

C-H

C-H -

Bp - 23a - IV 1910

справк.
соедин.

Roth - W.A.

"Z. Elektrochemie"

(AH comb.)

1910, 16, 654-62

$C_n H_{2n+2}$ Bp - 8588 - IV 1929

T_m, H_m Parks G. S.

ΔS_m Todd S. S.

Industrial & Engineering Chem.
V21 No 12

p 1235 - 1237

C-H

1390-504-12 | 1935

Mikimoto y.

(70)

"J. Chem. Phys", 1935,
3, 164-8.

C-H copy

1390-4074-IV | 1946

Kilpatrick J E,
Prosen E. J., Pitzer K S,
Rossini F. W.

(H_f^o, F_f^o K_f) "J Res. Nat. Bur. of Stand."

C₂H₄

C₂H₄

C₂H₆

(ΔH_f)

1300-557-IV 1950

Бондарьен X.C.

"Док. физ. химии", 24,
вып 11, 1950.

Деревяшки свдзет и . . .

1955

C-H-соед.Физические
свойстваОрганич.
соед.Timmermans Y., Ann. Chim. Phys. - RolandY. chim. phys., 1955, 52, 223.Работы Международного Бюро
Физико-Химических Стандартов.IX. Физические константы двадца-
ти органических соединений(с. с. А. 32, 32176)Тимм.; Тимм. и др.; Тиммерманс, Н.,
и др.,  репринт
с. А. 1955 - 11330 h, i

Буксы, поверхностные и подземные, гидрохимичес-
кие исследования $(C_2H_5)_4C$, трихлорэтилен,
1,1,2-трихлорэтилен

CH_3

C_2H_5

C_2H_3

$(\Delta F_{\frac{1}{2}}, S,)$

$(\Delta H_{\frac{1}{2}})$

1390-524-1V | 1951

Bryant W.M.D.

"J. Polymer science",

6, No 3, 359-70. 1951.

C_7H_{16}
 C_6H_{14}
 C_8H_{18}

ΔH_f°
 H_f°

[Immun 7977]

1951

Guff V. N., Gordon S., Morell D. E.

General Method and Thermodynamic Tables for Computation of Equilibrium Composition and Temperature of Chemical Reactions.

Rept 1037, Cleveland, Ohio
NASA, 1951 ●

машина

ВФ-12064-IV

1956

$C_n H_{2n}$ - воздух

H.N. Powell

ΔH

P. N. Sucin

Proc. Gas Dynam Sympos
1955

В.И. Вегенев

1957

Термодинамика

ДАН, 114, 13, 571.

Энергия разрыва С-Н связей
в углеводородах.

(Метод расчета)

216116

CH

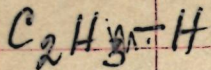
Coats F.H., Anderson R.C. | 1957

11-7602-cho
YACS, 79, NC, 1340

ΔH_f
D

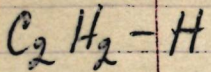
термодинамические вели-
чины



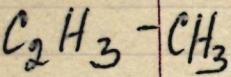


Bp - 4039 - IV

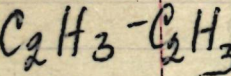
1960



Harrison A. G.; Lossing F.



J. Amer. Chem. Soc.



1960, 82 N3, 519-21.

(A.P.; ΔH_f)

Умелого-
рука

Bernstein H. Y.

Tz. Far. Soc., 1961, 57, 1649

Длинна черепа в умелого-рука

длинна
черепа

Bor - 77a - IV | 1961

Callegos E J, Kiser RW

(Мониторинг окружающей среды
и промышленности)

(нет ссылок на журнал)

CH^+
 CH_2^+
 CH_3^+
 C_2H^+
 C_2H_2^+
 C_2H_3^+

ΔH_f

CH₄;
CH₃; CH₂; CH;

(ΔH_f)

[B90-564-IV 11962]

Bernstein H. J.

Trans. Faraday Soc; 1962,

58, v12, 2285-2306

and.

10 Б389. Оценка молекулярных параметров C/H фрагментов. Cowperthwaite M., Bauer S. H. Estimation of molecular parameters of C/H fragments. «J. Chem. Phys.», 1962, 36, № 7, 1743—1753 (англ.)

Для расчета термодинамич. функций многочисленных радикалов вида C_nH_m , образующихся при пиролизе углеводородов при повышенных т-рах, обсуждена методика приближенной оценки их теплот образования и мол. параметров. Оценка выполнена последовательно по рядам C_nH_m при $m = 1, 2, 3, 4, 5$ и $n \geq 6$ с обсуждением электронной структуры, схем диссоциации и применением данных по энергии диссоциации связей, причем использован метод аналогии. Получены новые данные для 39 радикалов (всего рассмотрено 73 радикала). Частоты колебаний предлагается оценивать по частотам сходных молекул, используя приближенную классификацию колебаний. Теплота образования табулирована для 67 соединений (напр., CH , CH_2 , CH_3 , C_2H , C_3H и т. д.), но результаты по другим молекулярным параметрам (межатомным расстояниям, моментам инерции, частотам колебаний) не приводятся. Применимость методики продемонстрирована согласием предсказанных и эксперим. значений теплот образования некоторых соединений. И. Годнев

C_nH_m
радикалы

ΔH_f

X-1963-10

1962

1399-7539-11
1-6554-661

1962

C + H₂
reversing

Reactions between elemental carbon and hydrogen at temperatures above 2800°K. Raymond F. Baddour and John M. Iwasyk (Massachusetts Inst. of Technol., Cambridge). *Ind. Eng. Chem. Process Design Develop.* 1, No. 3, 169-76(1962). A high-intensity arc reactor reacts C vapor and H₂. The reaction products are fast-quenched and sampled with a water-cooled probe. Initial approx. equil. calcs. for the C + H₂ system at 2500-4200°K. show that as the concn. of C increases, concns. of hydrocarbons decrease. Also, as the temp. is increased beyond the sublimation point, the concns. of polyat. species decrease, C₁ and H becoming the predominate species. Calcn. of the quenched gas compn. ignoring and considering the reaction $C_2H + H \rightleftharpoons C_2H_2$, resp., are next compared. The high-intensity arc reactor with a cylindrical cathode pipe and anode rod is used to examine exptl. the effects on gas concn. of: probe size, probe position, H₂ flow rate, power input,

C.A. 1962. 57. 8

9453h-9454ab

and diluents. The main products of the reaction between the C vaporized and the H_2 passing through the high-intensity arc of the reactor as sampled were, C_2H_2 , H_2 , and condensed C. C_2H_2 contents of 18.6 vol. % without diluent and 23.8 vol. % (diluent-free basis) with 63.6% He were observed. These results support the proposal (Plooster and Read, CA 54, 52h) that C_2H radicals exist in the hot gas mixture.

J. E. S. Venart

The electron affinities of the lower alkyl radicals. F. M. Page (Coll. Adv. Technol., Birmingham, Engl.). *Symp. Combust. 8th, Pasadena, Calif. 1960, 160-4* (Pub. 1962). Neg. ions are sepd. from electrons emitted at the filament surface of a gas-filled triode by diversion of the electrons to a grid at a voltage intermediate between that of the filament and the plate by a magnetic field too weak to affect the relatively heavy ions (Sutton and Mayer, *CA* 28, 2988⁶). The electron/ion ratio is detd. from the plate currents with the magnetic field off and on. Resolution is greatly improved by a secondary grid between the main grid and the plate to absorb secondary emissions from the main grid. The equipment is described in detail. Mean filament e.m.f. is -220 v., primary grid -110, and suppressor grid +3 relative to the filament. HgPr_2 and HgBu_2 at 1-10 mm. Hg showed electron/ion ratios which, when plotted vs. reciprocal abs. filament temp. gave, resp., 16.0 and 15.0 kcal./g.-mole alkyl radical electron affinity cor. to 0°K. PbEt_4 gave an anomalous result, the electron affinity of the Et radical changing abruptly from 27.3 (21.8 at 0°K.) to -48 kcal./g.-mole as the filament temp. passes 1800°K., remaining const. up to 2600°K. The only reaction which can

-1962

Paduham

C.A. 1962. 57-10

11952 bed

coll
ref. 05.

account for this neg. affinity is the endothermic $\text{PbEt}_4 \rightarrow \text{Pb} + \text{C}_2\text{H}_4 + 2\text{CH}_3^\cdot$, which may proceed via the formation of ethylene and Me radicals. If this is so the electron affinity of the Me radical must be 32 kcal./g. mole which agrees well with other observations. — Paul D. Hobson

Обзор | Bq-A-393-IV | 1963

Harrison A.C.

