

C-H-соед.

1970

20 Б682. Устойчивость бициклических катионов в газовой фазе. Kaplan Fred, Cross Paul, Prinstein Richard. Gas-phase stabilities of bicyclic cations. «J. Amer. Chem. Soc.», 1970, 92, № 5, 1445—1446 (англ.)

Рассмотрен вопрос об устойчивости катионов бицикло[2,2,2]октила (I) и бицикло[2,2,1]гептила (II) в газовой фазе. Оценены теплоты образования I (182 ккал/моль) и II (179 ккал/моль). Н. А. Попов

ΔH_f

X. 1970. 20

C-M-соед.

1970

19 Б523. Теплоты сгорания и свободные энергии изомеризации некоторых производных бицикло(2,2,1)гептана. Козина М. П., Горошко Н. Н., Скуратов С. М., Беликова Н. А., Платэ А. Ф. В сб. «Термодинамич. и термохим. константы». М., «Наука», 1970, 158—163

Определены теплоты сгорания экзо- и эндо-изомеров 2-метилбицикло (2,2,1) гептана и 1-метилбицикло (2,2,1) гептана. Рассчитаны: а) стандартные теплоты образования этих в-в в жидк. состоянии из элементов, б) теплоты р-ций изомеризации, в) величины ΔG для р-ций экзо-→эндо-изомеризации.

Резюме

ΔH_f

X. 1970. 19

1970

Углеводороды

19 Б533. К сравнительному расчету термодинамических функций растворения в газо-жидкостной хроматографии. Легкие углеводороды. Король А. Н. В сб. «Термодинамич. и термохим. константы». М., «Наука», 1970, 21—27

ΔH_{ap}
 ΔS_{ap}

Определены теплоты и энтропии р-рения легких углеводородов в различных орг. р-рителях методом ГЖХ. Показано, что теплоты р-рения исследуемых в-в могут быть вычислены на основе учета дисперсионных сил и работы на образование дырки. Предложен механизм образования дырки, состоящий в сдвиге молекул из области упорядоченной структуры. Показано, что изменение энтропии вращения может быть рассчитано на основе термодинамич. соотношений. Установлена связь между изменением энтропии вращения и сжатием жидкости.

Резюме

X. 1970. 19

C-H (система)

1970.

непросто-
гит-ка
р-уи

34667d Survey of the literature on the carbon-hydrogen system. Krakowski, Robert A.; Orlander, Donald R. (Lawrence Radiat. Lab., California Univ., Berkeley, Calif.). U.S. At. Energy Comm. 1970, UCRL-19149, 70 pp. (Eng). Avail. Dep. CFSTI. From *Nucl. Sci. Abstr.* 1970, 24 (12), 22625. The literature on the C-H system is reviewed. The thermodynamics and heterogeneous kinetics of the reaction; the adsorption of hydrogen on graphite, and the evaporation of graphite are considered. 108 refs. TCNG

C.A. 1971. 74. 8

30 C-H-coeq

DTTUCK A-1609 1970

(p)

123793a Calculation of the pressure curve parameters from atom, atom group, and bond increments. Kollar, Gyorgy; Nagy, Eva (Musz. Egyet. Szervetlen-Kem. Tansz., Budapest, Hung.). *Magy. Kem. Foly.* 1970, 76(8), 394-7 (Hung). The b.p. of an apolar or slightly polar covalent compd. at 0-400° at a pressure p can be calcd. by the equation $t_p = a_p N^{1/3} - b_p$. N is the sum of the atom-, atom group, and bond increments, $a_p = 75.23 - 700.16/(\log p - 7.404)$, $b_p = 406.1 - 1081/(\log p - 10.78)$. The calcd. and measured b.ps. are compared for 17 compds. from $p = 1$ to 760 torr. L. Szalay

C.A. 1970. 73.24

17 соединений (ТВ)

14-106.

1970

Kollar G., Nagy E.,
~~г. Сегед~~

A-1609

Magy. Kem. Foly., 1970, 76, № 8, 394-7
(Венгрия)

Calculation of the pressure
curve parameters from atom,
atom group, and bond
increments.

Б (9) 20

(см. примеч.)

СА, 1970, 73, № 4, 123793a

Угледорода

1970

Д) 3 Б823. Фактор ацентричности и энтропии испарения насыщенных алифатических углеводородов. Nath J. a n. Acentric factor and entropies of vaporization for saturated aliphatic hydrocarbons. «Indian J. Chem.», 1970, 8, № 6, 561—562 (англ.)

