

C204

IV-2083 6 1933

$C_2O_4^{--}$ (S, F)

Latimer W.M., Schutz P.W.,

Hicks J.F.G., Jr

J. Amer. Chem. Soc., 1933, 55, 971-5

The heat capacity and ...

Be

ВР 2083 - IV

1954

C₂O₄²⁻ (Δ H₂)

Корниенко В.П.

Уч. зан. Харьковский ун-та, 50, Тр. Н.-И.
Ин-та химии и хим. физ., 1954, II, 275.

277

Некоторые термодинамические данные ...

W. H.

$C_2O_4^{2-}$ (Kc, ΔF , ΔH , ΔS) 8502-IV1954

Nanda A.C., Pani S.

J. Indian Chem. Soc., 1954, 31, N 8,
588-592 ()

Oxalato complex of trivalent
antimony

PX., 1955, N 13, 25998

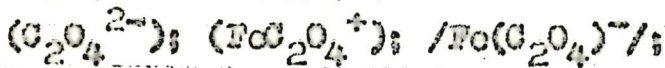
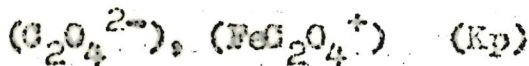
$C_2O_4^{2-}$

9

сент.
1955

2083 a - IV

1956



Бабко А.Н., Дубовенко Л.И.

Ж.Общ. химии, 1956, 26, № 4, 996-1003

Щавелевожелезные комплексы...

Жа

6885 - IV

1956

PbC_2O_4 (, H, H₂₉₈, S, F₂₉₈, S₂₉₈),

$\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$ (S₂₉₈)

Капустинский А.Ф., Селиванова Н.М.,
Шаханова М.С.

Тр. Моск. хим.-технол. ин-та, 1956, вып. 22,
30-37

Термохимические свойства...

W

6886

-IV

1960

 PbC_2O_4 (Ср, Нг, Ff, S)

 $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$ (S), $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ (H), PbC_2H_4 (H)

Капустинский А.Ф., Стрелко И.И., Таненко
В.Е., Алапина А.В., Стаманова М.С., Сели-
ванова Н.М.

Ж. физ. химии, 1960, 34, № 5, 1088-1093

Низкотемпературная теплоемкость...

Вс, W, M

C_2O_4

BQP - M 303 - IV

1964

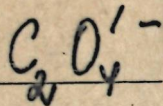
(Do)

Kalb A. Y.,

Allen T. L.,

J. Amer. Chem. Soc., 1964, 86, ~~10~~

pp 5107-12.



расчет
 $\Delta H_{р-ции}$

1969
6 Б905. Стабильность радикала оксалил аниона ($C_2O_4'^{-}$). Simon Z. The stability of the oxalyl anionic radical ($C_2O_4'^{-}$). «Rev. roumaine chim.», 1969, 14, № 6, 705—708 (англ.)

Энтальпия р-ции $C_2O_4'^{-} \rightarrow CO_2 + CO_2'^{-}$ (+26,5 ккал/моль) рассчитана методом МО. Для расчета использованы эксперим. лит. данные по соотв-щим энергиям разрыва связей, потенциалам ионизации в валентных состояниях и энергиям электронных переходов. Для проверки правильности расчета вычислена энергия спаривания двух групп $COOH$ в щавелевую к-ту методом Карапетьянца и методом МО. Полученные значения соотв. равны —8,6 и —7,6 ккал/моль. Сделан вывод о том, что $C_2O_4'^{-}$, а не $CO_2'^{-}$, является промежут. радикалом во внутренней окисл.-восст. р-ции комплексных оксалатов переходных металлов. В. Ключников

