расхода, измерена изобарная теплоемкость смеси бензол-хлорбензол в газовой фазе до т-ры, разложения менее стойкого галогенопроизводного компонента.

Автореферат

ф. 1991, № 9

С6 Н5 СС

1991

17 БЗ026. Изобарная теплоемкость хлорбензола в паровой области / Ахундов Т. С., Абдуллаев Ф. Г., Гусейнов А. А., Ахундов Р. Т. // Теплофиз. свойства веществ и матер.— 1991.— № 30.— С. 41—50.— Рус.

Методом проточного адиабатич. калориметра с калориметрич. измерением расхода в замкнутой схеме циркуляции проведено эксперим. определение изобарной теплоемкости хлорбензола в газовой фазе от t -ры насыщения до t -ры термич. разложения. По вириальному уравнению состояния рассчитана теплоемкость и проведено сравнение с эксперим. значениями C_p . Различными методами молекулярно-кинетич. теории рассчитана теплоемкость в идеально-газовом состоянии.

(С)

Х. 1991, N 17

C₆H₅Cl

1991

9 ИЗ1. Давление насыщенного пара, ортобарические плотности и скрытая теплота парообразования хлорбензола / Абдуллаев Ф. Г., Ахундов Р. Т., Джабиев Ю. А., Гусейнов А. А. // Теплофиз. свойства веществ и матер.— 1991.— № 30.— С. 33—36 .

На установке, реализующей метод неразгруженного сферич. пьезометра постоянного объема, измерено давление насыщенного пара хлорбензола вплоть до критич. точки. Эксперим. данные описаны предложенным ур-нием. На основе полученных данных рассчитаны значения скрытой теплоты парообразования хлорбензола. Автореферат

($p, \Delta H_v$)

сб. 1991, № 9

C₆H₅Cl

1991

17 Б3034. Давление насыщенного пара, ортобарические плотности и скрытая теплота парообразования хлорбензола / Абдуллаев Ф. Г., Ахундов Р. Т., Джабиев Ю. А., Гусейнов А. А. // Теплофиз. свойства веществ и матер.— 1991.— № 30.— С. 33—36.— Рус.

На установке, реализующей метод неразгруженного сферич. пьезометра постоянного объема, измерено давление насыщ. пара хлорбензола (I) вплоть до крит. точки (298,15—623,15 К). Эксперим. данные описаны ур-нием $\lg P_s = A + B/T + C \lg T + DT + ET^2$, где $A = -37,3924$, $B = -1790,5711$; $C = 20,3104$; $D = -0,03401$ и $E = 0,1625 \cdot 10^{-4}$ — пост. коэф., зависящие от рода жидкости, T — абс. т-ра, К. С использованием ур-ния Клапейрона—Клаузиуса рассчитана скрытая теплота парообразования I в изученном интервале температур.

(P, ΔH_v)

х. 1991, N 17

C6H5Cl

1991

115: 240236t A compilation of some physico-chemical properties for chlorobenzenes. Dannenfelser, R. M.; Paric, M.; White, M.; Yalkowsky, S. H. (Coll. Pharm., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *Chemosphere* 1991, 23(2), 141-65 (Eng). A compilation of some physico-chem. properties for chlorobenzenes is given. The literature values for the soln. properties have been evaluated and whenever possible av. values are given.

Phy-chem.
cb-ba

C.A. 1991, 115, N22

C₆H₅Cl

1991

9 ИЗО. P — p — T -зависимость хлорбензола в газовой фазе / Джабиев Ю. А., Абдуллаев Ф. Г., Ахундов Т. С. // Теплофиз. свойства веществ и матер.— 1991.— № 30.— С. 37—40

Исследована P — p — T -зависимость хлорбензола в газовой фазе в диапазоне t -р 473—648 К при давл. до 5,5 МПа. Опытами охвачена и часть двухфазной области параметров состояния. Полученные P — p — T -данные в газовой фазе описаны ур-нием состояния в вириальной форме с двумя вириальными коэф., которые обобщены с соответствующими коэф. для бензола. По ним определены потенц. параметры межмолекулярного взаимодействия Леннард-Джонса и Кихары.

Авгореферат

(p - V - T)

ф. 1991, № 9

C₆H₅Cl

1991

17 Б3085. P — p — T -зависимость хлорбензола в газовой фазе / Джабиев Ю. А., Абдулаев Ф. Г., Ахундов Т. С. // Теплофиз. свойства веществ и матер.— 1991.— № 30.— С. 37—40.— Рус.

P - p - T
зависимости

2. 1991, N17

C_6H_5Cl

1991

Гусейнов А. А.,

Абдуллаев Ф. И. и др.

Менюриз. Свойства ве-
ществ и материалов. 1991.

N 30. с. 50-54.

(сер. C_6H_5F ; I)

H-H₀

C₁₀H₇Cl

1991

18 Б3012. Молярные теплоемкости 2-хлорнафталина в области температур 5—370 К. Molar heat capacities of 2-chloronaphthalene at temperatures between 5 K and 370 K / Miltenburg van J. C., Verdonk M. L. // J. Chem. Thermodyn.— 1991.— 23, № 3.— С. 273—279.— Англ.

В интервале т-р 5—370 К в адиабатич. калориметре измерена теплоемкость 2-хлорнафталина (I) с различной термич. предысторией. Рассчитаны и табулированы с шагом 10 К сглаженные значения C_p^0/R , $\Delta S^0/R$, $\Delta H^0/R$ и Φ^0/R . При 298,15 К они составили 28,341; 24,311; 3553 К и 12,354. Для плавления I получено $T_{fus} = 331,17 \pm 0,05$ К и $\Delta_{fus}H = 14\,004 \pm 15$ Дж/моль. Для интервала 0—10 К использована экстраполяция $C_p = 5,4 \cdot 10^{-3} T^3$ Дж/моль·К⁴, в области 315—325 К $C_p(I, s) (\pm 0,40 \text{ Дж/моль} \cdot \text{К}) = 58,978 + 0,46312 T$, для жидк. I $C_p (\pm 0,023 \text{ Дж/моль} \cdot \text{К}) = 100,208 + 0,37864 T$ (333—368 К). Подтверждено наличие твердофазового

(C, 5-370K)

X. 1992, N 18

перехода в области 260—309 К. На кривой $C_p(T)$ для
тв. I отмечено два уступа, а на T -ной зависимости
скорости теплообмена — минимум в области 260—
290 К и максимум в области 290—309 К, которые соот-
ветствуют твердофазовому переходу с двумя раз-
личными механизмами релаксации. Подтверждено на-
личие незначительной аномалии C_p в окрестности
12 К. А. С. Гузей

$(C_6H_5)_3Cl$

1991

24 БЗ174. Диэлектрическая релаксация в переохлажденном трифенилхлорметане и характерный фактор, определяющий подвижность в молекулярных жидкостях. Dielectric relaxation in supercooled triphenylchloromethane and intrinsic factor determining mobility in molecular liquids / Naoki M., Seki M., Kugo H., Saito F., Tanioka T. // J. Phys. Chem.— 1991.— 95, № 14.— С. 5628—5633.— Англ.