C-H

"Mass spectrometry
org. ions." 1963
204-253

Фраг

CH_3^+

C_2H_5^+

CH_4^+

C_2H_6^+

Бор - 9704 - IV

1963

Кеван Л.

"Nature" (Eng), 1963,
199, , N 4893, 562-64

(ΔH_f)

... свозка тепловой образ...

1963

~~Dr. (Ber. 1971) (M.C.)~~ - Dr. Mackle K.

H, SH, SeMe, SP, SMe, Tetrahedron 19(7), 1159

D(CS) $\Delta H_{f, 298}^{\circ}$
u. padma ax.

D(R'SH) D(R'SMe)
D(R'SEt) D(R'SOMe)
R' = Me, Et, Pr, Me₂CH,
Bu, Me₂C, Ph, H₂C=CHCH₂,
BB, Ac.

Thermochemistry of sulfur-containing
molecules and radicals. II. Dissociation
energies of bonds involving sulfur. Heats
of formation of sulfur-containing
radicals

cm (SH) I 2

1963

Experiment
Thomson
Wong

Free radicals by mass spectrometry. XXIX. Ionization potentials of substituted cyclopentadienyl radicals. R. F. Pottie and F. P. Lossing (Natl. Res. Council, Ottawa, Can.). *J. Am. Chem. Soc.* 85, 269-71(1963); cf CA 58, 5134e. The vertical ionization potentials of a no. of substituted cyclopentadienyl radicals were measured by electron impact. In order of decreasing ionization potential, the substituents are: CN, Br, F, Cl, H, CH₃, C₂H₃, C₄H₄ (indenyl radical), NH₂, and (C₄H₄)₂ (fluorenyl radical). A qual. relation between the ionization potential and substituent consts. of the σ - and σ^+ -type is found. Some modes of thermal decompn. of the radicals, and of their precursors the substituted phenoxyl radicals, are described.

CA

C.A. 1963. 58. 7

63058

Bop-9613-IV 1964

C_2H_6

C_2H_4

C

(ΔH_c)

Earl J. C.

"Chem. and Ind.", 1964

N 4, 149.

Carbon-carbon energies...

1964

C+H

Circle

palmdale

15467) (LA-tr-65-3) EQUILIBRIUM IN THE SYSTEM GRAPHITE-HYDROGEN AT HIGH TEMPERATURES AND ELEVATED PRESSURES. Z. V. Ievleva. Translated by Helen Chick and N. H. Krikorian (Los Alamos Scientific Lab., N. Mex.), from Zhur. Fiz. Khim., 38: 2380-85(1964). 13p. Dep.(mn); \$1.00(cy) 1(mn) CFSTI \$1.60(fs), \$0.80 (mf) JCL.

An experimental study was made of the equilibrium compositions (methane and unsaturates) in the system graphite-hydrogen at 1800 to 2600°K and pressures up to 45 bars. The results agree with thermodynamic calculations, although some systematic differences are evident. (D.L.C.)

NSA. 1965. 19.9

1965

C-H-соед ΔH_f

4 Б650. Симметрия и теплота образования изомеров некоторых замещенных n-алканов. Андреевский Д. Н. «Ж. физ. химии», 1965, 39, № 7, 1719—1722

Сопоставлены теплоты образования и числа симметрии изомеров 1- и 2-монозамещ. n-алканов нескольких рядов. Отмечено, что изомеры с большими числами симметрии обладают меньшим запасом внутренней энергии (более отрицат. теплота образования). Суммарные вложения связей в энергию молекул и их энтропию (бессимметричные значения) в рассмотренных случаях для более симметричных конфигураций изомеров имеют пониженные значения. Резюме автора

X. 1966. 4

Сп H_{2n+2} .

1965

Алканы

ΔH_3

12 Б556. Энтальпия сублимации n - и изо-алканов при 0°K . Шимонаев Г. С. «Ж. физ. химии», 1965, 39, № 10, 2526—2529

Изложенным ранее (РЖХим, 1956, № 9, 25009) методом вычислена энтальпия сублимации при 0°K (λ_0) для 26 алкановых углеводородов. Для алканов идентичного строения $\lambda_0 = \Delta\lambda \cdot n + \text{const}$ ($\pm 2,5\%$), где n — число атомов углерода в молекуле; значения λ и const соотв.: для n -алканов с нечетным n 2100 и 150; для n -алканов с четным n 2100 и 500; для 2-метилалканов 1750 и 900; для 2,2-диметилалканов 1230 и 2870. Реферат автора

Ж. 1966. 12

C-II - унневодарада

1965

16 Б525. Экспериментальное определение теплоемкости эвтектического раствора дифенил-дифенилметана путем измерения коэффициента тепловой активности жидкости. Szabados László, Löwy Ferenc, Török Antal, Németh Géza. A difenil-difenilmetán eutektikus elegy fajhőjének kísérleti meghatározása a hőaktivitási tényező mérésével. «Közp. fiz. kutató int. közl.», 1965, 13, № 5, 323—341, II, IV (венг.; рез. русск., англ.)

Разработан метод определения коэф. тепловой активности $\kappa = (\lambda \cdot c_p \cdot \nu)^{1/2}$ на основе метода Филиппова (РЖХим, 1961, 2И26) (λ — коэф. теплопроводности; c_p — теплоемкость при постоянном давл. и ν — уд. вес). На фольге, погруженной в жидкость и нагретой переменным током, появляется сигнал с частотой, в 3 раза

Ср
(метод сред.)

х. 1966. 16

большей частоты тока нагрева, амплитуда к-рого зависит от теплофиз. св-в жидкости. Изложены основные принципы измерения и метод. Описан прибор, применяемый в интервале t -р 20—400°, основные части электрич. измерительной системы и селективный усилитель с полосой пропускания 146—152 гц . Отношение шума усилителя к сигналу выхода составляет 10^{-7} в. Характеристики прибора определены с помощью измерений с водой и моноизопрпил-дифенилом. Исследованы эвтектич. р-р дифенилдифенилметана и газойль советского произ-ва. С макс. относительной ошибкой 3% рассчитаны значения c_p с использованием значений коэф. теплопроводности и уд. веса из других измерений. Я. Палинкаш

Ароматические
углеводороды

у;

Ас

1966

8 Б55. Величины сродства к электрону и потенциалы ионизации ароматических углеводородов. Becker Ralph S., Chen Edward. Extension of electron affinities and ionization potentials of aromatic hydrocarbons. «J. Chem. Phys.», 1966, 45, № 7, 2403—2410 (англ.)

Приводятся абс. мол. электроотрицательности 14 ароматич. углеводородов. Для рассмотренных углеводородов существует линейное соотношение между величинами сродства к электрону и энергией перехода 1La . Мол. электроотрицательность для 9 рассмотренных ароматич. углеводородов приблизительно постоянна. Все это дает возможность предсказать потенциалы ионизации, оказавшиеся в хорошем согласии с эксперим. данными. Однако аналогичным методом не удастся рассчи-

X. 1967 - 8

тать работу выхода электрона из графита. На основании измеренных величин сродства к электрону удастся найти их связь с величинами сродства молекул к метилу и вычислить разность между теплотами сольватации нейтр. углеводов и их однозарядных отрицательных ионов. Показано, что ряд теоретич. приближений может быть успешно использован для расчета величин сродства к электрону ароматич. молекул. Сообщаются средние потенциалы ионизации бенз(e)пирена ($7,67 \pm 0,05$ эв), бенз(a)пирена ($7,31 \pm 0,05$ эв), дибенз(a, h)антрацена ($7,81 \pm 0,05$ эв), дибенз(a, j)антрацена ($7,84 \pm 0,06$ эв) и пирена ($7,87 \pm 0,05$ эв), вычисленные из оптич. спектров комплексов с переносом заряда.