Определены избыточные энтропии и факторы ацентричности (ω) для 28 соединений. Показано, что избыточные энтропии и ω зависят от положения группы $-\text{CH}_3$ в молекуле. Понижение избыточной энтропии с понижением ω объяснено уменьшением числа точечных центров взаимодействия вследствие экранирования атомов углерода в основных цепях группами $-\text{CH}_3$ в боковых цепях.

С. А. Ивашин

ΔH_v

X. 1971. 3

C-H
А. М. Канар

48627u) General form of an equation for valence bond energy. Nekrasov, B. V. (USSR). *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 1970, 192(3), 572-3 [Chem]. (Russ). The previous equation for bond energy in covalent bonds in terms of dynamic electron affinity of the atoms involved and their formal charges was modified by using the geometric mean instead of arithmetic mean for the contribution of the electron affinity on the part of the atoms. The new equation has the form: $E_{AB} = K^k (E_{AB} \cdot E_{BA})^{0.5} - 332 \delta_A \delta_B / \tau_{AB} d_{AB}$ kcal/mole, where d_{AB} is the internuclear distance and τ_{AB} a scattering factor characteristic of a given valency bond which replaces the dielec. permeability concept of the macroscopic systems; K^k is the covalent coeff. The formula was applied to a series of alkanes using $d = 1.10 \text{ \AA}$ for CH distance and $1.54 \text{ \AA}$ for CC distance, with $\tau_{AB} = 3.1$. The resulting calcd. bond energies were compared with exptl. at. heats of formation and were in agreement generally within 0.3 kcal/mole. Other forms of the expression are briefly discussed. G. M. Kosolapoff

1970

ΔH атома

парей

C.A. 1970. 73. 10

1970

C-H-calc

(25476a) Heat of formation of the norbornyl radical and the bridgehead bond dissociation energies in norbornane. O'Neal, H. Edward; Bagg, J. W.; Richardson, William Harry (Dep. Chem., San Diego State Coll., San Diego, Calif.). *Int. J. Chem. Kinet.* 1970, 2(6), 493-6 (Eng). From a kinetic study of the gas phase reaction of norbornyl iodide and HI at 375°, the heat of formation of the norbornyl radical is 32.6 kcal/mol and the C-H and C-I bridgehead bond dissocn. energies in norbornane and norbornyl iodide, resp., are 96.7 and 62.5 kcal/mole. CJJN

 ΔH_f°

C-A-1971-74-6



Биссекто-
 $[2, 2, 1]$ - план



картинка из

C-H-соед,

1970

18 Б589 Dep. Попарные взаимодействия атомов и свойства X-замещенных пропана. Папулов Ю. Г., Левин В. П. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1970, 6 стр., библиогр. 9 назв.

Выведена ф-ла. для энергий образования X-замещенных пропана, учитывающая валентные и невалентные взаимодействия атомов, удаленных через один, два и три атома, и поворотную изомерию. Исследовано действие постулата о ср. арифметич. для невалентных взаимодействий. Приведен расчет теплот образования метилзамещенных.

Автореферат

ΔH_f°

X. 1970. 18

Алканы

С-Н-соед

1970

№ 14 Б844. Зависимость теплот образования алканов от степени замещения. Папулов Ю. Г., Чулкова Л. В., Левин В. П., Сошникова Т. А. «Уч. зап. Калининск. гос. пед. ин-та», 1970, 76, 113—116

Построен график, изображающий зависимость известных в настоящее время эксперим. значений теплот образования предельных углеводородов от числа заместителей. Проанализированы типы замещения. Резюме

ΔH_f

X. 1970.

14

C-H-coeq

1970

ΔH_f (46320k) Dependence of the heats of formation of alkanes on the degree of substitution. Papulov, Yu. G.; Chulkova, L. V.; Levin, V. P.; Soshnikova, T. A. (USSR). *Uch. Zap., Kalinin. Gos. Pedagog. Inst.* 1970, 76, 113-16 (Russ). Exptl. heats of formation of C_{1-8} alkanes were plotted against the no. of substituents l of the formula $CH_{4-l}X_l$, where X is an alkyl groups. The alkanes were divided into 4 groups, whose heats of formation lie on 4 quadratic curves.
Karel A. Hlavaty