Определена теплоемкость трифенилхлорметана (I) в жидк., переохлажденном жидк., крист. и стеклообразном состояниях. При различных т-рах и давл. 0,1; 39,2 и 68,6 МПа измерены также диэлектрич. св-ва переохлажденного жидк. I. Изменения диэлектрич. релаксации с т-рой и давл. проанализированы в рамках термодинамич. ф-ций активации и конфигурац. параметров. Результаты сопоставлены с ранее полученными данными для о-терфенила (II), смеси I—II и поли(винилхло-

Ср

X. 1991, N 24

рида) (III). Для I и II значения $P_i V^*/E^*$, представляющие кажущийся конфигурац. вклад, меньше 0,5, где P_i , V^* и E^* — соотв. внутреннее давл., объем активации и внутр. энергия активации. Конфигурац. энтропия и/или внутр. энергия определяют молек. подвижность в I, а также в II и III. Обнаруженная несостоятельность теорий свободного объема для описания подвижности в этих жидкостях обусловлена неэффективным пространством между молекулами, а не внутримолек. конформац. степенями свободы. Характерными факторами, определяющими подвижность в молек. жидкостях, м. б. конфигурац. внутр. энергия и конфигурац. энтропия в обл. пониженной плотности при отсутствии сильных межмолек. вз-вий. Теории свободного объема удовлетворительно описывают подвижность в жидкостях, состоящих из малых сферич. молекул или их смесей, при пониженных давлениях.

И. Е. Кузнец

$C_4C_6H_2$

и др.

Хлорбензолы

1991

21 Б3023. Термодинамическое изучение хлорбензолов. Etude thermodynamique des chlorobenzènes / Sabbah R., An Xu Wu // Thermochim. acta.— 1991.— 179.— С. 81—88.— Фр.; рез. англ.

Методом ДТА и из калориметрич. измерений определены т. пл., $\Delta_{fus}H$ и $\Delta_{sub}H$ при 298,15 К, составившие для тетрахлорбензолов 1,2,3,4- $Cl_4C_6H_2$ $319,68 \pm 0,03$ К; $16,96 \pm 0,06$; $78,83 \pm 0,22$; 1,2,4,5- $Cl_4C_6H_2$ $412,59 \pm 0,07$ К; $26,94 \pm 0,26$; $83,20 \pm 0,31$; 1,2,3,5- $Cl_4C_6H_2$ $323,77 \pm 0,01$ К; $18,32 \pm 0,05$; $79,56 \pm 0,32$; для пентахлорбензола $357,00 \pm 0,03$ К; $20,10 \pm 0,26$; $87,12 \pm 0,36$; для гексахлорбензола $502,02 \pm 0,01$ К; $25,18 \pm 0,37$; $90,50 \pm 0,19$ кДж/моль соотв. С использованием лит. данных для термодинамич. параметров др. хлорбензолов рассмотрены различия между значениями термодинамич. функций изомеров и особенности молек. взаимодействия в хлорбензолах.

Ж. Г. Василенко

$T_m, \Delta H_m, \Delta H_s$

Х. 1991, № 21

C_6HCl_5

1991

Sabbah Raphaël,
An Xu Wu.

$T_m, \Delta H_m, T_{CAT} 91: 22$ ères
 $\Delta H_v, \Delta H_s$ journées calorim.
et ● anal. therm.,
Paris, 27-29 mai,

1991 / Assoc. Fr. calorim. et
anal. therm. (AFCAT). Mar-
seille, 1991. C. 209-210.

(esp. $C_6H_2Cl_4$; I)

$C_6H_2Cl_4$

1991

14 Б3021. Термодинамическое исследование хлорбензолов. Etude thermodynamique des chlorobenzènes / Sabbah Raphaël, An Xu Wu // JCAT 91: 22^{èmes} journées calorim. et anal. therm., Paris, 27—29 mai, 1991 / Assoc. Fr. calorim. et anal. therm. (AFCAT).— Marseille, 1991.— С. 209—210.— Фр.

$T_m, \Delta H_m, \Delta H_v,$
 ΔH_f

Приведены т-ра тройной точки, К, энтальпия сублимации $\Delta_{sub}H$ 298 К, кДж/моль и энтальпия плавления $\Delta_{var}H$, кДж/моль хлорбензолов различного состава и строения по ранним публикациям авторов: 1,2,3,4-тетрахлорбензол $319,68 \pm 0,03$, $78,83 \pm 0,22$ и $16,96 \pm 0,06$; 1,2,4,5-тетрахлорбензол $412,59 \pm 0,07$, $83,20 \pm 0,31$ и $24,94 \pm 0,26$; 1,2,3,5-тетрахлорбензол $323,77 \pm 0,01$, $79,56 \pm 0,32$ и $18,32 \pm 0,05$; пентахлорбензол $357,00 \pm 0,03$, $87,12 \pm 0,36$ и $20,10 \pm 0,26$; гексахлорбензол $502,02 \pm 0,01$, $90,50 \pm 0,19$ и $25,18 \pm 0,37$. Библ. 14.

Л. А. Резницкий

42

X. 1992, N 14

C_6HCl_5, C_6Cl_6

С6Н6Cl3

1991

18 Б3013. Энтальпии плавления и сублимации γ -изомера гексахлорциклогексана. Enthalpies de fusion et de sublimation de l'isomère γ d'hexachlorocyclohexane / Sabbah R., Wu An Xu // Thermochim. acta.— 1991.— 178.— С. 339—341.— Фр.; рез. англ.

Методом ДТА найдена величина $\Delta_{fus}H$ для γ -изомера гексахлорциклогексана. В калориметре Тиана—Кальве с ячейкой Кнудсена определена T_{tr} тройной точки и величина $\Delta_{sub}H$ при 337,6 К этого соединения. Величины $\Delta_{fus}H$, $\Delta_{sub}H$ (298,15 К) и T_{tr} составили $25,93 \pm 0,25$; $90,82 \pm 0,72$ кДж/моль и $386,38 \pm 0,01$ К.

($\Delta H_m, \Delta H_v$)

X. 1991, N 18

γ -C₆H₆Cl₆

1991

114: 254906c Enthalpies of fusion and sublimation of γ -hexachlorocyclohexane. Sabbah, Raphael; An, Xu Wu (Cent. Thermodyn. Microcalorim., CNRS, 13003 Marseille, Fr.). *Thermochim. Acta* 1991, 178, 339-41 (Fr). The heats of fusion (by DTA measurements) and of sublimation (by using a Tian-Calvet calorimeter and a Knudsen effusion cell) at 337.6 K and the triple point temp. of γ -hexachlorocyclohexane were detd. Using heat capacity measurements, it was possible to calc. the value of the enthalpy of sublimation of γ -hexachlorocyclohexane at 298.15 K.