Г. Карачевцев

n -парафинов C_nH_{2n+2}

1966

$T_b = f(n)$

88863e The boiling-point function of n -paraffin hydrocarbons.
Karoly Tettamanti, Andor Borus, and Janos Krepuska (Dept.

Pressure, mm.	D	E	F
10	678.544	87.246	1544.320
100	706.625	72.870	1539.820
400	732.190	64.048	1544.197
1500	765.984	55.555	1555.992

Chem. Unit Operations, Polytech. Univ., Budapest). *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* 50(1-4), 145-53(1966)(Eng.). B.ps. and mol. wts. of n -paraffins are related by the expression $t = D \log (M + E) - F$, where t = b.p. ($^{\circ}\text{C}.$), M = mol. wt., and D , E , F are consts., $D = 747.190$, $E = 59.922$, $F = 1548.741$ (for b.ps. at 760 mm.). Predicted b.p. values agree with the exptl. ones for $n > 1$ in C_nH_{2n+2} . Accuracy of predictions improves as n increases. At other pressures, the consts. are given in the table.

R. O. Burk

C.A. 1967. 66. 20

С-К-соед.

14 Б788. Скрытые теплоты испарения углеводородов. Bradford Michael L., Thodos George. Latent heats of vaporization of hydrocarbons. «J. Chem. and Engng Data», 1967, 12, № 3, 373—376 (англ.)

На основании ур-ний Клаузиуса—Клайперона (1), Фроста—Колквофа (Frost A. A., Kalkwarf D. R., J. Chem. Phys, 1953, 21, 264) и эксперим. данных для плотностей жидкостей и паров выведено ур-ние для расчета теплот испарения (λ)-углеводородов вплоть до критич. т-ры (и включая ее): $\lambda = \lambda_0 [1 - T_R]^{0,39}$ (2), T_R — приведенная т-ра, λ_0 — гипотетич. теплота испарения при 0° К. Найдено соотношение для расчета λ_0 в брит. тепл. ед. на фунт — моль: $\lambda_0 = 800 \cdot M^{0,72}$ (M — моль-вес). Отличие величин λ , вычисленных по (1) и (2) для 184 величин, относящихся к 23 углеводородам, составляет

ДН_v

Х. 1968. 14

1964

в среднем 2,6%, совпадение между эксперим. значениями и вычисленными по (2) для 58 величин, относящихся к 9 углеводородам в пределах 3,0%, причем 4 из этих углеводородов не использованы для получения коэф. уравнения.

Резюме

C-H - coexisting

1967

76794r Latent heats of vaporization of hydrocarbons. Michael L. Bradford and George Thodos (Northwestern Univ., Evanston, Ill.). *J. Chim. Eng. Data* 12(3), 373-6(1967)(Eng). Latent heats of vaporization for different types of hydrocarbons were calcd. by using the rigorous Clapeyron equation, the Frost-Kalkwarf vapor pressure relation, and exptl. satd. vapor and liquid ds. obtained from the literature. The calcd. values ranged in temp. up to and including the crit. point and were used to develop the relations, $\lambda = \lambda_0 [1 - T_R]^{0.39}$, where λ_0 is a const. for each hydrocarbon and represents the hypothetical latent heat of vaporization at $T = 0^\circ\text{K}$. For the hydrocarbons investigated, λ_0 depended on mol. wt., as follows: $\lambda_0 = 800 M^{0.72}$, where λ_0 has the units Btu. per lb.-mole. These relations were used to

ΔH_{ev}

C.A. 1967. 67. 16

calc. latent heats of vaporization, which, when compared with values obtained from the Clapeyron equation, produced an av. deviation of 2.6% for 184 values representing 23 hydrocarbons. Values were also calcd. and compared with calorimetric measurements presented in the literature for several hydrocarbons to produce an av. deviation of 3.0% for 58 values representing nine hydrocarbons. Values for four of these hydrocarbons were not used in the development of the relations of this study. 20 references.

RCJP

C-H-
conjug.

E_e

111891u Electron affinities of aromatic hydrocarbons in the gas phase and in solution. J. Chaudhuri, J. Jagur-Grodzinski, and M. Szwarc (State Univ. of Forestry at Syracuse Univ., Syracuse, N.Y.). *J. Phys. Chem.* 71(9), 3063-5(1967)(Eng). The following relative electron affinities of 14 aromatic hydrocarbons in the gas phase and soln. were detd. by using potentiometric titrns., a method developed by Hoiijtink (H., *et al.*, *CA* 50: 14412h) (compd., relative electron affinity in tetrahydrofuran, predicted electron affinity in gas phase): biphenyl, 0.0, 0.085; naphthalene, 0.043 ± 0.02 , —; triphenylene, 0.132 ± 0.01 , —; phenanthrene, 0.142 ± 0.01 , —; benzo[e]pyrene, 0.484 ± 0.02 , —; pyrene, 0.529 ± 0.01 , —; benz[a]anthracene, 0.590 ± 0.02 , —; 9,10-dimethylantracene, 0.616 ± 0.01 , 0.71; anthracene, 0.642 ± 0.01 , 0.74; benzo[a]pyrene, 0.760 ± 0.02 , —; acenaphthylene, 0.880 ± 0.03 , 0.98; fluoranthene, 0.820 ± 0.02 , 0.92; perylene, 0.965 ± 0.01 , 1.06 ev., and naphthacene 1.058 ± 0.02 v., —.

CIIN

C.A. 1967. 67. 24

С-Н-соединения
Углеводороды

1967

6 Б771. Физические свойства углеводородов. I. Равновесие жидкость — пар при низких температурах. Хирата Мицухиро, Хакута Тосикацу. «Сэкию гаккайси, J. Japan Petrol. Inst.», 1967, 10, № 4, 287—294 (японск.)

1967

Foglia C.

Chem. Phys. Let., I (13), 669

Formation of dimers of hydro-
carbons in the vapour phase

CH₃ •

C₂H₅ •

ΔH

присоедин. к олефинам

J. Chem. Phys., 47, n. 11,
4570.

Larson C. W.,
Rabinovitch B. S.,
Tardy D. C.

1967

Конкурирующий мономо-
мерный распад
в химически актив-
ированных радикалах -

всех системах.

(см. см.) I

Уфеводороды

1967

3 E92. Некоторые температурные зависимости тепло-
физических свойств жидких предельных углеводородов.
Мустафаев Р. А. «Елмиэсэрлэр. Азерб. унив.
Физ.-ријазиијат елмлэри сер. Уч. зап. Азерб. ун-т. Сер.
физ.-матем. н.», 1967, № 8, 86—90 (рез. азерб.)

Предложены параболич. интерполяционные ф-лы для
описания температурной зависимости теплоемкости, теп-
лопроводности, плотности и поверхн. натяжения алканов
с числом атомов углерода $n > 5$. Значения этих величин
при 20° С определяются по величине n . Л. П. Филиппов

09.1968.38

C-H-соединения

1967

Д 5 Б691. О теплотах сублимации углеводородов. Рапп-
штынская Е. А. «Ж. физ. химии», 1967, 41, № 3,
613—617

Теплоты сублимации, вычисленные для модели молекул с центральным взаимодействием, в случае многоатомных молекул, гораздо меньше экспериментально найденных и тем меньше, чем больше молекулярный вес в-ва. В предположении центрального дисперсионного взаимодействия атомов многоатомных молекул получена формула для вычисления теплот сублимации многоатомных кристаллич. углеводородов. Автореферат

ΔH_s

ж. 1968. 5

1987

Углеводороды

11 E557. Энтальпия сублимации ненасыщенных и циклических углеводородов при 0° К. Шимона-ев Г. С. «Ж. физ. химии», 1967, 41, № 6, 1486—1488

(Энтальпия
сублимации)

Вычислены значения энтальпии сублимации (ЭС) при 0°С для 56 ненасыщенных и циклич. углеводородов. ЭС является ф-цией числа атомов углерода в молекуле, степени разветвления структуры, относительно положения кратной связи в молекуле, числа атомов углерода в цикле и боковых цепях, относительного расположения боковых цепей, *цис-транс*-конфигурации. Для углеводородов с одинаковым числом атомов углерода в молекуле, >5, значение ЭС, убывает в ряду *н-алканы* > *алкены* > *арены* > *цикланы*. Для углеводородов с числом атомов углерода <5 ЭС *алкинов* > *диенов* > *цикланов* > *н-алкенов* > *алкенов*. Зависимость ЭС от большого числа структурных факторов не позволяет использовать аддитивный метод для точного расчета этой величины.