X. 1970. 6

1969

C₂O₄

ΔH

95710j Stability of the oxalyl anionic radical (C₂O₄⁻). Simon, Zeno (Chem. Res. Center, Timisoara, Rom.). *Rev. Roum. Chim.* 1969, 14(6), 705-8 (Eng). The reaction enthalpy for the •C₂O₄⁻ → CO₂ + •CO₂⁻ reaction is evaluated by means of a simple M.O. scheme. The energy differences are set equal to disocn. energies, differences between corresponding valence state ionization potentials, and optical transition energies which are available as exptl. data. The figure obtained (+26.5 kcal./mole) although a rough approxn. indicates •C₂O₄⁻ and not •CO₂⁻ as the intermediate radical species in the internal redox reactions of transition metal complex oxalates. M. Ben Elieser

C.A. 1969. 71. 20

$C_2O_4^{2-}$ [XII-1086] 1971

Jablon'ski Z., Gorzelany W.

(Kp,
4G) Roczn. chem., 1971, 45, N 11,
1807-1813.

РЖХим. 1972, 13B59.

$C_2O_4^{2-}$

1941

3 Б881. Термодинамическая характеристика образования ионов $C_2O_4^{2-}$, MnO_4^- и Mn^{2+} в водных растворах при различных температурах. Корнилова Н. В., Дымарчук Н. П., Мищенко К. П. «Ж. прикл. химии», 1971, 44, № 9, 2121—2122

ΔH_f
Калориметрически измерены теплоты взаимодействия MnO_2 и $KMnO_4$ с H_2O_2 в кислой среде при т-рах 15, 25, 35, 50° и с использованием лит. данных рассчитаны ΔH° ; ΔG° и ΔS° образования ионов $C_2O_4^{2-}$; MnO_4^- и Mn^{2+} в водн. р-рах при указанных т-рах. Также рассчитаны коэф. ур-ния зависимости теплоемкости ионов от т-ры и станд. значения кажущихся теплоемкостей.

П. М. Чукуров

х, 1942, 3

(+2)



C₂O₄²⁻

MnO₄⁻

Mn²⁺

ΔH

ΔG

C.A. 1972. 76. 8

1971

38088s Thermodynamic characteristics of the formation of C₂O₄²⁻, MnO₄⁻, and Mn²⁺ ions in aqueous solutions at various temperatures. Kornilova, N. V.; Dymarchuk, N. P.; Mishchenko, K. P. (Leningr. Tekhnol. Inst. Tsellyul.-Bum. Prom., Leningrad, USSR). *Zh. Prikl. Khim. (Leningrad)* 1971, 44(9), 2121-2 (Russ). For the reaction $\text{MnO}_2(\text{s}) + \text{H}_2\text{O}_2(\text{aq.}) + 2\text{H}^+ \rightarrow \text{Mn}^{2+}(\text{aq.}) + \text{O}_2(\text{g}) + 2\text{H}_2\text{O}$, calorimetric measurements at 15, 25, 35, and 50° gave the following thermodynamic characteristics: $-\Delta H = 20.2, 19.5, 18.8, 17.6$ kcal/mole; $-\Delta G = 20.2, 23.3, 26.9, 32.9$ kcal/mole. For the reaction $2\text{MnO}_4^-(\text{aq.}) + 5\text{H}_2\text{O}_2(\text{aq.}) + 6\text{H}^+ \rightarrow 2\text{Mn}^{2+}(\text{aq.}) + 5\text{O}_2(\text{g}) + 8\text{H}_2\text{O}$, $-\Delta H = 90.0, 89.2, 88.4, 87.2$ kcal/mole and $-\Delta G = 97.3, 98.4, 99.8$, and 102.0 kcal/mole. M. Dokladal

(+2)



$\text{CO}_2 \cdot \text{CO}_2^+$

1980

1 Б906. Реакции CO_2^+ и $\text{CO}_2 \cdot \text{CO}_2^+$ с этиленом. Теплота образования $\text{CO}_2 \cdot \text{CO}_2^+$. Rakshit Asit B., Warneck Peter. Reactions of CO_2^+ and $\text{CO}_2 \cdot \text{CO}_2^+$ with ethylene. Heat of formation of $\text{CO}_2 \cdot \text{CO}_2^+$. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1980, 35, № 1-2, 23—30 (англ.)