C. A. 1971. 74. 10.

$C_n H_m$

1880

41238a Latent heat of hydrate formation. Iskenderov, S. M.; Musaev, R. M. (USSR). *Gazov. Delo* 1970, (12), 6-8 (Russ). Methods of calcn. of latent heat are reviewed with an emphasis on the Clausius-Clapeyron equation. The calcns. show that the latent heats of formation of hydrocarbon hydrates increase with mol. wt. Those of natural gases change with compn. J. Pietkiewicz

гидраты
углеводородов

C.A. 1971 48 6

1970

Номограмма (C-H comp)

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

(102681x) Nomogram predicts heat of combustion of hydrocarbons and related compounds at 298°K. Rao, A. V.; Kuloor, Narasing R. (Dep. Chem. Eng., Indian Inst. Sci., Bangalore, India). *Petrol. Hydrocarbons* 1970, 5(2), 43-6 (Eng). Pub. in Chem. Age India 21(7). A nomogram for detg. the heats of combustion of hydrocarbons and related compds. at 298°K is given.
A. P. Som

C.A. 1970. 73.20

Углеводороды

С-Н-соед.

1970

6 Б977. Уравнение для расчета теплоты испарения углеводородов метанового ряда при различных температурах. Соколов С. Н., Базулев В. М. «Изв. высш. учебн. заведений. Нефть и газ», 1970, № 9, 88—90

Получено ур-ние для расчета теплот испарения углеводородов метанового ряда, к-рое может быть использовано в широком диапазоне т-р (от т. пл. до т-ры, равной 0,8 крит. т-ры). Теплота испарения углеводородов метанового ряда представлена как функция числа атомов углерода и водорода в молекуле и крит. т-ры. Расхождение между вычисленными и опытными значениями теплот испарения не превышает 1,5%, что находится в пределах точности опытов по определению этих величин. Полученное ур-ние использовано для расчета теплот испарения старших членов углеводородов метанового ряда, для к-рых отсутствуют опытные данные. Резюме

ΔH_v

У. 1971. 6

C-H

1970

~~with polyethylene glycol as the solvent. In a tunnel-shaped
cavity, no effects were detected after 3 days.~~ ~~CFN~~

(23753n) Transport and thermodynamic properties in alkanes.
Shih, Hsiang (Yale Univ., New Haven, Conn.). 1969, 197 pp.
(Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich.; Order No.
70-2805. From *Diss. Abstr. Int. B* 1970, 30(8), 3596.

SNDC

repro.
eb-ba

C.D. 1970.73.24

1970

Унелоггегор

Waisel St.,
Lifson St.

SMS;
красн.
сир-ра

Y. Chem. Phys.,
1970, 53, ~2, 582.

(Cu. Yneboq) III

C-H-соед.

1970

3 Б841. Скорость молекулярного испарения линейных алканов. Wall Leo A., Flynn Joseph H., Straus Sidney. Rates of molecular vaporization of linear alkanes. «J. Phys. Chem.», 1970, 74, № 17, 3237—3242 (англ.)

Методом термогравиметрии определена скорость испарения 4 соединений: $C_{19}H_{40}$, $C_{24}H_{50}$, $C_{36}H_{74}$, $C_{94}H_{190}$. Показано, что теплота испарения этих соединений выражается ур-нием: $\Delta H = 3,21 n^{2/3} - 0,0193 \cdot T + 2,92$ ккал/моль, где n — число атомов углерода в молекуле. Выведено ур-ние для энергии активации сублимации: $\varepsilon = 3,21 n^{2/3} = 0,0223 \cdot T + 2,92$. Сделан вывод, что сублимация рассматриваемых соединений, а также алканов с большим числом атомов углерода, происходит без разложения.

С. А. Ивашин

ΔH_v

P_i

Х. 1971. 3

Углеводороды (С-Н).

1970

8 Б672. Об устойчивости геометрических изомеров циклановых углеводородов. Захаренко В. А. «Нефтехимия», 1970, 10, № 6, 800—804

Теоретически рассмотрены основные параметры, определяющие относит. устойчивость геометрич. изомеров циклановых углеводородов. Наиболее важным параметром является потенциальная энергия несвязанного взаимодействия заместителей. Энтропийные параметры (симметрия изомера, наличие энантиомеров и др.) имеют меньшее значение. На примере расчета равновесных соотношений геометрич. изомеров 1,2,4,5-тетраметилциклогексана и 1,2,3,4-тетраметилциклопентана показана пригодность предложенного метода расчета.

Автореферат

X. 1971.8

C-H-соед.