ф. 1987 - 118

C-H - сог.

1984

3 Б37. Об учете попарных взаимодействий связей для расчета свойств алканов. Сейфер А. Л., Смоленский Е. А. «Ж. физ. химии», 1964, 38, № 9, 2230—2234 (рез. англ.)

Некоторое св-во алканов рассматривается как линейная функция чисел различных пар связей: пар связей, разделенных одним, двумя и тремя атомами С. Приведении ряда дополнительных предположений о величинах постоянных в рассматриваемом приближении получается 19 параметров (для каждого св-ва), подлежащих определению из экспер. данных. Методом наименьших квадратов по экспер. данным определены

Х. 1966. 3

параметры для молекулярной рефракции $(MR)_D^{20}$, V_M^{20} , $\Delta H_{298,16}^0$ (газ), $\Delta H_{298,16}$ (жидк.) и $\Delta Z_{298,16}^0$ (газ), $S_{298,16}^0$ (газ), с помощью которых рассчитаны (и сопоставлены с экспериментом) величины MR_D^{20} и V_M^{20} для 77 алканов, величины $\Delta H_{298,16}^0$ (газ), $S_{298,16}^0$ (газ), $\Delta Z_{298,16}^0$ (газ) для 39 алканов и $\Delta H_{298,16}^0$ (жидк.) для 48 алканов.

С. Яровой

Углеводороды

1987

16 Б785. Теплоемкость органических углеводородов.
Часть I. Прямолинейные цепи и циклы. Tamplin
W. S., Zuzic D. A. Specific heat of organic hydrocarbons. Part I. Straight chain and cycles. «Hydrocarbon Process.», 1967, 46, № 8, 145—146 (англ.)

(Рр)

На основании анализа литературных данных найдено, что теплоемкость углеводородов можно вычислять при помощи ур-ния $C_p = A + Bt + Ct^2 \pm \Delta$, где t — т-ра в °С, а Δ — средняя разность между вычисленными и выбранными надежными значениями теплоемкости в рассматриваемом интервале т-р. Вычислены и табулированы значения A , B , C и Δ для 33 насыщ. и 21 ненасыщ. прямоцепочечных углеводородов и для 29 циклич. углеводородов. Также приведены интервалы т-р, в к-рых имеются эксперим. данные. В. Байбуз

х. 1968. 16

1984

С-Н-

Углеводороды

22 Б864. Теплоты сублимации полициклических ароматических углеводородов и их молекулярные упаковки. W a k a y a m a N o b u k o; I n o k u c h i H i r o o. Heats of sublimation of polycyclic aromatic hydrocarbons and their molecular packings. «Bull. Chem. Soc. Japan», 1967, 40, № 10, 2267—2271 (англ.)

Методом Кнудсена (по потере веса эффузионной камеры) измерены давления паров двадцати полициклич. ароматич. углеводородов. Теплоты сублимации (ΔH , ккал/моль) и энтропии (ΔS° , энтр. ед.) рассчитаны для следующих углеводородов: 1,2-бензантрацен ($\Delta H=28,8$; $\Delta S^\circ=44,8$); тетрацен (29,8; 43,3); хризен (28,1; 43,0);

 ΔH

X. 1968. 22

трифенилен (25,6; 33,9); 3,4-бензофенантрен (25,4; —);
п-терфенил (28,3; 47,9); 1,12-бензперилен (30,0; 40,7);
3,4-бензтетрафен (32,6; 45,9); 1,2,5,6-дибензантрацен
(33,9; 49,3); пентацен (37,7; 48,9); пицен (33,5; 45,9);
коронен (30,7; 36,9); 1,2,4,5-дибензпирен (32,9; 48,3);
1,2,6,7-дибензпирен (35,1; 45,6); 1,3,5-трифенилбензол
(34,0; 55,6); тетрабензонафталин (33,9; 47,4); изовиолан-
2-трин А (52,2; 54,6); виолантрин А (46,8; 48,1); виолан-
трин В (36,7; 38,0); тетрабензоперилен (28,2; 44,7). Не-

большие значения ΔH для виолантрена В, тетрабензопе-
рилена и тетрабензонафталина могут быть отражением
существования некомпланарной структуры их молекул.
Более того, большие значения ΔS° для трифенилбензола
и терфенила говорят о возможности вращения вокруг их
одинарных связей.

В. Карелин

[С - Н - соед.]

1968

Алканы

1 Б700. Исследование теплоемкости жидких н-алканов. Ахмедов А. Г. «Азәрб. довләт пед. инст. елми әсәрләри, Уч. зап. Азерб. гос. пед. ин-та», 1968, сер. II, № 6, 67—70

Микрокалориметрически исследованы изобарные теплоемкости жидких н-алканов с н-гептана до н-гептадекана (кроме н-додекана, н-тридекана и н-тетрадекана) при 20°. А. М.

(Ср)

X. 1970. 1

n-alkane

74-68532

1968 x

68532h Heat capacity of liquid n-alkanes. Akhmedov, A. G. (USSR). *Uch. Zap. Azerb. Gos. Pedagog. Inst.* 1968, No. 6, 67-70 (Russ). From *Ref. Zh., Khim.* 1970, Abstr. No. 1B700. Isobaric heat capacities of the liq. n-alkanes from the n-heptanes to n-heptadecane (except n-dodecane, n-tridecane, and n-tetradecane) were studied microcalorimetrically at 20°. NBRK

Cp.

1

of 68532h

1968

Углеводороды

12 Б752. Энтропия насыщенных жидких углеводородов Das T. R., Ibrahim S. H., Kuloor N. R. Saturated liquid entropies of hydrocarbons. «J. Indian Inst. Sci.», 1968, 50, № 4, 364—373 (англ.)

$$S_T^0$$

Предложен метод оценки энтропий насыщ. жидких углеводородов, основанный на использовании аргона в кач-ве эталонного в-ва. Метод проверен на 14 различных углеводородах. Для вычисления энтропии насыщ. жидких углеводородов рекомендуется использовать ур-ние: $S_s = [0,59 \exp(5,456 \cdot 10^{-3} T_b)] S_A + (9,16 \cdot 10^{-2} T_b - 9,16)$, где S_s — энтропия насыщ. жидкого углеводорода, S_A — энтропия насыщ. жидкого аргона и T_b — норм. т-ра кипения. Это ур-ние позволяет предсказывать энтропии углеводородов, за исключением метана и этилена, со средней ошибкой $\pm 1\%$. В. Ф. Байбуз

X. 1969. 12

$C_n H_{2n-2}$

1968

5 Б37. Точные теплоты атомизации и точные длины связей. I. Бензоидные углеводороды. ~~Le Donald H.~~ Whitehead M. A. Accurate heats of atomization and accurate bond lengths. I. Benzenoid hydrocarbons. «Canad. J. Chem.», 1968, 46, № 12, 2027—2040 (англ.)

В рамках метода Паризера—Парра—Попла рассчитаны теплоты атомизации при 25° длины связей и резонансные энергии для 24 бензоидных углеводородов. Рассчитаны эмпирич. энергии резонанса (ЭЭР). Вводится и кратко обсуждается понятие энергии стабилизации на одну С—С-связь, определяемое как отношение ЭЭР к числу С—С-связей в молекуле. Р. Ф.