(C_p , ΔH_m , ΔH_s)

C.A. 1991, 114, N 26

C₁₀H₇Cl

1991

114: 151665u Molar heat capacities of 2-chloronaphthalene at temperatures between 5 K and 370 K. Van Miltenburg, J. C.; Verdonk, M. L. (Chem. Thermodyn. Group, State Univ. Utrecht, 3584 CH Utrecht, Neth.). *J. Chem. Thermodyn.* 1991, 23(3), 273-9 (Eng). The molar heat capacities of 2-chloronaphthalene were detd. at 5-370 K by adiabatic calorimetry. Values for std. thermodyn. properties are tabulated to 370 K. The molar enthalpy of fusion was found to be 14004 ± 15 J/mol. The melting temp. is 331.17 ± 0.005 K. The compd. has an extended solid-to-solid transition between 260 and 309 K. The temp. drift during the solid-to-solid transition indicates that the transition consists of two different areas with different relaxation mechanisms.

(p, 5-370K)

C.A. 1991, 114, N16

С6 Н5 СС

1992
22 БЗ179. Калориметрическое изучение бинарных смесей, содержащих хлорбензол и линейные или циклические эфиры. Calorimetric study of binary mixtures containing chlorobenzene + linear and cyclic ethers /Comelli Fabio, Francesconi Romolo //Thermochim. acta .—1992 .—196 ,№ 1 .—С. 177—180 .—Англ.

При температуре 298,15 К и атм. давл. в проточном микрокалориметре измерены и табулированы избыточные мол. энтальпии (H^E) бинарных смесей хлорбензола с оксоланом, оксаном, 1,4-диоксаном, диметоксиметаном и 1,2-диметоксиэтаном во всем интервале составов. Представлено ур-ние типа Редлиха — Кистера, описывающее зависимость эксперим. значений H^E от состава смесей. Рассчитаны и табулированы коэф. этого ур-ния для изученных смесей. Отмечено, что для всех систем значения H^E отрицат., причем для диэфиров экзотермич. эффект является более сильным, чем для соотв-щих моноэфиров. Результаты интерпретированы в рамках межмолек. вз-вий. Оценено влияние структурных параметров на H^E . И. Е. Кузинец

(Δ H mix)

Х.1993, №22-24

(CH₃)₃Cl

1992

Dibble T. S.,

Bartell L. S.

Ttr

J. Phys. Chem.

1992, 96, N2, c. 8603-10

ccr. Se Fe (I)

$(\text{CH}_3)_3\text{CCl}$

1992

Dibble T. S.

Bartell & S.

T_{12}

J. Phys. Chem. 1992,
96, N 21. C. 8603-8610.

(see.  SeF_6 ; I)

$\text{ClMCCl}(\text{CH}_2\text{Cl})$

1992

Durig J. R., Costner T. G.
et al.

($\Delta_{\text{t2}} H$) J. Phys. Chem. 1992,
96 (18), 7194-202.

(see $\text{ClMCCl}(\text{CH}_2\text{Cl}); \text{I}$)

Cy H8 Cl2

1992

12 Б3017. Энтальпии испарения пяти дихлорбутанов /He Jun, An Xu-Wu Hu, Ri-Heng //Huaxue xuebao = Acta chim. sin. — 1992 .— 50 ,№ 10 .— С. 943—947 .— Кит. ;рез. англ.

С использованием калориметра испарения LKB-8721-1 при 25° С определены энтальпии испарения 2,2-, 2,3-, 1,2-, 1,3- и 1,4-дихлорбутанов, равные $36,29 \pm 0,06$; $38,43 \pm 0,07$; $40,14 \pm 0,07$; $42,21 \pm 0,05$ и $46,48 \pm 0,18$ кДж/моль соотв. Обсуждена связь между энтальпией испарения и нормальной т. кип., числом атомов углерода между двумя атомами хлора в молекуле дихлорбутана и энергией диполь — дипольного межмолек. взаимодействия.

В. Ф. Байбуз

(CH₂)

Х. 1993, № 12

C6 H11 Cl

1992

9 БЗ013. Термодинамические свойства и конформационные переходы хлорциклогексана. Thermodynamic properties and conformational transitions of chlorocyclohexane /Kabo G. J., Dickiy V. V., Kozyro A. A., Sevruck V. M., Krasulin A. P. //12th IUPAC Conf., Chem. Thermodyn. [and] Jt Meet 47th Calorim. Conf., Snowbird, Utah, 16—21 Aug., 1992: Program, Abstr., and Repts.—S. I., [1992].—C. 330—331.—Англ.

В вакуумном адиабатич. калориметре в интервале т-р 5—304 К измерены значения C_p хлорциклогексана (I). В диф. микрокалориметре определена $\Delta_{vap} H^\circ$. Величины т-р и $\Delta_{tr} H^\circ$ двух твердофазных переходов и плавления составили: 120 К $50,5 \pm 0,2$; 220,4 К $8010,7 \pm 2,9$; 229,34 К $2042,2 \pm 4,4$ Дж/моль. С шагом 50 К табулированы сглаженные величины C_p/R , $[S^\circ(T) - S^\circ(0)]/R$; $[H^\circ(T) - H^\circ(0)]/RT$ и Φ°/R , составившее при 50 К 5,073; 3,964; 2,446 и 1,518; 150 К 11,12; 12,44; 6,336; 6,104; 298,15 К 21,48; 29,13; 15,73 и 13,40 соотв. В интервале т-р 296—320 К т-рная зависимость $\epsilon_{vap} H^\circ$ выражена ур-нием $\epsilon_{vap} H^\circ$ (Дж/моль) = $= 63392,9 - 68,70 T$. По данным низкот-рой ИКС крист.

(9) 

Х. 1993, № 9

C6 H11 Cl (м. р. 2)

фаза при t -рах $> 220,4$ К и жидк. фаза содержат смесь экваториальных и аксиальных «кресло»-конформеров, крист. фазы при t -рах $< 220,4$ К состоят из экваториального конформера. Расчеты методом молек. механики с использованием программы ММ2 показывают, что твист-конформер имеет энергию на 23—26 кДж/моль больше, чем «кресло»-конформер. В интервале t -р 100—1000 К с учетом конформац. состава рассчитаны значения термодинамич. функций I в состоянии идеального газа. Расчетные и эксперим. величины S° составили при 298,15 К (345,68 и 348,01; при 353,15 К 368,18 и 388,66 Дж/моль $\cdot$ К.

Ж. Г. Василенко

CaH₂Cl₄

1992

22 БЗ180. Избыточные энтальпии смешения 1,1,2,2-тетрахлорэтана с ацетоном, н-дибутиловым эфиром, ацетонитрилом и диметилсульфоксидом. The excess enthalpies of mixing of 1,1,2,2-tetrachloroethane with acetone, n-dibutylether, acetonitrile and dimethylsulphoxide /Pathak Gopal, Tripathi Atri Deo, Pradhan Shirish //Thermochim. acta .— 1992 .— 197 ,№ 2 .— С. 329—333 .— Англ.