Определены константы скорости и получены распределения продуктов для р-ций ионов CO_2^+ и $\text{CO}_2 \cdot \text{CO}_2^+$ с этиленом. Эксперим. установка представляла собой цилиндрич. р-ционную камеру (дрейфовую трубу), заполненную CO_2 с давл. $\sim 0,3$ мм, в к-рую вводились ионы N_2^+ , полученные при ионизации азота электронным ударом. Вблизи места ввода в результате перезарядки N_2^+ на CO_2 происходило образование ионов CO_2^+ , которые направлялись слабым электр. полем (10 В/см) вдоль трубы, по пути реагируя с CO_2 (с образованием $\text{CO}_2 \cdot \text{CO}_2^+$) и с этиленом, добавляемым в р-ционную камеру в разных кол-вах. Продукты р-ции регистрировались масс-спектрометром. Для констант

(4 Н/)

Х. 1980 № 1

скоростей р-ций взаимодействия CO_2 и $\text{CO}_2 \cdot \text{CO}_2^+$ с этиленом получены соотв. след. значения: $0,9 \cdot 10^{-9}$ и $1,0 \cdot 10^{-9}$ см³/сек. Установлено, что продуктами первой р-ции являются ионы: C_2H_4^+ (17%), C_2H_2^+ (56%) и C_2H_3^+ (27%). Такое распределение продуктов хорошо согласуется с диаграммой разложения молекулы этилена. Единственным продуктом второй р-ции является C_2H_4^+ . Показано, что энергия ион-электронной рекомбинации $\text{CO}_2 \cdot \text{CO}_2^+$ меньше, чем потенциал появления иона C_2H_2^+ из этилена (13,13 эв). Это обстоятельство, а также тот факт, что ион $\text{CO}_2 \cdot \text{CO}_2^+$ вступает в р-ции перезарядки с N_2O , позволило авторам сделать заключения о величинах энергии диссоциации и теплоты образования иона $\text{CO}_2 \cdot \text{CO}_2^+$, которые по их оценкам составляют соотв.: $75,3 \pm 11,6$ и $468,6 \pm 11,6$ кДж/моль.

М И Поволоцкая

$(\text{CO}_2)_2^+$

1981

19 Б157. Масс-спектрометрическое исследование кластерных ионов NH_3 и CO_2 . Потенциалы появления и стабильность. Mass spectrometric investigation of NH_3 and CO_2 cluster ions: appearance potentials and stability. Stephan K., Märk T. D., Futrell J. H., Castleman A. W. «Vacuum», 1983, 33, № 1—2; Vacuum Spec. Issue: Proc. 2nd Joint Meet. Roland Eötvös Phys. Soc. (Vacuum Phys. and Thin Films Sèc.) and Austrian Vacuum Soc., Brunn am Gebirge, 27—29 Oct., 1981, 77—85 (англ.)

ΔfH

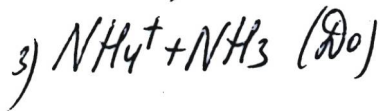
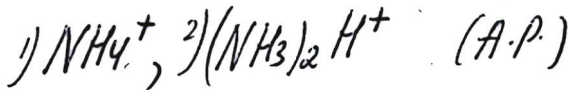
~~15~~
15

С использованием двухфокусного масс-спектрометра изучены процессы ионизации $(\text{CO}_2)_x$ и $(\text{NH}_3)_y$, где $x = 1-5$, $y = 1-10$ в молек. пучках. Спец. метод позволил отделить ионы, образующихся в молек. пучках, от ионов, образующихся при ионизации фоновых молекул. Измерены потенциалы появления след. кластерных ионов: $(\text{CO}_2)_2 + e \rightarrow (\text{CO}_2)_2^+$, $13,1 \pm 0,2$ эВ; $(\text{NH}_3)_2 + e \rightarrow$