2. 1969. 5

1968

Алканы

1 Б792. Система «DARC» (автоматическая корреляционная информационно-поисковая система). Расчет общих свойств фокусированных молекул. Метод возмущения дефокусированной топомодели. Dubois Jacques-Emile, Laurent Daniel. Système DARC. Calcul des propriétés globales de molécules focalisées. Méthode de perturbation de topomodèle défocalisé. «C. r. Acad. sci.», 1968, С 266, № 9, 608—611 (франц.)

Метод DARC (documentation et automatisation de recherches de corrélation) использован для расчета общих св-в фокусированных молекул (молекулы, обладающие характеристическим топологическим элементом). Предложено ур-ние для расчета теплот горения алканов и алкенов. См. РЖХим, 1968, 18А64. А. М.

ΔHc

Ж. 1969. 1

1968

Углеводороды

6 Б876. Давление паров углеводородов при низких температурах. Дыхно Н. М., Цырульников М. В., Мочалова М. В. «Ж. физ. химии», 1968, 42, № 9, 2310—2311

Из анализа данных по давлению насыщ. паров углеводородов установлено, что при низких t -рах давление насыщ. паров углеводородов определенного гомологич. ряда изменяется линейно с изменением числа атомов углерода в молекуле соединения. Приведены численные значения величин $\Delta \lg P$, характеризующих изменение давления насыщ. пара углеводородов предельного, непредельного, ацетиленового и циклич. рядов с увеличением на единицу числа C -атомов в молекуле соединений. Установлена зависимость величины $\Delta \lg P$ от t -ры и даны аналитич. ур-ния, описывающие эту зависимость.

Автореферат

р

X. 1969. 6

1968

Yuehlogogor

23089v Hydrocarbon vapor pressures at low temperatures. Dykhno, N. M.; Tsyrl'nikova, M. V.; Mochalova, M. V. (Vses. Nauch.-Issled. Konstr. Inst. Kislrod. Kriog. Kompres-sornogo Mashinostr., USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1968, 42(9), 2310-11 (Russ). The dependence of vapor pressure (P) of hydrocarbons in a homologous series was measured at 90-200°K. In all homologous series in question, the $\log P$, at a const. temp., decreases linearly with the increasing of the no. of carbon atoms in the mol. The change of $\log P$, $\Delta(\log P)$, corresponding to an increase of one C atom in the mol. depends on the temp. The $\Delta(\log P)$ is $8.7 \times 10^{-0.0047T}$ for paraffinic hydrocarbons; $6.9 \times 10^{-0.0043T}$ for olefinic; $6.4 \times 10^{-0.0036T}$ for acetylenic hydrocarbons; and $4.1 \times 10^{-0.0029T}$ for cycloparaffinic hydrocarbons.

Petr Boček

C.A. 1969. 70.6

С-Н-соед Кесельман П. М. и др. 1968

Ср
Св. Темно-Массонерное,
Докл. Всесоюзного Собрания,
Звд 1968, 7, 142.

● (Сел. Нзр) II

C-H - соед.

1968

22 Б823. Теплота испарения углеводородов. Morsy
Tawfic E. Verdampfungswärme von Kohlenwasserstof-
fen. «Gas- und Wasserfach», 1968, 109, № 13, 335 (нем.)

Для 26 углеводородов вычислена постоянная r_0 в
ккал/кг, необходимая для расчета теплоты испарения (r)
по ур-нию: $r = r_0 (1 - T/T_k)^{0,39}$. Среднее отклонение вы-
численных значений r от эксперим. составляет 2,6%, мак-
симальное отклонение (для бензола) 5,9%. Р. В.

ΔH_v

x. 1968. 22

C_nH_m

1968

5/15
ymlbajno
sob.

81112n Heat of vaporization of hydrocarbons. Morsy, Tawfik E. *Gas- Wasserfach* 1968, 109(13), 335 (Ger). A log-log graph of r/r_0 vs. $(T_k - T)/T_k$ plus tabulated data for M (mol. wt.), T_k in °K., and r_0 in kcal./kg. makes it possible to est. the heat of vaporization of selected hydrocarbons at any given temp. T (°K). r is the heat of vaporization at the given temp. and r_0 is the hypothetical heat of vaporization at 0°K. An example is given for C₃H₈.
Roger W. Ryan

C, A. 1968. 69. 20

1968

Углеводороды

6 Б875. Теплофизические свойства жидких предельных углеводородов в зависимости от температуры. Мустафаев Р. А. «Ж. физ. химии», 1968, 42, № 9, 2190—2192

Путем обобщения эксперим. данных получены ф-лы для вычисления т-рной зависимости теплофиз. св-в (теплопроводности, теплоемкости, плотности и поверхностного натяжения) углеводородов в гомологич. рядах *n*-алканов, достоверность к-рых подтверждается применимостью этих ф-л к десяти углеводородам. Из анализа эксперим. данных установлены простые соотношения, связывающие теплофизич. св-ва жидк. предельных углеводородов с числом углеродных атомов в молекуле.

Автореферат

Ж. 1969. 6

C-II
Алканы

1968

2 Б699. Нечетно/четные чередования в свойствах *n*-алканов. Price R. G., Perry S. G. Another odd/even alternation in the properties of *n*-alkanes. «Chem. and Ind.», 1968, № 23, 744—745 (англ.)

В дифференциальном калориметре исследованы точки плавления и замерзания чистых *n*-алканов от *n*-октана до *n*-гептадекана при скорости нагревания — охлаждения 4° в мин. Полученные значения T_m плавления и замерзания сравнены с известными литературными данными. Построены графики зависимости разности между экспериментальными и литературными зна-

T_m

X. 1969. 2

чениями от значения литературной величины. Найдено, что результаты для t -р плавления ложатся на одну прямую линию, в то время как результаты для t -р замерзания алканов с нечетным числом атомов углерода и бензола ложатся на одну прямую, а для четных алканов — на другую прямую. Сделан вывод, что у исследованных алканов наблюдается различие в скорости образования центров кристаллизации. Это приводит к тому, что алканы с четным числом атомов C склонны к значительным переохлаждениям. Указывается, что для n -алканов-1 этих эффектов не обнаружено. В. Ф. Байбуз

1968

$C_n H_{2n+2}$
парафиновые
углеводороды

8 Б729. Методика массового расчета термодинамических свойств парафиновых углеводородов. Сейфер А. Л., Смоленский Е. А., Кочарова Л. В. В сб. «Теплофиз. характеристики веществ». Вып. I. М., 1968, 174—185

С учетом попарных взаимодействий хим. связей разработана аддитивная схема расчета термодинам. св-в парафиновых углеводородов. Схема реализована для массовых расчетов на ЭВМ. Резюме

ж. 1969. 8

С-Н

1968

Углеводороды

11 Б779. Расчет теплот образования алифатических углеводородов при нестандартной температуре. Вит-
вицкий А. И. «Ж. физ. химии», 1968, 42, № 9,
2205—2206

Показано, что предложенное ранее автором (РЖХим, 1967, 6Б542) ур-ние для расчета теплот образования газообр. алифатич. углеводородов при стандартных условиях применимо в широком t -рном интервале. Вычисленные значения $\Delta H_{обр}$ при различных t -рах (от 298 до 1500° K) для восьми соединений табулированы.
Г. Славущая

ж. 1969. 11

C-H (α -Olefin Polymers) | 613 | 1968

R.S. Joshi, B.J. Zwolinski,
C.W. Hayes.

"Reprinted from Macromolecules,

(ΔH_f , p.)

1, N30 1968.

(Copyright 1968 by the Amer. Chem.
Society...!).

C-H (Polymers)

614

1968

R.M. Yoshin, B.J. Zwolinski

"Reprinted from Macromolecules"
1, 25, 1968, 25-30

"Heats of Combustion Studies
on Polymers"

1969

Yueh-yang
(mup.)