1971

↓ 9 Б758. Теплостомкости жидких н-алканов при повышенных давлениях. Benson Montford S., Snyder Phillip S., Winnick Jack. Heat capacities of liquid n-alkanes at elevated pressures. «J. Chem. Thermodyn.», 1971, 3, № 6, 891—898 (англ.)

В сильфонном пьезометре измерена сжимаемость н-декана, н-додекана, н-тетрадекана и н-гексадекана при 25, 45, 65 и 85°, а также сжимаемость н-октана при —15, 5, 25, 45, 65 и 85° при давл. до 4000 атм. Вычислены и табулированы коэф. ур-ния Тейта. Рассчитано изменение теплостомкости в зависимости от давл. Погрешность не превышает $\pm 7,5\%$ при самых высоких т-рах и давлениях. И. Васильев

РЖХ, 1972, ~9

1971

С (ушество
горючих)

18 Б684. Термохимия, термодинамические функции и молекулярная структура некоторых циклических углеводородов. Boyd Richard H., Sanwal Shiv N., Shary-Tehrany Shahrokh, McNally Donald. The thermochemistry, thermodynamic functions, and molecular structures of some cyclic hydrocarbons. «J. Phys. Chem.», 1971, 75, № 9, 1264—1271 (англ.)

В бомбовом калориметре при 25° измерены энтальпии сгорания (ΔH_1) жидк. 1,2,3,4-тетрагидронафталина (I), и тв. трицикло[3,3,1,^{13,7}]декана (II), трицикло[5,2,1,0^{2,6}]декана (III), 1,2,3,4,5,6,7,8-октагидроантрацена (IV). Эбулиометрически измерено давл. паров жидк. I; статич. методом: жидк. III, IV, крист. II (бицикло[2,2,1]гептана (V), бицикло[2,2,2]октана (VI) в интервале т-р от T_1 до T_2 . Зависимость давл. паров от т-ры представлена

 ΔH_f

(+1) II

X. 1971. 18



ур-нием $\lg P$ (мм) = $A/T + B + C \cdot \lg T$. Вычислены энтальпии парообразования (ΔH_2) I—VI. В дифференциальном сканирующем калориметре измерены энтальпии плавления (ΔH_3) и теплоемкость жидк. и крист. III и IV. Вычислены энтальпии парообразования при 298° K (ΔH_4) I, II, III, IV, VI; энтальпии образования жидк., крист., а также газ. (ΔH_5) I—VI при 25°. Методом, описанным ранее (см. РЖХим, 1970, 22Б851), вычислены энтальпии образования I—VI н-п-ксилола (VII) и энергии напряжения колец. Далее приведены: соединение, T_1 ; T_2 ; —A; B; —C; — ΔH_1 ; ΔH_2 , ΔH_3 , ΔH_4 , — ΔH_5 в ккал/моль: I; 370; 446; 2797,9; 11,954; 1,187; 1342,61±0,51; 11,92±0,2; —; 13,20±0,3; —5,29±0,81; II; 366; 443; 2746,8; 8,617; 0; 1441,95±0,68; 14,23±0,2; —; 14,45±0,3; 30,65±0,98; III; 358; 417; 2273,7; 7,782; 0; 10,40±0,2; 0,705±0,01; 12,65±0,3; 14,38±0,90; IV; 437; 498; 2383,9; 6,786; 0; 1902,99±0,69; 10,91±0,2; 4,28±0,05; 19,66±0,3; 9,01±0,99; V; 284; 327; 2097,5; 8,479; 0; 1046,24±0,52; 9,59±0,20; —; —; 12,42±0,70; VI; 323; 363; 2416,4; 8,628; 0; 1195,49±0,10; 11,06±0,20; —; 11,40±0,20; 23,75±0,30. Приведены структурные параметры I—VI. Вычислены и табулированы в интервале от T_3 до T_4 термодинамич. функции $(G^\circ - H^\circ_0)/T$; $(H^\circ - H^\circ_0)/T$; S° и C_p° для I—VII, бензола (VIII) и толуола (IX) в состоянии идеального газа. Далее приведены: соединение, T_3 , T_4 , а также при 298,15° K $(G^\circ - H^\circ_0)/T$; $(H^\circ - H^\circ_0)/T$; S° и C_p° в кал/моль·град: I; 200; 600; 69,07; 19,02; 88,10; 35,03; II; 200; 1000; 60,14; 17,17; 77,32; 35,59; III; 200; 500; 69,60; 18,96; 88,56; 36,56; IV; 200; 600; 79,82; 26,85; 106,67; 50,39; V; 200; 500; 59,70; 14,06; 73,76; 26,14; VI; 200; 500; 61,22; 16,57; 77,79; 39,98. Результаты расчета для VII—IX сопоставлены с лит. данными.