X. 1983, 19, № 19

$\rightarrow \text{NH}_4^+$, $9,95 + 0,3$ эВ; $(\text{NH}_3)_3 + e \rightarrow (\text{NH}_3)_2\text{H}^+$, $9,50 + 0,3$ эВ. Теплота образования иона $(\text{CO}_2)_2^+$ при взаимодействии CO_2^+ с CO_2 составляет $17,1 + 5$ ккал/моль. Энергия диссоциации протонно связанного димера $\text{NH}_4^+ + \text{NH}_3$ составляет $0,60 + 0,2$ эВ. Исследованы процессы распада метастабильных ионов C_3H_8 , N_2O , $(\text{CO}_2)_x$ и $(\text{NH}_3)_y$ и получены данные, позволяющие оценить их устойчивость.

Резюме



CaO_4^{2-} (aq)

[Om. 16294]

1983

Kp;

Greywaggen J. J.,
Heyns J. B. B.,

"Talanta", 1983, 30, N3,
197-200.

$(\text{CO}_2)_2$

всч. 16833

1983

20 Б856. О температурной зависимости относительной устойчивости двух форм $(\text{CO}_2)_2$. On the temperature dependence of the relative stability of two forms of $(\text{CO}_2)_2$. Slanina Zdenek. «J. Mol. Struct.», 1983, 94, № 3—4, Suppl.: «Theochem», 11, № 3—4, 401—405 (англ.)

На основе лит. данных проведено детальное исследование относит. устойчивости в интервале t -р 0—500 К двух форм димера двуокиси углерода — параллельной (P -формы) и T -формы. Рассмотрена t -рная зависимость весовых коэф. ω_i , представляющих молярные доли индивидуальных изомеров в равновесной смеси при данной t -ре. Показано, что при наиболее низких t -рах преобладает P -форма. При повышении t -ры происходит выравнивание устойчивостей обеих форм и около 230 К равновесная смесь становится эквимолек. Выше этой t -ры T -форма более устойчива. Эта инверсия относит. устой-

Х. 1983, 19, N 20

чивости двух изомеров обусловлена вкладами вращательного и, особенно, колебательного состояний в ω . Подчеркивается, что этот вывод не противоречит имеющимся эксперим. данным. Обсуждена T -ная зависимость парц. и полных стандартных энтальпий и энтروпий образования димера и оценка потенц. барьера, разделяющего энергетич. минимумы. В. Ф. Байбуз

(Om. 20 449)

1984

$(\text{CD}_2)_2$

Lobue J.M., Rice J.K.,
Novick S.E.,

empyryp

Chem. Phys. Lett., 1984,
112, N4, 376-380.

Caly^{2-} [om. 23459] 1984.

Marcus Y., Loewenschuss A.,

S; Ann. rept. Progress Chemistry,
Section C, Physical Chemi-
stry, 1984, C81, 81-135,
Chem. ● Soc. (London).

CaD_4^{-2} (aq)

(DM. 19974)

1984

Васильев В. П.,

Ис. морган. химии,
1984, 29, N 11, 2785-

● - 2792

термог.
св-ва

(Cl₂)₂ [Om. 22256]

1985

Stanina Z.,

(изомериза-
ция,
термолит-
св-ва)

Surface Sci, 1985,
157, N2-3, 371-379.