54345a Determination of the thermodynamic properties of liquid hydrocarbons. Brusset, Henry; Depeyre, Dominique (Ecole Cent, Arts et Mir., Paris, Fr.). *Bull. Soc. Chim. Fr.* 1969, (5), 1493-8 (Fr). The method of calcn. of thermodynamic properties of liq. hydrocarbons is characterized by the introduction of 2 fundamental hypotheses relative to the potential of interaction and to the distribution of liq. mols., and by the use of an expression for the partition function of the system at 3 different levels: that of the equation of state of the liqs., that of the equation of state of the liq.-vapor equil., and that of the thermodynamic property defined at the liq.-vapor equil. By making certain assumptions with regard to the Lennard-Jones potential and certain other parameters, good agreement between exptl. and theoretical values were obtained for the heat of vaporization in an interval of 290°K. for pentane, in an interval of 210°K. for heptane, and in an interval of 160°K. for nonane.

C. L. Deasy

mup.
cb-hd

C. A. 1969. H. 12

1969

Олефины

С-Н

термодинамические
Окисления

20 Б693. Термодинамические параметры окисления стероидных олефинов метаклорнадбензойной кислотой. Cetina R., Zawadzki R. Parametros termodinamicos de la oxidacion de olefinas esteroidales con acido meta chloro parbenzoico. «Bol. Inst. quim. Univ. nac. auton. Mexico», 1969, 21, 206—214 (исп.; рез. англ.)

Измерены константы скорости р-ций (СР) окисления циклопентена, циклогексена, циклооктена, циклододецена и 9 стероидных олефинов метаклорнадбензойной к-той при 0, 10, 20 и 30°. Вычислены параметры активации (ПА) $\Delta H^\ddagger$, $\Delta S^\ddagger$ и $\Delta G^\ddagger$ для всех р-ций при 30°. СР и ПА р-ций эпексидирования олефинов надк-той можно разбить на 3 группы. В 1-ю группу входят незамещ. циклич. олефины, к-рые имеют очень близкие $\Delta G^\ddagger$ и линейно изменяющиеся $\Delta H^\ddagger$ и $\Delta S^\ddagger$. Ко 2-й группе относятся стеронды — производные циклогексена, в к-рых

X. 1970. 20

ненасыщ. центр замещен непосредственно алкилами, а удаленные полярные функциональные заместители локализованы в положении, вызывающем «влияние поля» на СР и ПА. Эти влияния имеют тенденцию компенсировать увеличение СР за счет «метильного эффекта» вследствие торможения СР за счет «влияния поля». Взаимодействие этих противоположных эффектов проявляется в больших колебаниях величин ПА. В 3-ю группу входят стероиды, в к-рых к ненасыщ. центру непосредственно присоединены полярные заместители. Эта группа характеризуется совершенно различными величинами ПА. Обсуждается значение этих данных для понимания механизма р-ции эпоксидирования надкислотами.

И. Васильев

C-H
углеводороды

ΔH_f°

X. 1969. 18

18 Б704. Теплота образования ($\Delta H^\circ_{обр}$) углеводородов и родственных соединений при различных температурах. Das T. R., Ibrahim S. H., Kuloor N. R. Heat of formation (ΔH_f°) of hydrocarbons and related compounds at different temperatures. «J. Indian Inst. Sci.», 1969, 51, № 1, 60—76 (англ.)

1969

Предложены расчетные ур-ния для определения $\Delta H^\circ_{обр}$ орг. в-в вида $\Delta H^\circ_{обр} = M(-A_1 \cdot 10^{-3} T - B_1) - A_2 \cdot 10^{-3} T - B_2$, где M — молекулярный вес, A_1 ; A_2 ; B_1 ; B_2 — константы. Рассмотрено 6 гомологич. рядов — n -парафины, моноолефины, алкилбензолы, цикlopентаны, циклогексаны и n -ацетилены в интервале 300—1500° K. Весь т-рный интервал разбит на 3 участка: 300—500, 500—1000, 1000—1500° и для каждого участка выведены подобные зависимости. Среднее отклонение рассчитанных величин от справочных составляет 0,34 ккал/моль, причем первый член ряда дает значительно большую погрешность. Табулированы ур-ния и значения $\Delta H^\circ_{обр}$ для 0, 400, 800 и 1200° K 109 соединений.

П. М. Чукуров

1969

C-H

Yuebagopogor

 ΔH_f°

7164f Heat of formation (ΔH_f°) of hydrocarbons and related compounds at different temperatures.. Das, Tarun R.; Ibrahim, S. Hamsath; Kuloor, Narasing R. (Indian Inst. Sci., Bangalore, India). *J. Indian Inst. Sci.* 1969, 51(1), 60-76 (Eng). Based on the use of mol. wt. alone, a method of correlating heat of formation (ΔH_f°) is proposed which predicts the data with an av. difference of 0.34 kcal./mole.

B. S. S. R. Rao

C.A. 1969. 71. 2

С-К

1969

Углеводороды

13 Б816. Теплота сгорания углеводородов при 298° К. Das T. R., Ibrahim S. H., Kuloor N. R.: Heat of combustion for hydrocarbons at 298° К. «Indian Chem. Engr», 1969, 11, № 2, 66—67 (англ.).

 $\Delta H_{\text{сгор.}}$

Для шести гомологич. рядов углеводородов, включающих 109 соединений с мол. весом от 16 до 308 и теплотами сгорания от —191 до —3230 ккал/моль, получена линейная зависимость $-\Delta H(\text{сгор.}) = 10,462 M + C$, где M — молек. вес, а $C = 28,54$ для нормальных парафинов, 21,65 для моноолефинов, —61,31 для алкилбензолов, 6,60 для циклопентанов, 1,00 для циклогексанов и 24,81 для ацетиленов. Наибольшая относит. ошибка расчета 0,50%, наибольшая средняя 0,17%, средняя для всех 109 соединений 0,1%.

А. Гузей

X. 1970. 13

1969

Углеводороды

8 Б1014. Давление пара, критический фактор сжимаемости и внутримолекулярный потенциал углеводоро-

дов и продуктов полного фторирования углерода.
D. Onth E., Westmeier. S. Dampfdruck, kritischer Kompressibilitätsfaktor und intermolekulares Potential von Kohlenwasserstoffen und Perfluorkohlenstoffen. «Z. phys. Chem.» (DDR), 1969, 241, № 11—2, 43—48 (нем.)

Для углеводородов и продуктов полного фторирования углерода изучена взаимосвязь значений ацентрич. фактора и числа атомов углерода, критич. фактора сжимаемости и числа атомов углерода. Показано, что для фторпроизводных внутримолек. потенциал меньше зависит от взаимной ориентации молекул, чем для углеводородов. Резюме

У. 1970. 8

Гребенко

1969

48241t Physical properties of hydrocarbons. IV. Equations for evaluating enthalpy. Hirata, Mitsuho; Suda, Seiji (Fac. Eng., Tokyo Metrop. Univ., Tokyo, Japan). *Sekiyu Gakkai Shi* 1969, 12(9), 711-15 (Japan). A review chiefly on the work by L. C. Yen and R. E. Alexander (1965), concerning the ~~estm~~ of enthalpies of gases and liqs. 5 refs. T. Akehata

ΔH vapor
и туги.

C.A. 1970. 72. 10

1989

Yuebozayov

ΔH_v

83230k Physical properties of hydrocarbon. V. Heat of vaporization. Hirata, Mitsuho; Suda, Seijiro (Fac. Eng., Tokyo Metrop. Univ., Tokyo, Japan). Sekiyu Gakkai Shi 1969, 12(10), 796-800 (Japan). Heats of vaporization (H_{v}) of 114 org. and inorg. compds. were calcd. from equations in which H_{v} could be calcd. from the std. b.p., crit. pressure, crit. temp., etc., as proposed by Giacalone (1951), Viswanath and Kuloor (1966), and Procopio and Su (1968), resp. H_{v} values of 43 compds. for which crit. data were not available, were calcd. from the std. b.p. only, by using 4 different equations; results were compared with data given by Fishtine (1963).

T. Amemiya

C.A. 1830. 72. 16

1969

C-H
 C-H-O } соединенные

24 Б1425. Энтальпии сольватации различных неэлектролитов в воде, пропиленкарбонате и диметилсульфоксиде. Krishnan C. V., Friedman Harold L. Solvation enthalpies of various nonelectrolytes in water, propylene carbonate, and dimethyl sulfoxide. «J. Phys. Chem.», 1969, 73, № 5, 1572—1580 (англ.)