И. Васильев

С-Н-соед

1971

Расчет
 ΔH_f
 ΔH_v

Ср (исчисл)

№ 21 Б786 Деп. Термодинамические свойства нефтяных фракций и каменноугольных масел. Гилязетдинов Л. П. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1971. 16 с., библиогр. 8 назв. № 2875—71 Деп.

Предложены ф-лы для расчета стандартных теплот образования, энтропий, теплот испарения и теплоемкостей паров нефтяных фракций и каменноугольных масел. Ф-лы учитывают содержание в этих продуктах серы, азота и кислорода. Погрешность расчетов по этим ф-лам не превышает 3%. Рассчитаны термодинамич. св-ва нефтяных фракций и каменноугольных масел, применяемых в кач-ве сырья при произ-ве сажи. Автореферат

X. 1971. 21

C-H-соед

1971

(4 Б796.) [Расчет] энтропий испарения фторуглеродов и углеводородов по правилу Гильдебранда. Funk E. W., Prausnitz J. M. Entropies of vaporization for fluorocarbons and hydrocarbons from the Hildebrand rule. «J. Phys. Chem.», 1971, 75, № 16, 2530—2532 (англ.)

По лит. данным вычислены энтропии испарения (ΔS) метана, этана, пропана, бутана, пентана, 2-метилбутана, гексана, 2-метилпентана, 3-метилпентана, 2,3-диметилбутана, гептана, циклопентана и соотв-щих перфторсоединений при постоянном мол. объеме насыщ. паров 49,5 л/моль. Найдено, что ΔS для фторуглерода больше ΔS для соотв-щего углеводорода примерно на 1 э. е. Этот результат был предсказан Гильдебрандом и Ротариу (J. am. Chem. Soc., 1952, 74, 4455). Обсуждены причины указанного различия. И. Васильев

ΔS_v
(расчет)

2, 1972, 4

(+1)



Температура
испарения

Углеводороды

1971

13 Б613. Температурные зависимости теплот испарения углеводородов и использование их для определения коэффициентов активности в растворах углеводородов в сквалане. Guermouche Moulay-Hassane, Vergnaud Jean-Maurice. Lois de variation de l'enthalpie de vaporisation d'hydrocarbures avec la température, et utilisation pour la détermination des coefficients d'activité de leur solution dans le squalane. «C. r. Acad. sci.», 1971, С272, № 3, 275—277 (франц.)

X. 1971.13

Opmauer.

coeg.

1971

54206p Studies on organotin compounds using the Del Re method. I. Heats of atomization of organotin compounds. Gupta, R.; Majee, B. (Dep. Chem., North Bengal Univ., Raja

Rammohanpur, India). *J. Organometal. Chem.* 1971, 29(3), 419-25 (Eng). A method for calcg. heats of atomization of organotin compds. by the Del Re approxn. together with the Hueckel procedure (where π -system is also present) has been developed. Results for 13 compds. show an excellent correlation with the exptl. heats of atomization; deviation of the exptl. values from the correlation curve is $<1\%$.

SHataer.

C.A. 1971. 45 8

1971

C-H-сод.
(уикл.)

2 Б757. Энтальпии сгорания и образования некото-
рых алкилциклопропанов. Good W. D. The enthalpies of
combustion and formation of some alkyl cyclopropanes.
«J. Chem. Thermodyn.», 1971, 3, № 4, 539—546 (англ.)

В бомбовом калориметре при 25° измерены энтальпии
сгорания (ΔH_1) и вычислены энтальпии образования
(ΔH_2) жидк. метил-(I), этил-(II), 1-цис-2-диметил-(III),
1-транс-2-диметил-(IV), 1,1,2-триметил-(V) и 1,1,2,2-тет-
раметилциклопропанов (VI). Приведены плотности (D),
производные ($\partial E/\partial P$)_T, теплоемкости (C_P), кол-ва при-
месей (A) в образцах I—VI. Приводятся: соединение,