$\text{CO}_2^+ \cdot \text{CO}_2 (2)$

Im 29903 1988

108: 211422a Thermochemistry for the gas-phase ion-molecule clustering of $\text{CO}_2 + \text{CO}_2$, $\text{SO}_2 + \text{CO}_2$, $\text{N}_2\text{O} + \text{N}_2\text{O}$, $\text{O}_2 + \text{CO}_2$, $\text{NO} + \text{CO}_2$, $\text{O}_2 + \text{N}_2\text{O}$ and $\text{NO} + \text{N}_2\text{O}$: description of a new hybrid drift tube/ion source with coaxial electron beam and ion exit apertures. Illies, Andreas J. (Dep. Chem., Auburn Univ., Auburn, AL 36849-3501 USA). *J. Phys. Chem.* 1988, 92(10), 2889-96 (Eng). A mass spectrometer ion source designed specifically to measure high-pressure gas-phase ion-mol. equil. as a function of temp. was developed. The ion source has coaxial electron entrance and ion exit apertures. Ions move through the source at a const. velocity detd. by a uniform elec. field gradient which is controlled by overlapping drift guard rings. The transport properties of Ar^+ (mobility and diffusion) demonstrate that the effect of the elec. field is negligible compared to thermal energies. Equil. were investigated for the reactions forming

(memorandum.)

(+6) 

C.A. 1988, 108, N 24

the following gas-phase ion-mol. clusters: $\text{CO}_2^+ + \text{CO}_2$, $\text{SO}_2^+ + \text{CO}_2$, $\text{N}_2\text{O}^+ + \text{N}_2\text{O}$, $\text{O}_2^+ + \text{CO}_2$, $\text{NO}^+ + \text{CO}_2$, $\text{O}_2^+ + \text{N}_2\text{O}$, and $\text{NO}^+ + \text{N}_2\text{O}$. The measured enthalpies and entropies of reaction were used to detn. the cluster ion enthalpies and entropies of formation at 298 K. The bond energies (from the enthalpies at 0 K) were detd. The exptl. entropies of reaction for the formation of $\text{O}_2^+ + \text{N}_2\text{O}$ and $\text{NO}^+ + \text{N}_2\text{O}$ are substantially less neg. than those for $\text{O}_2^+ + \text{CO}_2$ and $\text{NO}^+ + \text{CO}_2$. The entropy differences are large enough to suggest an inherent difference between the bonding or geometry for the ions bound to N_2O compared to those bound to CO_2 .

C₂D₄(2)

1988

Slanina Z.,

(CO₂)₂⁻ Isomers: A Curious
system with a unique thermo
dynamics.

10th
chemical
August

IUPAC

29 -

conference on
thermodynamics,
September 2₇

1988. Prague Czechoslovakia,
Program booklet II, A23.

(U₂)₂(2) [om. 29937]

1988

Slavina Z.,

J. Mol. Struct., 1988,
176, 239- 243.

A dramatic  temperature
interchange ~~or~~ the relative

stability of its two
structural forms.

$(\text{CO}_2)_2$

gm 30 805

1988

109: 157504j Isomeric carbon dioxide gaseous dimer system: a new record isomerism contribution into heat capacity. Slanina, Zdenek (J. Heyrovsky Inst. Phys. Chem. Electrochem., Czech. Acad. Sci., CS-121 38 Prague, Czech.). *J. Phys. Chem.* 1988, 92(20), 5836-9 (Eng). The results of a recent computational characterization of D_{2d} and C_s isomers of $(\text{CO}_2)_2(\text{g})$ were used for evaluation of the isomeric interplay in relation with enhancement of the heat capacity of the system. The max. value of the isomerism contribution into std. overall heat capacity is 134 J/K.mol, which one order of magnitude higher than the highest heat capacity known for other systems.

(6p)

C.A. 1988, 109, N 18

$(\text{CO}_2)_2^-$

Am 30805

1988

4 Б3073. Изомерная система $(\text{CO}_2)_2^-$ (g) новый рекорд для вклада изомерии в теплоемкость. Isomeric $(\text{CO}_2)_2^-$ (g) system: A new record isobmerism contribution into heat capacity / Slanina Zdeněk // J. Phys. Chem.— 1988.— 92, № 20.— С. 5836—5839.— Англ.