При температуре 308,15 К калориметрич. методом измерены и табулированы избыточные энтальпии (H^E) бинарных смесей 1,1,2,2-тетрахлорэтана (I) с ацетоном (II), н-дибутиловым эфиром (III), ацетонитрилом (IV) и ДМСО (V) во всем интервале составов. Представлено уравнение, описывающее зависимость эксперим. значений H^E от состава смесей. Рассчитаны и табулированы параметры этого уравнения. Отмечено, что для всех систем значения H^E отрицат., что объясняется образованием Н-связи между атомом Н I и протоноакцепторной группой сорпителя. Экзотермичность смесей уменьшается в ряду: $V > II > IV > III$. Предположено, что в изученных системах образуются комплексы состава 1:1. Оценены энергии Н-связи в этих комплексах, значения к-рых уменьшаются в том же порядке, что и величины H^E . И. Е. Кузинец

(окмх)

X. 1993, № 22-24

C₆H₆ Cl

1993

1 B3013. Некоторые наблюдения, касающиеся π-комплексов атомов Cl с бензолом. Some observations on the π-complex of Ce atoms with benzene /Benson Sidney W. //J. Amer. Chem. Soc. .—1993 .—115 ,№ 15 .—С. 6969—6974 .—Англ.

Рассмотрено влияние бензола, увеличивающего селективность перв. атом С/трет. атом С, в цепных процессах фотохлорирования алканов (ФА). Проанализированы лит. термодинамич. параметры и кинетич. данные для образования π-комплекса по схеме $Cl + PhH \rightleftharpoons Ph-H:Cl$ (I). Оценена роль радикала 6-хлорциклогексадиенил (II) в процессе ФА. Указано, что II находится в равновесии с I. Рассмотрено также влияние O₂ на ФА с точки зрения вз-вия II с O₂. Сравнены селективности C₆H₆ и Py в процессе ФА. Указано, что по кинетич. данным увеличение селективности ФА в присутствии бензола может быть связано с I. Рассмотрено значение эффективной конц-ии C₆H₆ и алкана вокруг свободных атомов Cl в процессе ФА.

термод.
параметры

X. 1994, N 1

Представлена схема расчета, позволяющая применить модель регулярных р-ров для оценки необходимых термодинамич. параметров смеси газов в процессе фотохлорирования алканов. Ж. Г. Василенко



C₄H₉Cl

1993

6 БЗ070. Исследования методом молекулярной динамики твердотельных фазовых переходов. Вывод низкотемпературной фазы хлорида трет-бутила. Molecular dynamics studies of solid-state phase transitions. I. Inference of low-temperature phase of tert-butyl chloride / Chen J., Bartell L. S. // J. Phys. Chem. —1993 —97, № 41 —С. 10645—10648 —Англ.

В диапазоне т-р 180—50 К методом молек. динамики промоделировано фазовое проведение кластера из 188 молекул хлорида трет-бутила. Найдено, что кластер с тетрагон. структурой стабилен в диапазоне т-р 140—90К, а при дальнейшем охлаждении он начинает переходить в новую крист. фазу. В объемной фазе в-ва этот переход идет при 183 К. Переход в монокл. фазу с пр. гр. $P2_1/m$ завершается при 50 К (а 6,16, б 7,20, с 6,16А, α 90, $\beta \approx 90$, γ 90°). Обратный переход в тетрагон. фазу идет при 120 К. Вычисленная из молек. координат порошковая дифрактограмма удовлетворительно совпадает с лит. эксперим. данными по электроно- и нейтронографии.

В. А. Ступников

(T_{tz})

X. 1994, № 6

Хлорцикло-
пентан

C-Cl-H соєдн.

1993

120: 16800t Thermodynamic properties and pseudorotation of chlorocyclopentane. Diky, V. V.; Kabo, G. J.; Kozyro, A. A.; Krasulin, A. P.; Sevruck, V. M. (Chem. Dep., Minsk, Belarus 220080), *J. Chem. Thermodyn.* 1993, 25(10), 1169-81 (Eng). The results of a study of chlorocyclopentane in different phase states are given. The heat capacity of cryst. and liq. chlorocyclopentane was measured by vacuum adiabatic calorimetry (6-301 K). One solid-to-solid transition $cr(II) \rightarrow cr(I)$ at 169.35 K was discovered. The enthalpy of this transition is 7631 ± 18 J/mol. The heat of fusion at 180.0 K, and 637.3 ± 4.4 J/mol was obtained from the calorimetric investigations. The vaporization enthalpy from 299 to 311 K was detd. with a heat-conduction differential microcalorimeter: 38.79 ± 0.40 kJ/mol. The conventional molar entropy of gaseous chlorocyclopentane $S_m^\circ(g, 298.15\text{ K}) = 339.54 \pm 1.7$ J/K·mol was calcd. on the base of these calorimetric data. It was found by recording IR spectra that the liq. and crystal I consist of a mixt. of the axial and equatorial conformers as a 'semi-chair'. The crystal II contains a considerably smaller fraction of the equatorial conformer. The spectral study shows that the residual entropy at 0 caused by the mixing of conformers is negligible. The std. thermodyn. properties of chlorocyclopentane in the gaseous state ($T = 100$ to 1000 K) were calcd. by using mol. and spectral quantities. The statistical results are in the best accord with exptl. values where the conformational transitions are considered as a hindered rotation. The std. molar thermodyn. values of liq. and gaseous chlorocyclopentane at 298.15 K were detd.

$T_{\pm 2}, \Delta_m H,$

$\Delta_{\pm 2} H, S_m^\circ(g, 298.15)$

C.A. 1994, 120, IV 2

C₄H₈Cl₂

1993

120: 87930w Measurements of enthalpies of formation of 2,3-dichlorobutane in gaseous state. He, Jun; An, Xuwu; Hu, Riheng (Inst. Chem., Acad. Sin., Beijing, Peop. Rep. China 100080). *Huaxue Xuebao* 1993, 51(11), 1059-65 (Ch). Two samples of pure meso- and d, l-2,3-dichlorobutanes were obtained from their mixt. by fractional distn., and their enthalpies of vaporization at 25° were measured by using an LKB-8721-3 vaporization calorimeter, they are 38.41 ± 0.07 (meso-) and 39.73 ± 0.05 (d, l-) kJ/mol, resp. A mixt. sample with (meso-/ d, l-) = 1.34/1 was used for combustion expts., its enthalpies of combustion at 25° were detd. by using a rotating bomb combustion calorimeter with a tantalum lined bomb, as -2519.74 ± 1.06 kJ/mol. By using the literature's enthalpies of isomerism between the liq. meso- and d, l-2,3-dichlorobutanes, -1.13 ± 0.21 kJ/mol, measured by the equil. method, enthalpies of combustion of meso- and d, l-2,3-dichlorobutanes were obtained. Then enthalpies of formation of both in gaseous state were derived as, -202.34 ± 1.72 (meso-) and -202.15 ± 1.72 (d, l-) kJ/mol, resp. According to the following equation: $a, b\text{-C}_4\text{H}_8\text{Cl}_2(\text{g}) + n\text{-C}_4\text{H}_{10}(\text{g}) = a\text{-C}_4\text{H}_9\text{Cl} + b\text{-C}_4\text{H}_9\text{Cl} + \Delta H_r$; the enthalpies of reaction are derived as $+5.3$ (meso-) and $+5.5$ (d, l-) kJ/mol, which are closed with that of 1,2-dichlorobutane. The det. enthalpies of formation of the meso- and d, l-2,3-dichlorobutanes also coincide with the calcn. results of the authors' "Electrostatic Bond Energy Scheme".