При 25° измерены теплоты р-рения большого числа неэлектролитов (в основном спиртов и углеводов) в H_2O , пропиленкарбонате (I) и $(\text{CH}_3)_2\text{SO}$ (II). Концентрации р-ренных в-в были таковы, чтобы можно было пренебречь взаимодействием между их частицами. Энергии сольватации для алифатич. соединений в I и II аддитивно состояются из отдельных групповых составляющих; в H_2O необходимо учитывать неаддитивную

$\Delta H_{\text{ад}}$

X. 1969. 24



«структурную» составляющую. Для ароматич. соединений такой простой анализ оказался менее успешным. Структурный эффект в энтальпии гидратации *n*-спиртов меняется от $\sim -2,5$ ккал/моль для CH_3OH до $\sim -8,5$ ккал/моль для $\text{C}_5\text{H}_{11}\text{OH}$. Зависимость этого эффекта от длины цепи вблизи $\text{C}_5\text{H}_{11}\text{OH}$ имеет тенденцию к сглаживанию. Энтальпия Н-связи между *n*-спиртом и р-рителем равна $\sim -8,1$ ккал/моль в II и $-6,2$ ккал/моль в I. Резюме

Алканы

1969

19 Б630. Теплофизические свойства жидких предельных углеводородов в зависимости от температуры. Мустафаев Р. А. «Изв. высш. учебн. заведений. Энергетика», 1969, № 2, 129—133

Путем обобщения эксперим. данных, на основе метода соответственных состояний, получены обобщенные зависимости для вычисления т-рной зависимости теплофиз. св-в (теплопроводности, теплоемкости, плотности и поверхностного натяжения) углеводородов в гомологич. рядах нормальных алканов, достоверность к-рых подтверждается применимостью этих ф-л к 9 углеводородам. На основе полученных ф-л вычислены теплофизич. константы высших углеводородов. Резюме

X. 1969. 19

Алканы

1969

ΔH_f°

Расчет

✓ 22 Б753. Сочетание аддитивной схемы с ЛСЭ для расчета энтальпий образования органических соединений. I. Уточнение аддитивных и вычисление конформационных вкладов для алканов. Пальм В. А., Лебедева Н. Д. В сб. «Реакц. способность орган. соедин. Т. 6. Вып. I». Тарту, 1969, 61—83 (рез. англ.)

ж. 1969. 22

C-Н-соед.

1969

21 Б612. Теплоемкость и физические переходы ряда диалкилфталатов. Рабинович И. Б., Мартыненко Л. Я., Маслова В. А. «Тр. по химии и хим. технол.» (Горький), 1969, вып. 2(23), 10—14

Измерена теплоемкость диметил- (I) и диоктилфталата (II) в области 80—360° К и дибутилфталата (III) в области 60—360° К. Кривые $C_p = f(T)$ проявляют переходы стекло→переохлажденная жидкость, переохлажденная жидкость→кристалл, кристалл→жидкость. Определены t -ры и теплоты переходов. Установлено, что II и III не кристаллизуются, а существуют только в жидк. и стеклообразном состояниях. Определены t -ры и оценены теплоты стеклования. Зависимость t -ры стеклования диалкилфталатов от числа CH_2 -групп в алкильных радикалах описывается кривой с минимумом. Рассчитаны функции $H_T^\circ - H_0^\circ$, S_T° и $G_T^\circ - H_0^\circ$ изученных фталатов в области 80(60)—360° К. Существенное раз-

X. 1970. 21

личие физ. переходов и их термодинамич. характеристик изученных диалкилфталатов объяснены противоположным влиянием длины алкильных радикалов на ориентац. и дисперсионную энергию межмолек. взаимодействия.

Автореферат

С-Н-
Углевод-
роды

16818. Аномалия теплоемкости в хризене. Ringel H., Damask A. C., Arndt R. A. Heat capacity anomaly in chrysene. «Molec. Crystals», 1969, 5, № 3, 295—296 (англ.)

1969

На прецизионном дифференциальном микрокалориметре измерена теплоемкость в интервале t -р от -60° до точки плавления след. в-в: 1,2-бензантрацена, хризена, пирена, трифенилена, 5,6-бензохинолина, флуорена и флуорантена. У хризена найдено аномальное поглощение тепла 860 ± 40 кал/моль вблизи 230° , что указывает на превращение, связываемое с изменением распределения атомов водорода.

Ю. Мнюх

C_p, T_{t2}

X. 1970. 1

1969

Ynelogpago

 ΔH_v

64967u Generalized method for estimating the latent heat of vaporization of organic compounds. Sastri, S. R. S.; Rao, M. V. Ramana; Reddy, K. A.; Doraiswamy, L. K. *Brit. Chem. Eng.* 1969, 14(7), 959-63 (Eng). A latent heat factor (LHF) is proposed which is strictly temp. independent and can be accurately predicted from chem. structure by using the equation $H_{\infty} = H_v / (1 - T_r)^n$ in which H_v = the mol. wt. of the compd. times its heat of vaporization in kcal./g.; T_r = the reduced temp. of the compd., and n depends on the compd. used and varies as a function of the reduced boiling point (T_{Br}). T_{Br} may be evaluated directly by Lydersen's method (1955). The calcd. values for the heats of vaporization for some hydrocarbons whose T_{Br} is >0.71 are tabulated, as well as the contributions due to aliphatic, alicyclic, and aromatic hydrocarbon groups, ring formations, O, H, and N contg. groups, S halogen groups, and selection rules for halogen increments in aliphatic compds. H. F. Pool

C.A. 1969.

71.14

Угледорода

1969

C-H

9 Б758. Аппроксимация констант фазового равновесия углеводородов функциями от трех переменных на ЭВМ. Выборнов Н. М. «Сб. тр. молодых специалистов ВНИИгаза», 1969, вып. 2, 46—56

Кратко рассмотрены эмпирич. и термодинамич. методы корреляции зависимостей констант фазового равновесия многокомпонентных смесей от давл., т-ры и состава обеих фаз. Эмпирич. методом с помощью ЭВМ найдены аналитич. зависимости констант фазового равновесия углеводородов как от 2 переменных (давл. и т-ры), так и от 3 переменных (давл., т-ры и давл. схождения). Рассчитаны и приведены коэф. полученных многочленов для *n*-гексана. Ср. относит. погрешность в определении констант составила 4,6%. В. Байбүз

X. 1971.9

C₂₀H₁₄



триптицен

1970

17 Б668. Теплоемкость и термодинамические функции кристаллического и жидкого триптицена. Andrews John T. S., Westrum Edgar F., Jr. The heat capacity and thermodynamic functions of crystalline and liquid triptycene. «J. Chem. Thermodyn.», 1970, 2, № 2, 245—253 (англ.)

С помощью двух адиабатич. калориметров измерена теплоемкость тв. и жидк. триптицена (9,10-о-бензидо-9,10-дигидроантрацена) (I) в интервале 10—550° K, энтальпия плавления 7236 кал/моль и тройная точка 527,184° K. Чистота образца 99,999 мол.%. Вычислены термодинамич. св-ва I C_p , S° , $H^\circ - H_0^\circ$ и $(G^\circ - H_0^\circ)/T$ в тв. и жидк. состоянии в интервале 10—550° K. При 298,15° K для тв. $C_p = 67,56$; $S^\circ = 65,48$; $-(G^\circ - H_0^\circ)/T = 32,25$ кал/моль·град.; $H^\circ - H_0^\circ = 9909$ кал/моль. С помощью рентгеноструктурного анализа установлена орто-



ромбич. модификация кристаллов I, измерены параметры элементарной ячейки (0,826; 2,055 и 0,811 нм) и вычислена плотность крист. I (1,227 г/см³). Сопоставлена теплоемкость I и бицикло-[2,2,2]-октана (II). Теплоемкость I можно интерпретировать как сумму теплоемкости II и утроенной колебательной теплоемкости бензола, минус вклад трех деф. кол. с частотой $\sim 100 \text{ см}^{-1}$. Эта модель дает удовлетворительные результаты до $t = 164^\circ \text{ K}$, при к-рой II имеет фазовый переход в тв. состоянии. Большое различие между теплоемкостью жидк. и крист. I (11,48 кал/моль·град. или 5,8 R) указывает, что молекулы I жестко закреплены в крист. решетке и приобретают вращательные степени свободы лишь при плавлении, причем вблизи т. пл. вращение молекул в жидк. фазе заторможено.