 ΔH_f

X. 1972. 2

D (г/см³), $-(\partial E/\partial P)_T \cdot 10^3$ (кал/атм·г), C_p (кал/г·град),
 A (мол. %), $-\Delta H_1$, $-\Delta H_2$ (ккал/моль): I; 0,634; —; 0,55;
 0,018±0,004; 649,87±0,14; -0,41±0,16; II; 0,679; 72; 0,54;
 0,25±0,02; 805,91±0,18; 5,92±0,19; III; 0,6889; 72; 0,54;
 0,09±0,05; 805,55±0,14; 6,29±0,16; IV; 0,6648; 72; 0,54;
 0,23±0,12; 804,49±0,18; 7,34±0,19; V; 0,6897; 72; 0,53;
 0,12±0,08; 951,21±0,18; 22,99±0,20; VI; 0,702; 72; 0,52;
 0,04±0,03; 1107,94±0,20; 28,63±0,22. Сопоставлены изме-
 рения энтальпий сгорания гомологов и изомеров в рядах
 циклопропанов, циклопентанов и циклогексанов.

И. Васильев

11130s Nomogram predicts heats of combustion of hydrocarbons and related compounds at 298°K. Ibrahim, S. Ham-sath; Sundaram, Swaminatha (Dep. Chem. Eng., Reg. Eng. Coll., Tiruchirapalli, India).. *Chem. Age India* 1971, 22(2), 46-8 (Eng). The heats of combustion of hydrocarbons and related compds. can be predicted by the following equation within an av. error of 0.1% using only the mol. wt. as the input data: $-\Delta H_{c298} = 10.462 (M) + C$, where H_c is the heat of combustion in kcal/g mole and M is the mol. wt. The const. C varies with the homologous groups. The knowledge of the const. C is not necessary when a nomogram is used to predict the heats of combustion of hydrocarbons and related compds. Six homologs, where mol. wt. ranged between 16 and 308 and where heat of combustion ranged between -191 and -3230 kcal/g mole, were considered in drawing this nomogram. The av. error for the homolog is 0.63% and the overall av. error is 0.44%. For the homologs not covered, the ref. point can be located as point of intersection in the nomogram if at least 2 exptl. values of heats of combustion of the homolog.

A. P. Som

C.A. 1971 45.2

Алканы

C-H-соед

1971

пер. мод.
сб. - в. 8

24 Б912. Термодинамические свойства растворов n-алканов. Часть III. Давление пара и избыточная свободная энергия системы n-октан — циклогексан. Jain D. V. S., Yadav O. P. Thermodynamics of *n*-alkane solutions. Part III. Vapour pressure and excess free energy for *n*-octane—cyclohexane system. «Indian J. Chem.», 1971, 9, № 4, 342—345 (англ.)

Получены эксперим. данные по давл. пара двухкомпонентной системы n-октан — циклогексан во всем интервале составов при t -рах 25; 35; 45; 55°. На основании измеренных величин давл. и составов смеси в жидк. фазе рассчитаны коэф. активности компонентов в р-ре и зна-

X. 1971. 24

1

чения избыточной свободной энергии G^E . По т-рой зависимости G^E определены избыточные эктальпии H^E и энтропия S^E . Проведено обсуждение результатов в свете современных теорий двойных р-ров. Получено хорошее согласие между эксперим. и рассчитанными по теории Флори значениями избыточных объемов. Показано, что все рассмотренные избыточные термодинамич. функции эквимол. смесей n -алканов и циклогексана при одинаковых т-рах линейно зависят от $1/(n+2)$, где n — число атомов углерода в n -алкане. Часть II см. пред. реф.

Л. С. Сердюк

1971

Углерод-
водо

V20 B695. Энтропии, энергии и теплоты испарения углеводородов. Jagan Nath, Yadava M. L. Entropies, energies and heats of vaporization for hydrocarbons. «Indian J. Chem.», 1971, 9, № 12, 1359—1361 (англ.).

Для исследования зависимости внутримолек. взаимодействий от структуры углеводородов проанализированы энтропии, энтальпии и энергии испарения ненасыщ. алифатич., алициклич., и ароматич. углеводородов, рассчитанные из лит. данных о давл. паров в условиях $\lg(P(\text{мм})/T) = -0,4$. Энтальпии и энергии испарения ненасыщ. алифатич. углеводородов увеличиваются с ростом числа атомов С в молекуле, а при неизменном общем числе атомов С уменьшаются с ростом числа CH_3 -заместителей. На энтальпию и энергию испарения алициклич. углеводородов изменение числа CH_2 -групп в

АН

X. 1972.20

алкильных цепях, соединенных с циклом, влияет больше, чем изменение числа СН_3 -групп в цикле. Увеличение энергии и энтальпии испарения ароматич. углеводов, сопровождающее рост числа СН_3 -групп в цикле, не зависит от их положения. Различия в термодинамич. параметрах испарения для цис- и транс-изомеров объясняются различиями в дипольных моментах. Энтропии испарения не подчиняются никакой закономерности.