($\Delta_f H$)

C.A. 1944, 120, 28

$C_2Cl_4H_2$

1993

119: 56745q Critical evaluation of normal boiling points: principle and example. Horvath, Ari L. (ICI Chem. and Polym. Ltd., Runcorn/Cheshire, UK). *Chemosphere* 1993, 26(9), 1579-94 (Eng). The general methods and principles used in the critical evaluation of the normal b.ps. are reviewed in some detail. The principal perspective of this exercise may be summarized as follows: collection of literature data, selection and evaluation of data, weighting the numerical values, finding relations for consistency checks, and recommendation of the selected values. The method is illustrated for 1,1,1,2-tetrachloroethane.

(T_b)

(4)

19

Точка кипения (метод оценки)

C. A. 1993, 119, N 6

C₆H₅Cl

1993

7 БЗ008 ДЕП. Анализ термодинамических свойств хлорбензола для построения диаграммы энтальпия — энтропия /Панфилович К. Б., Бударин П. И., Глинкин В. А. ;Казан. гос. технол. ун-т .—Казань ,1993 .—38 с. :ил. .—Библиогр.: 45 назв. .—Рус. .—ДЕП. в ВИНТИ 22.12.93 ,№ 3144—В93

Обзор литературы по термодинамич. и теплофизич. св-вам хлорбензола. Выполнены расчеты термодинамич. св-в на ЭВМ. Построена $k-s$ диаграмма хлорбензола.

анализ
термодинам.
св-в

X.1994, N 7

$C_2H_2Cl^+$

1993

2 БЗ025. Изомеры на [энергетической] поверхности $C_2H_2Cl^+$. Расчет энтальпий образования ненасыщенных углеводородов и монохлорпроизводных. Isomers on the $C_2H_2Cl^+$ surface. Calculated enthalpies of formation for unsaturated hydrocarbons and monochloro derivatives /Rodriguez Christopher F., Bohme Diethard K., Hopkinson Alan C. //J. Org. Chem. .—1993 .—58 ,№ 12 .—С. 3344—3349 .—Англ.

(ΔH_f°)

Для описания р-ций электрофильного присоединения галогенов к алкинам неэмпирич. методом МО оценены оптим. геометрия и относит. энергии шести изомеров катиона $C_2H_2Cl^+$. При расчете на базисе SCF/6-31G(d,p) получены четыре минимума на энергетич. ПВ $C_2H_2Cl^+$, соотв-щие изомерам 1-хлорвинил-катион (I), хлорений-ион (II), 2-хлорвинил-катион (III) и хлорпротонированный хлорацетилен. Учет электронной корреляции в методе MP2/6-311G(d,p) указывает на один минимум, связанный с III, и на подобие переходной структуры при превра-

Х. 1994, № 2

щении I—II изомеру III. При расчетах MP4/6-311G (2df,p)//MP2/6-311 (d,p) I по энергии расположен на 19,4 ккал/моль ниже II, с величиной энергетич. барьера перехода между ними 10,7 ккал/моль сверх энергии II. Рассчитанное средство к протону хлорацетилена найдено равным 169,0 ккал/моль. Расчетные на основе MP4SDTQ/ /6-311(2df,p) значения энтальпий образования C_2H_4 , C_2H_3Cl , $C_2H_3^+$, $C_2H_5^+$ и двух изомеров $C_2H_4Cl^+$ отличаются от лит. эксперим. данных на 2 ккал/моль, рассчитанные ΔH^0 при 298 К газ. I и II составили 248,1 и 268,1 ккал/моль.

Ж. Г. Василенко



Монохлоралканы (из. 204)

1993

119: 257411b Standard chemical thermodynamic properties of monochloroalkanes. Wong, David K.; Kretkowski, Douglas A.; Bozzelli, Joseph W. (Dep. Chem. Eng. Chem., New Jersey Inst. Technol., Newark, NJ 07102 USA). *Ind. Eng. Chem. Res.* 1993, 32(12), 3184-8 (Eng). Improved Benson group values for thermodyn. properties of monochloroalkanes in the ideal gas state were detd. by using literature data of J. B. Pedley et al. (1980), D. R. Stull and the Texas A&M Thermodyn. Research Center, with hydrocarbon group values of Benson, Domalski and Hearing, and Cohen (1976-1992). Thermodyn. properties for representative primary, secondary, and tertiary chloroalkanes were estd. by using the group additivity scheme and the results are compared to the literature data.

(термодинамич-
еск-е)

С.А. 1993, 119, N24

CHCl

1994

Born Monique,
Ingemann Steen, et al.

ΔH_f J. Amer. Chem. Soc.
1994. 116, N 16, C. 7210-
7217.

(cell. CHF; I)

c- C₆H₁₁Cl (K, a)

1994

121: 214338g Thermodynamic properties of crystalline and liquid chlorocyclohexane and inversion of ring. Diky, V. V.; Kabo, G. J.; Kozyro, A. A.; Krasulin, A. P.; Sevruk, V. M. (Inst. Physcial, Chem. Res., Belarussian State Univ., Minsk, Belarus 220050). *J. Chem. Thermodyn.* 1994, 26(9), 1001-13 (Eng). Heat capacity of cryst. and liq. chlrorocyclohexane (c-C₆H₁₁Cl) at T = 5 K to 304 K was measured by vacuum adiabatic calorimetry. Two solid-to-solid transformations were found: at T = 120 K with $\Delta_{tr}H_m = (50.5 \pm 0.5) \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$ and at T = 220.4 K with $\Delta_{tr}H_m = (8010.7 \pm 2.9) \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$. Melting temp. of c-C₆H₁₁Cl is 229.34 K, and $\Delta_{fus}H_m = (2042.8 \pm 4.4) \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$. The enthalpy of vaporization was directly detd. with a heat-conduction differential microcalorimeter: $\Delta_{vap}H_m^\circ(298.15 \text{ K}) = (42.92 \pm 0.62) \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$. Values $\Delta_{OT}S_m(l, 298.15 \text{ K}) = (242.2 \pm 1.0) \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$, $\Phi_m(l, 298.15) = (111.4 \pm 0.5) \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$, and $\Delta_{OT}S_m^\circ(g, 298.15 \text{ K}) = (348.0 \pm 2.3) \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ were calcd. on the base of these. The temp. dependence of $\Delta_{vap}H_m^\circ$ in the temp. range from T = 296 K to 320 K was studied, and $\Delta C_p^\circ(l \text{ to } g)$ was estd. By low-temp. i.r. spectroscopy it was established that the liq. and the crystal I consist of a mixt. of the equatorial and axial-chair conformers, but crystals II and III (at T < 220.4 K) consist of only e-conformer. The

C_p, $\Delta_f H^\circ$,
 $\Delta_f G$

C.A. 1994, 121, v18

conformational anal. of chlorocyclohexane was made by the mol.-mechanics method. Statistical calcns. of std. thermodyn. properties of $\text{c-C}_6\text{H}_{11}$ in the gaseous state were carried out for $T = 100 \text{ K}$ to 1000 K , taking into account conformation compn.: calcd. and exptl. values of C_p° and $S_m^\circ(\text{g})$ at $T = 298.15 \text{ K}$, and $S_m^\circ(\text{g})$ at $T = 353.15 \text{ K}$ are in satisfactory agreement. The following thermodyn. functions of chlorocyclohexane were obtained: $\Delta_f H_m^\circ(\text{g}, 298.15 \text{ K}) = -(164.2 \pm 2.0) \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$; $\Delta_f H_m^\circ(\text{l}, 298.15 \text{ K}) = -(206.9 \pm 2.1) \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$; $\Delta_f G_m^\circ(\text{g}, 298.15 \text{ K}) = -(9.9 \pm 2.5) \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$; $\Delta_f G_m^\circ(\text{l}, 298.15 \text{ K}) = -(21.3 \pm 2.6) \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$.