Отмечено влияние изомерии на термодинамич. св-ва молек. комплексов со слабыми межмолек. взаимодействиями. Исследованы зависимость: относит. содержания комплексов $(\text{CO}_2)_2^-$ (g) с симметрией D_{2d} и C_2 в смеси от т-ры; теплоемкости при постоянном давлении и соотв. изомерного вклада от т-ры. Предложена простая модель для описания изомерного вклада в теплоемкость, которая хорошо согласуется с эксперим. данными для комплексов $(\text{CO}_2)_2^-$. Величина этого вклада, 134 Дж/моль·К на порядок выше наиболее высоких вкладов, известных для др. систем.

М. А. Быков

(g)

X. 1989, № 4

CaD₂⁻

[Om. 33693]

1990

Duke B.F.,

M.A. J. Mol. Struct. Theochem,
1990, 205, 279-285

Is the ethylenedione radical
anion linear or bent?

$(\text{CO}_2)_2$

1992

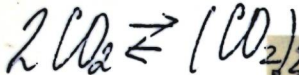
16 Б3036. Вычисление мольной доли димера CO_2 в равновесии мономер—димер по высотному профилю атмосферы Венеры. A computational evaluation of altitude profiles of the equilibrium monomeric—dimeric CO_2 fractions in the atmosphere of Venus /Slanina Zdeněk, Fox Kenneth, Kim Sang J. //Thermochim. acta. —1992. —200. —С. 33—39. —Англ.

(K_p)

Константы равновесия р-ции димеризации $2 \text{CO}_2 = (\text{CO}_2)_2$ вычислены с использованием термодинамич. ф-ций $(\text{CO}_2)_2$, основанных на двух вариантах квантово-хим. расчетов в предположении точечных групп симметрии C_{2h} и C_{2v} . Вычисление мол. доли димера в атмосфере Венеры на высотах 0—65 км проведено также с учетом потенциала Леннард-Джонса. У ПВ Венеры при 733 К и 87,6 атм содержание димера составляет 4—23%, на высоте 50 км при 344 К и 0,9 атм — 0,2—0,7% в зависимости от выбора способа расчета.

Л. А. Резницкий

х. 1993, № 16



1992

15 БЗ065. Расчет равновесия димеризации $\text{CO}_2/(\text{CO}_2)_2$ в атмосфере Марса и Венеры вблизи поверхности планет. An evaluation of $\text{CO}_2/(\text{CO}_2)_2$ equilibrium populations in the planetary atmosphere close to the surface of Mars or Venus /Slanina Zdeněk //Thermochim. acta .—1992 .—195 .—С. 45—49 .—Англ.

Расчет равновесия димеризации $2\text{CO}_2 \rightleftharpoons (\text{CO}_2)_2$ выполнен квантово-хим. методами. Равновесие представляет интерес при моделировании атмосферы Марса с 95,3 об.% CO_2 и Венеры с 96,5 об.% CO_2 ; вычисления проведены с учетом наличия двух энергетич. минимумов строения молекулы CO_2 с точечными группами симметрии C_{2h} и C_{2v} , энергия C_{2h} -состояния на 4 кДж/моль ниже, чем C_{2v} -в приближении «жесткий ротатор-гармонич. осциллятор». Т-ра ПВ Марса и Венеры 200 и 733 К, соотв., общее давл. у ПВ 0,006 и 87,6 атм. Димеризация сопровождается значит. убылью энтропии. Мол. доля димера на Марсе составляет 0,0019 или 0,016% в зависимости от выбора аппроксимации потенциальной энергии, на Венере 13,1 или 22,9%. Высокая расчетная конц-ия димера играет важную роль в моделировании тепловых св-в атмосферы Венеры. Библ. 32. Л. А. Резницкий

(Кр)

Х. 1993, № 15

$(CO_2)_2$

1996

Винасен А.А., Катохин А.А.
и др.,

Хим. физ. — 1996, 15, №,
88-95.

(см.



$CO_2; \text{I}$)