Б. Ю. Заславский

Yneboopogor

1971

(52945e) Evaluation of the ionization potentials and electron affinities of saturated and unsaturated hydrocarbons and some radicals using the free-electron model. Jannes, G.; Puttemans, J. P. (Belg.). *Bull. Soc. Chim. Belg.* 1971, 80(1-2), 133-49 (Fr). The free electron model is applied to calcs. of ionization potential and electron affinities using only the mol. dimensions and the linear relation between the energy of the highest occupied orbital and the exptl. ionization potential, and the linear relation of the energy of the lowest free orbital and electroaffinity. The results compare favorably with more elaborate calcs. and agree with exptl. results for ionization potentials given in the literature. Calcs. for 15 satd. aliphatic and 13 satd. alicyclic hydrocarbons; 10 aliphatic and 10 cyclic conjugated derivs.; and 88 aromatic compds. are given in tables. In the arom. series, thanks to existing exptl. values, unknown elec-

troaffinities, redn. potentials, and half-wave potentials could be calcd.
Janet E. Austin

C.A. 1971. 75. 8

Алканы

C-H-соед

1971

термод.
св-ва

Теплоты
смешения

24 Б911. Термодинамические свойства растворов алканов. Часть II. Избыточные теплоты смешения *n*-алканов с четыреххлористым углеродом. Jain D. V. S., Yadav O. P., Gill S. S. Thermodynamics of alkane solutions. Part II. Excess heats of mixing of *n*-alkanes in carbon tetrachloride. «Indian J. Chem.», 1971, 9, № 4, 339—341 (англ.)

Экспериментально определены теплоты смешения *n*-гексана, *n*-гептана, *n*-октана, *n*-додекана и *n*-гексадекана с $\sim\text{CCl}_4$ при 26,9° во всем интервале составов. Результаты описываются уравнением: $HE = x_1 \cdot x_2 [A + B(x_1 -$

X-1971-24

$-x_2) + C(x_1 - x_2)^2]$, где x_1 и x_2 — мол. доли соотв. n -алкана и CCl_4 . Значения констант A , B и C , а также результаты экспериментов табулированы. Приведены графич. зависимости H^E от состава. С использованием значений H^E при $x_1=0,5$ определен параметр взаимодействия X_{12} для сравнения полученных данных со значениями, вычисленными по теории Флори. Найдено, что избыточные объемы низших n -алканов удовлетворительно согласуются с теоретическими, однако отклонения от теории возрастают по мере увеличения углеводородной цепи.

Резюме

1971

С-Н

6 Б766. Связь между энтальпией испарения и формой молекул алканов. Richter Harald. Zusammenhänge zwischen der Verdampfungsenthalpie und der Molekülform bei den Alkanen. «Chem.-Ztg», 1971, 95, № 21, 916—918 (нем.; рез. англ.)

Обсуждены соотношения между макрофиз. св-вами и формой молекул, предложенные для алканов различными авторами. Подробно исследована связь между этими св-вами (в частности комбинация их с теплотой испарения) и средн. квадратом радиуса молекул алканов.
В. Байбуз

 ΔH_v

РЖХ, 1972, № 6

C-H-соед
(бицикл.)

1971

2 Б758. Энтальпии сгорания некоторых бициклических соединений. Kozina M. P., Timofeeva L. P., Skuratov S. M., Belikova N. A., Milvitskaya E. M., Platé A. F. The enthalpies of combustion of some bicyclic compounds. «J. Chem. Thermodyn.», 1971, 3, № 4, 563—570 (англ.)