С-С статьи

1994

23 Б3041. Измерение давления пара нескольких нелетучих хлорорганических продуктов при низких температурах методом насыщения газа. Measurement of the vapor pressure of several low-volatility organochlorine chemicals at low temperatures with a gas saturation method /Wania Frank, Shiu Wan-Ying, Mackay Donald //J. Chem. and Eng. Data .— 1994 .— 39 ,№ 3 .— С. 572—577 .— Англ.

Описан модифицир. метод сорбц. колонны, использующий термосорбцию и ГХ и предназначенный для определения давл. паров малолетучих соединений при t -рах ниже 0°C для давл. до 10^{-6} Па. Возможность применения и точность метода подтверждена результатами измерения давл. паров и теплоты сублимации нафталина при t -рах от -30 до 0°C . Этим методом при t -рах от -30 до 40°C определены давл. паров гексахлорбензола, γ -гексахлорциклогексана, 1,1-бис(4-хлорфенил)-2,2,2-трихлорэтана, 4-моноклорбифенила, 4,4-дихлорбифенила, 2,3,4,5-тетрахлорбифенила и 2,2,4,4,6,6-гексахлорбифенила. T -зная зависимость давл. паров исследованных соединений описывается уравнением $\lg P = A - B/T$. Теплоты сублимации, рассчитанные из эксперим. данных, слабо зависят от t -ры в исследованном t -рном интервале. Библ. 36. В. Ф. Байбуз

Р. ДНЗ

Х. 1994, № 23

c-CHCl(CH₂)₅

123: 351734p Heat capacities of chlorocyclohexane and bromocyclohexane between the temperatures 10 K and 300 K, and phase transitions in the crystalline state for chlorocyclohexane. Kobashi, Kazuhisa; Oguni, Masaharu (Dep. Chem., Tokyo Inst. Technol., Tokyo, Japan 152). *J. Chem. Thermodyn.* 1995, 27(9), 979-90 (Eng). Heat capacities of chlorocyclohexane (CAS[542-18-7]), c-CHCl(CH₂)₅, and bromocyclohexane, (CAS[108-85-0]), c-CHBr(CH₂)₅, were measured with adiabatic calorimeters in the temp. range between T = 8 K and T = 300 K and the std. thermodyn. functions were evaluated. For chlorocyclohexane, temps., molar enthalpies, and molar entropies were detd. to be (220.24 ± 0.03) K, (8.11 ± 0.02) kJ·mol⁻¹, and (36.8 ± 0.1) J·K⁻¹·mol⁻¹, resp., for the crystal-to-(orientationally disordered crystal) (denoted by II-to-I) phase transition; and (228.01 ± 0.05) K, (2.02 ± 0.01) kJ·mol⁻¹, and (8.9 ± 0.1) J·K⁻¹·mol⁻¹, resp., for fusion. Moreover, two other heat-capacity anomalies were found at T = (118.6 ± 0.1) K and T = (148 ± 1) K and are suggested to be successive (denoted by IV-to-III and III-to-II, resp.) phase transitions of the superstructural commensurate-to-incommensurate-to-(normal commensurate) phase-sequence type. Molar entropies of the IV-to-III and III-to-II phase transitions were estd. to be (0.7 ± 0.1) J·K⁻¹·mol⁻¹ and (0.05 ± 0.01) J·K⁻¹·mol⁻¹, resp. Large orientational disorder amounting to S_m^o ≈ 4.6 J·K⁻¹ was suggested to exist even in phase II of the "globular mol." chlorocyclohexane. Bromocyclohexane, on the other hand, displayed only fusion at T = (216.87 ± 0.03) K. The molar enthalpy and molar entropy of fusion were detd. to be (10.79 ± 0.03) kJ·mol⁻¹ and (49.8 ± 0.1) J·K⁻¹·mol⁻¹, resp.

1995

(4)

IV

(4)

C.A. 1995, 123
N26

1995

F: C₆H₁₁Cl

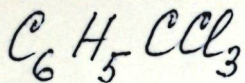
P: 1

12Б321. Теплоемкость хлорциклогексана и бромциклогексана при температурах от 10 до 300К и фазовые переходы в кристаллическом состоянии для хлорциклогексана. Heat capacities of chlorocyclohexane and bromocyclohexane between the temperatures 10K and 300K, and phase transitions in the crystalline state for chlorocyclohexane / Kobashi Kazuhisa, Oguni Masaharu // J. Chem. Thermodyn. - 1995. - 27, N 9. - С. 979-990. - Англ.

Теплоемкость хлорциклогексана (I) и бромциклогексана (II) измерена в адиабатич. калоримере при т-рах 8-300К, и по результатам измерений оценены стандартные термодинамич. функции. Для I т-ра, молярная энтальпия и молярная энтропия равны соотв. $(220' \pm 0,03)K$, $(8,11' \pm 0,02) Kдж/моль$ и $36,8' \pm 0,1 Дж K\{-1\}моль\{-1\}$, для фазового перехода кристалл-ориентационно разупорядоченный кристалл (обозначаемого как фаза II к фазе I) и для плавления соотв. $(228,01' \pm 0,05)K$, $(2,02' \pm 0,01) Kдж/моль$ и $8,9' \pm 0,1 Дж*K\{-1\}моль\{-1\}$. Две других аномалии

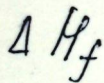
X. 1996, N12

теплоемкости найдены при $T=118,6' \pm 0,01$ и $148' \pm 1$ К и обозначены последовательно как фазовые переходы от IV к III и от III к II. Молярная энтропия переходов V-III и III-II равна соотв. $0,7' \pm 0,1$ и $0,05' \pm 0,01$ Дж*К⁻¹*моль⁻¹. Для I обнаружена также большая ориентац. неупорядоченность с энтропией $4,6$ Дж*К⁻¹*моль⁻¹, существующая в фазе II для "глобулярных" молекул. С другой стороны, для II обнаружен только переход плавления при $T=(216,87' \pm 0,03)$ К. Молярная энтальпия и энтропия плавления II равны $10,79' \pm 0,03$ Кдж/моль и $49,8' \pm 0,1$ Дж*К⁻¹*моль⁻¹ соответственно.. Ср, 8-300К, ДНпл.



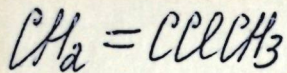
1995

Патина М.С., Тиременова С.М. и др.



Ж. физ. химии. 1995.
69, N 12. С. 2148-2157.