И. Васильев

C-H-соед.

1970

7 Б869. О расчете теплоемкости 2-диметилалканов и проверка метода Джонсона и Хуанга. Ахмедов А. Г. В сб. «Теплофиз. свойства жидкостей. М., «Наука», 1970, 39—40

С использованием лит. эксперим. данных по теплоемкости 2-метилбутана и 2-метилпентана, рассчитана мол. теплоемкость гомологов 2-диметилалканов по предложенной авторами ф-ле и методом Джонсона и Хуанга. На примере *n*-пептана, *n*-гексана и их нек-рых изомеров показано, что большое отклонение (14%), к-рое получается по методу Джонсона и Хуанга относительно эксперим. данных, обусловлено не только эффектом концевых метильных групп, но и структурой молекулы.

Автореферат

(Ср)

Х. 1971. 7

C-H-соед.

1970

3 Б785. Исследование теплоемкости жидких н-алканов. Ахмедов А. Г. «Ж. физ. химии», 1970, 44, № 8, 2061—2062

Методом микрокалориметра регулярного теплового режима определены изобарные теплоемкости (C_p) н-гептана, н-октана, н-нонана, н-декана, н-ундекана, н-пентадекана, н-гексадекана и н-гептадекана при 20°. Вычислена мол. изохорная теплоемкость (C_v) н-гептана, н-октана, н-нонана, н-декана, н-ундекана, н-додекана, н-тридекана и н-тетрадекана по ф-ле Сакиадиса и Котеса. Для этих в-в установлена линейная зависимость между C_v и числом атомов углерода в молекуле. Дано объяснение изменения C_v в зависимости от состава.

Автореферат

C_p

X. 1971. 3

1970

С-Н-соед.
(системы)

6 Б943. К термодинамике смешанных систем из *n*-парафинов. Asbach G. - I., Kilian H. G. Zur thermodynamik von Mischsystemen aus *n*-Paraffinen. «Ber. Bunsenges. phys. Chem.», 1970, 74, № 8—9, 814—823 (нем.; рез. англ.)

диаграмм
состояний

Выполнен термодинамич. расчет изобарных диаграмм состояния двойных систем из *n*-парафинов. На основании этих данных и др. параметров, к-рые могут быть получены из т-р плавления гомологич. однокомпонентных систем, можно рассчитать изобарные диаграммы состояния тройных систем, в к-рых имеют место двойные тв. р-ры или эвтектич. кристаллизация. Расчет свободной энергии (при постоянном давл. и составе) в зависимости от т-ры позволяет теоретически решить, образуются ли в системе двойные тв. р-ры или имеет место эвтектич. кристаллизация. Такое предсказание может быть проверено экспериментально.

Резюме

Х. 1971. 6

1970

C-H-coeq

Arnet E. M., et al.

J. Amer. Chem. Soc.

ΔH

92, v 5, 1260

(Ceq. C-N-H-coeq) I

С-И-сод.

1970

8 Б671. Расчет равновесия алкиладамантанов состава $C_{11}-C_{15}$. Багрий Е. И., Санин П. И. «Нефтехимия», 1970, 10, № 6, 795—799

По приближенному методу, основанному на прямом конформац. анализе, рассчитан равновесный состав алкиладамантанов состава $C_{12}-C_{15}$. Для алкиладамантанов состава $C_{12}-C_{13}$ вычисленные значения содержания изомеров в равновесной смеси сопоставлены с ранее найденными эксперим. значениями; получено хорошее соответствие.

Автореферат

равновесия

X. 1971.8

1970

Угледорода

C₁—C₅

14 Б857. Термодинамические исследования реакций термоокислительного пиролиза углеводородов C₁—C₅ до алкинов и синтез-газа. Филиппова В. И., Петренко И. Г. «Тр. Ин-та горючих ископаемых М-ва угольн. пром-сти СССР», 1970, 25, № 1, 142—149

Проведены термодинамич. исследования р-ций термоокислительного пиролиза алканов и алкенов до алкинов и синтез-газа. Получены константы равновесия, тепловые эффекты, изменения свободной и связанной энергий, а также равновесные составы газовой смеси в зависимости от т-ры в интервале 298—1500° К. Показано, что для получения ацетилена методом термоокислительного пиролиза лучше всего использовать высшие алканы или низшие алкены.

Резюме

X. 1970.

14

C-И-сод

1970

20 Б685. Использование данных о химических сдвигах ядерного магнитного резонанса для определения термодинамических констант комплексов с переносом заряда, образуемых π -акцепторами и метилбензолами. Foreman M. I., Foster R., Fyfe C. A. Thermodynamic constants for some π -acceptor-methylbenzene charge-transfer complexes from nuclear magnetic resonance shift measurements. «J. Chem. Soc.», 1970, B, № 3, 523—530 (англ.).

По данным о хим. сдвигах при различных T -рах определены энтальпии ($\Delta H^\ominus$) и энтропии ($\Delta S^\ominus$) образования ряда комплексов метилбензолов с π -акцепторами в р-рах. Для ряда комплексов с одним и тем же акцептором наблюдаются регулярные зависимости между $\Delta H^\ominus$ и $\Delta S^\ominus$ и между $\Delta H^\ominus$ и потенциалом ионизации донора. Изучена зависимость величины $\Delta H^\ominus$ от типа используемого р-рителя (CCl_4 , CHCl_3 , $\text{CH}_2\text{ClCH}_2\text{Cl}$). По резюме

X. 1970. 20

C-H

1970

6 Б993. Метод определения термодинамических характеристик с помощью пьезокварцевого микровзвешивания. Гугля В. Г., Иванов Г. А. «Изв. высш. учебн. заведений. Черн. металлургия», 1970, № 11, 24—28

Разработан метод определения с помощью пьезокварцевого микровзвешивания давл. насыщ. пара компонентов р-ров и связанных с ними термодинамич. характеристик. Разобраны 2 варианта реализации метода: диффузионный и по испарению пробы в вакууме. Проведен анализ ошибок измерения. Диффузионным методом определены при т-рах 130—146° давл. насыщ. пара и теплота испарения сквалана. Резюме

P
ДН

X. 1971.6

C-H

1980

Углеводороды

18 Б581. Теплоемкость углеводородов в нормальной жидкой области. Hadden Stuart F. Heat capacity of hydrocarbons in the normal liquid range. «J. Chem. and Eng. Data», 1970, 15, № 1, 92—98 (англ.)

Литературные данные об теплоемкости гомологич. рядов углеводородов представлены в виде аналитич. зависимостей от приведенной т-ры (отношения т-ры к т-ре кипения) и числа атомов С в молекуле. Для *n*-алканов с более чем 5 атомами С теплоемкость представлена в виде суммы полинома третьей степени по приведенной т-ре и аналогичного полинома, умноженного на число атомов С. В таком же виде представлены значения для 2-метилалканов, 1-алкенов и *n*-алкилциклогексанов. Значения для *n*-алкилциклопентанов и *n*-алкилбензолов представлены в виде произведения двух различных ку-

1 Cp)

X. 1970. 18

бич. полиномов по приведенной т-ре, возведенных в степени, определяемые числами атомов С в молекулах. Для *n*-алкилциклопентанов показателями степени являются числа, выражаемые через натуральный логарифм числа атомов С. В кач-ве исходных данных использовались значения, полученные после 1945 г. (иногда после 1930 г.). На основе теории конформальных р-ров вычислены теплосмкости нек-рых смесей жидк. *n*-алканов.

С. Ф. Шушурин

C-H-coeq

Yoshi R. M.

1980

ΔG_f
Kp

J. Polym. Sci., Part A-2,
8 (May), 679.

(cell. C_3O_2) $\cdot$ II

I