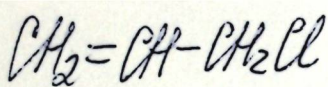
(cm 38553)

1997

Brenda Thies Colegrove,
Tyler B. Thompson,

ΔH_f^{298}
ab initio
pacer

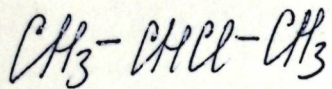
J. Chem. Phys., 1997,
106 (4), 1480



(DM 38553)

1997

ΔH_f° 298,
at initio
pariem
Brenda Thies Colegrove,
Tyler B. Thompson,
J. Chem. Phys., 1997,
106 (4), 1480



(om 38553)

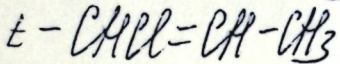
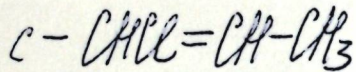
1997

Brenda Thies Colegrove,
Tyler B. Thompson.,

ΔH_f^{298}

ab initio
pavem

J. Chem. Phys., 1997,
106 (4), 1480



(OM 38553)

1997

Brenda Thies Colegrove,
Tyler B. Thompson,

ΔH_f^{298}

at initio
parum

J. Chem. Phys., 1997,
106 (4), 1480.

$\text{CH}_2\text{Cl}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ (Om. 38553) 1997

Brenda Thies Colegrove,
Tyler B. Thompson,

ΔH_f^{298}

ab initio
pavem

J. Chem. Phys., 1997,
106 (4), 1480.

$C_6H_{11}Cl$
(Kp, a.)

1997

127: 9642j Differential thermal analysis and (p, V_m, T) -data of liquid and solid chlorocyclohexane up to 280 MPa. Jenau, M.; Wurflinger, A. (Institute Physical Chemistry II, Ruhr-University, D-44780 Bochum; Germany). *Z. Phys. Chem. (Munich)* 1997, 199(2), 255-265 (Eng), Oldenbourg. DTA and (p, V_m, T) -measurements were performed on cryst. and liq. chlorocyclohexane ($C_6H_{11}Cl$) under pressures ≤ 280 MPa and at 220-300 K. The vol. changes accompanying the crystal-to-(orientationally disordered crystal) phase transition (denoted by II-to-I) and fusion were calcd. from the (p, V_m, T) -data, as well as the corresponding enthalpy and entropy changes using the Clausius-Clapeyron equation. The vol. changes for both transitions decrease with increasing pressure. The enthalpy change for the II-to-I phase transition increases while a small decreasing with increasing pressure was found for the fusion. The entropy sepn. model was used to est. the configurational and vol.-dependent terms of the entropy changes at the phase transitions.

$p, V_m, T, \Delta_{t2},$

$\Delta_{t2}S, \Delta_{t2}H$

C. A. 1997, 127, N1

CHCl

[Dm 38826]

1997

John C. Pautsma, et al.,

ДЭН,
жечерен.
и меорем.
и ссчепот.

J. Phys. Chem., 1997,
A101, 5327-36.

CHCl

1997

127: 141327q Absolute Heats of Formation of CHCl, CHF, and CClF. A Gas-Phase Experimental and G2 Theoretical Study. Poutsma, John C.; Paulino, Jose A.; Squires, Robert R. (Department of Chemistry, Purdue University, West Lafayette, IN 47907 USA). *J. Phys. Chem. A* 1997, 101(29), 5327-5336 (Eng), American Chemical Society. The 298 K heats of formation of the singlet halocarbenes CHCl (1), CHF (2), and CClF (3) were detd. from measurements of the chloride dissocn. energies of CHCl_2^- (1a), CHClF^- (2a), and CCl_2F^- (3a) and the gas-phase acidities of CH_2Cl_2 (1b), CH_2ClF (2b) and CHCl_2F (3b), resp. Anal. of the energy-resolved collision-induced dissocn. cross sections for 1a, 2a, and 3a obtained with a flowing afterglow-triple quadrupole instrument gives the 298 K chloride dissocn. enthalpies: 37.0 ± 2.7 , 22.7 ± 2.2 , and 25.2 ± 1.5 kcal/mol, resp. Proton transfer equil. and acid-base bracketing measurements carried out in the flow tube give gas-phase acidities, ΔH_{acid} , for 1b, 2b, and 3b of 377.6 ± 0.7 , 385.9 ± 0.3 , and 361.3 ± 2.0 kcal/mol, resp. The chloride dissocn. enthalpies and gas-phase acidities are combined in simple thermochem. cycles to derive 298 K heats of formation for 1, 2, and 3 of 80.4 ± 2.8 , 34.2 ± 3.0 , and 7.4 ± 3.2 kcal/mol, resp. Crit. comparisons of these results with the

(Δ_{SH})

(42)

CHF, CClF

C.A. 1997, 127, N10

results of prior exptl. measurements and with the results of G2 MO calcns. lead to the following recommended heats of formation (in kcal/mol): $\Delta H_{f,298}(\text{CHCl}) = 78.0 \pm 2.0$, $\Delta H_{f,298}(\text{CHF}) = 34.2 \pm 3.0$, $\Delta H_{f,298}(\text{CFCl}) = 7.4 \pm 3.2$, $\Delta H_{f,298}(\text{CCl}_2) = 55 \pm 2.0$, and $\Delta H_{f,298}(\text{CF}_2) = -44.0 \pm 2.0$. The recommended heats of formation are used to derive other thermochem. data, including halocarbene proton affinities, $\text{PA}(\text{CXY})$, halomethyl radical acidities, $\Delta H_{\text{acid}}(\text{CHXY})$, and C-H bond strengths for halomethyl radicals, $\text{DH}_{298}(\text{H-CXY})$. An excellent linear correlation is found to exist between the divalent state stabilization energy (DSSE) of the halocarbenes and the measured or calcd. singlet-triplet splittings, heats of formation chloride dissocn. energies.

CHCl

1997

22Б332. Абсолютные теплоты образования CHCl , CHF и CClF . Газофазное экспериментальное исследование и исследование на основе теории G2. Absolute heats of formation of CHCl , CHF , and CClF . A gas-phase experimental and G2 theoretical study / Poutsma John C., Paulino Jose A., Squires Robert R. // J. Phys. Chem. A [J. Phys. Chem.] .— 1997.— 101, № 29.— С. 5327–5336.— Англ. Место хранения ГПНТБ России

Для синглетных галогенкарбенов CHCl , CHF и CClF определены при $t_{\text{ре}} 298 \text{ K}$ теплоты образования из измерений энергий диссоциации CHCl_2^- , CHClF^- и CCl_2F^- и газофазной к-тности CH_2Cl_2 , CH_2ClF и CHCl_2F соотв. Получены значения теплот образования (в ккал/моль): $\Delta_f H^\circ(\text{CHCl}) = 80,4 \pm 2,8$; $\Delta_f H^\circ(\text{CHF}) = 34,2 \pm 3,0$ и $\Delta_f H^\circ(\text{CClF}) = 7,4 \pm 3,2$. Крит. сравнение этих значений с результатами ранее проведенных эксперим. измерений и с результатами расчетов методом МО привели к следующим рекомендованным

 $\Delta_f H$

□

(44)

X. 1997, N22

значениям теплот образования (в ккал/моль) при t -ре 298 К: $\Delta_f H^\circ(\text{CHCl})=78,0 \pm 2,0$; $\Delta_f H^\circ(\text{CHF})=34,2 \pm 3,0$; $\Delta_f H^\circ(\text{CClF})=7,4 \pm 3,2$; $\Delta_f H^\circ(\text{CCl}_2)=55,0 \pm 2,0$ и

$\Delta_f H^\circ(\text{CF}_2)=-44,0 \pm 2,0$. Рекомендованные значения теплот образования использованы для получения др. термодим. данных, включая сродство к протону для галогенкарбенов, к-тности и прочности связи C—H для галогенметильных радикалов. Показано, что существует линейная корреляция между энергией стабилизации двухвалентного состояния галогенкарбенов и измеренным или рассчитанным синглет-триплетным расщеплением. Библ. 70. В. Ф. Байбуз

$C_2H_6-n Cl_n$
 $C_2H_5-n Cl_n^+$
 $CH_3-n Cl_n^+$

Dm. 39068

1997

Jerzy Cioslowski,
Guanghua Liu et al.

memo-
rium.
C-C, C-H
и C-Cl
связь.

J. Am. Chem. Soc.,
1997, 119, 11452-
11457.

Клоповые мушки

1997

128: 235757c Standard molar enthalpies of formation of some chloropyridines. Ribeiro da Silva, Manuel A. V.; Matos, M. Agostinha R.; Amaral, Luisa M. P. F. (Centro Investigacao Quimica, Dep. Chem., Fac. Sci., Univ. Porto, Oporto, Port. P-4150). *J. Chem. Thermodyn.* 1997, 29(12), 1535-1543 (Eng), Academic Press Ltd.. The std. ($p^{\circ}=0.1$ MPa) molar enthalpies of formation $\Delta_f H_m^{\circ}$ for liq. 2- and 3-chloropyridine, and cryst. 2,3-, 2,5-, 2,6-, and 3,5-dichloropyridine were derived from the std. molar enthalpies of combustion $\Delta_c H_m^{\circ}$ at $T = 298.15$ K in oxygen using rotating-bomb combustion calorimetry. The reaction products were: $\text{CO}_2(\text{g})$, $\text{N}_2(\text{g})$, and $\text{HCl} \cdot 600\text{H}_2\text{O}(\text{l})$. The std. molar enthalpies of vaporization, or sublimation $\Delta H_{\text{cr,l}}^{\circ}$, ΔH_m° at $T = 298.15$ K were measured by Calvet microcalorimetry. The results are as follows: $-\Delta_c H_m^{\circ}(\text{cr,l})/(\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$ and $\Delta_{\text{cr,l}}^{\circ} H_m^{\circ}/(\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$ for 2-chloropyridine (2-ClPy) 2616.3 ± 1.2 and 51.0 ± 1.2 ; 3-chloropyridine (3-ClPy) 2622.5 ± 1.1 and 47.9 ± 1.1 ; 2,3-dichloropyridine (2,3-ClPy) 2459.5 ± 1.3 and 73.5 ± 3.1 ; 2,5-dichloropyridine (2,5-ClPy) 2447.8 ± 0.6 and 67.1 ± 2.0 ; 2,6-dichloropyridine (2,6-ClPy) 2442.9 ± 0.6 and 72.0 ± 1.6 ; 3,5-dichloropyridine (3,5-ClPy) 2458.4 ± 0.7 and 67.3 ± 1.9 . The derived std. molar enthalpies of formation in the gaseous state are shown to fit a group additivity scheme.

($\Delta_f H$)

C.A. 1998, 128, N19

$\text{CH}_3\text{Cl} \cdots \text{ClCH}_3^+$ [Om. 39247] 1998

Sam P. de Visser, Leo J.
de Koning et al.,

J. Am. Chem. Soc., 1998,

120, ^{N7}, 1517 - 1522.

Chemical and Thermodynamic

Properties of Methyl Chloride
Dimer Radical Cations in
the Gas Phase.

1998

F: CHCl

P: 3

22Б1444. ИК-спектры и геометрия галогенкарбенов в основном состоянии. IR spectra and geometry of halocarbenes in ground state. A theoretical study / Senchenya I. N., Menchikov L. G., Nefedov O. M. // 6 Междунар. конф. "Химия карбенов и родств. интермедиатов", Санкт-Петербург, 28-30 мая, 1998: Прогр. и тез. докл. - СПб, 1998. - С. 65. - Англ.

На основе неэмпирич. расчетов по теории возмущений второго порядка с разными базисными наборами рассчитаны равновесные геометрии и колебат. частоты галогенкарбенов CHX и CHY , где $\text{X}, \text{Y} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$. Результаты хорошо совпадают с имеющимися эксперим. данными.

ЖХХ, 1998, №22

CHCL

[DM - 40107]

1999

Martin Schwartz⁺
and Paul Marshall

$\Delta + H$
(packet)

J. Phys. Chem. A 1999,
103, 7900-7906

CH_3CCl_2

[Dm. 39644]

1999

Kikuo Miyokawa[†] et al.,

ASH Bul. Chem. Soc. Jpn.
1999, 72, 1-5.

CH₃CHCl

(Am. 40544)

2010

Forma A. lectula,

A+H,
ab initio
pacem

Phys. Chem. Chem. Phys.
2000, 2, 3807-3812

CH₂Cl₂

(In. 40544)

2000

Δ₅H,
ab initio
packet

Forma A. lectula,

phys. Chem. Chem. Phys.
2000, 2, 5807-5812

CH_3CCl_2

(Dm. 40544)

2000

Jorma A. Leetula,

Phys. Chem. Chem. Phys.

2000, 2, 3807 - 3812

A. H.,
ab initio
pccm

CH₂CH₂

(In. 40544)

2000

Forma A. lectula,

Δ + H,
ab initio
pacem

Phys. Chem. Chem. Phys.
2000, 2, 3807 - 3812

C-Cl-H
соедин.

[Om. 40845]

2001

Lebedev B.V., Smirnova N.N.
et al.,

$C_{p,m}^0$

J. Chem. Thermodyn.,

2001, 33, 389-403

Thermodynamics of difenylp-

dioxin and 1,2,3,4-tetrachloro-
dibenzo-p-dioxin from
 $T = 5\text{ K}$ to $T = 490\text{ K}$.

HCCCL

Parthiban, Sriniva - 2001
San; et al.

memorandum.
ab initio
paper

Los Alamos Natl. Lab.
Prepr. Arch., Phys. [Pre -
Print] 19 Aug 2001, 1-29

(all HCC • H, I)

$\text{CH} \equiv \text{CCl}$

Om. 41507

2002

Li Zhe, Joseph W. Bozzelli,

ΔH_f°

Chem. Phys. Lett., 2002,
362, N5-6, 445-452.

CHCl^+

(DM 41644)

2003

Su-Yu Chiang et al.,

Δ_{fH} J. Chem. Phys., 2003,
118, N1, 62-69.

Dissociative
of CH_2Cl_2 and photoionization
enthalpy of

formation of CHCl^+
Experiments and calculations