ΔH_f

В бомбовом калориметре при 25° измерены энтальпии сгорания жидк. (ΔH_1) и вычислены энтальпии образования жидк. (ΔH_2) и газ. (ΔH_3) 1,4-диметилбицикло-(2,2,1)-гептана (I); транс-2,3-диметилбицикло-(2,2,1)-гептана (II); 2-метилбицикло-(2,2,1)-гептана-2 (III); 5-эти-

X. 1972

2

лиденбицикло-(2,2,1)-гептена-2 (IV); 1-метилбицикло-(3,1,0)-гексана (V); 1-метилбицикло-(4,1,0)-гептана (VI). Приводятся соединения, $-\Delta H_1$; ΔH_2 ; ΔH_3 ; (ккал/моль): I; $1352,96 \pm 0,30$; $-40,03 \pm 0,32$; $-30,63 \pm 0,38$; II; $1357,08 \pm 0,49$; $-35,91 \pm 0,50$; $-25,71 \pm 0,54$; III; $1163,37 \pm 0,41$; $1,06 \pm 0,42$; —; IV; $1280,78 \pm 0,38$; $24,42 \pm 0,40$; $34,82 \pm 0,43$; V; $1060,32 \pm 0,28$; $-7,93 \pm 0,30$; $0,36 \pm 0,33$; VI; $1216,29 \pm 0,34$; $-14,33 \pm 0,35$; $-4,97 \pm 0,38$. Приведены плотности жидк. I—VI. Рассчитаны энтальпии р-ций изомеризации

некоторых соединений — гомологов бицикло-(2,2,1)-гептана и бицикло-(2,2,1)-гептена-2. Обсуждается относит. термич. стабильность изомеров и энергии напряжения.

И. Васильев

C-H

1971

131286y Estimation of latent heat for hydrocarbons by means of Raman frequencies. Lielmezs, Janis (Dep. Chem. Eng., Univ. British Columbia, Vancouver, B.C.). *Nature (London)*, *Phys. Sci.* 1971, 230(14), 138-9 (Eng). Equations were developed empirically relating the latent heat of vaporization (ΔH) and Raman frequency for normal alkanes, 2-methylalkanes, 2,2-dimethylalkanes, and cycloalkanes, which can be used to est. ΔH at the normal b.p. (T_B), to establish the reliability of measured T_B values and to help interpret mol. spectra when ΔH and T_B are known.

DYJN

ΔH_v

T_B

+1

C.D. 1971.74.24



C-H

1971

$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{22}\text{CH}_3$

$\text{C}_{24}\text{H}_{50}$

ΔH_v

4 Б831. Доказательство отсутствия энергетически обусловленного свертывания молекул парособразных парафинов вплоть до н-тетракозана. Meyer Edwin F., Stec Kenneth S. Evidence against energetically favored coiling of vapor-phase paraffins up to n-tetracosane. «J. Amer. Chem. Soc.», 1971, 93, № 21, 5451—5454 (англ.)

В интервале т-р $t=225-292^\circ$ измерено давл. P насыщ. пара н-тетракозана и получено $\lg P$ (см.) $= 6,31564 - 2289,02/(t+125,23)$ со стандартной ошибкой $1,5 \cdot 10^{-4}$. Поверх. натяжение в интервале т-р $60-150^\circ$ γ (дин/см) $= -0,07476t + 30,9$. Показано, что энтальпия испарения при $t=\text{const}$ линейно зависит от числа атомов $\text{C}(n)$ в молекуле парафина вплоть до $n=24$, что свидетельствует об отсутствии сворачивания молекул. Л. Гвзей

Х. 1972, V.

1971

Y. N. B. S. P. S. S.

118134u Entropies, energies, and heats of vaporization for hydrocarbons. . Nath, Jagan; Yadava, M. L. (Dep. Chem., Univ. Gorakhpur, Gorakhpur, India). *Indian J. Chem.* 1971, 9(12), 1359-61 (Eng). Entropies (ΔS_v), energies (ΔE_v), and heats (ΔH_v) of vaporization have been evaluated for aliphatic unsatd. (alkenes), alicyclic and aromatic hydrocarbons at equal molal vapor vols. ($\log P_{\text{mm}}/T = -0.4$), using the vapor pressure data given in the literature. The data show that the values of both ΔE_v and ΔH_v increase with the increase in the no. of C atoms in the mols. However, the values of entropy of vaporization do not show any such systematic trend. The cis-forms of the mols. have values of ΔE_v and ΔH_v higher in magnitude than those of the trans-forms.

 ΔS_v
 ΔH_v
 ΔG_v

C. A. 1972. 76. 20

C-H-сод

1971

(4 Б812.) Новый водородный калориметр. Теплоты гидрирования аллильных и винильных ненасыщенных [связей], примыкающих к кольцу. Rogers D. W., McLafferty F. J. A new hydrogen calorimeter. Heats of hydrogenation of allyl and vinyl unsaturation adjacent to a ring. «Tetrahedron», 1971, 27, № 16, 3765—3775 (англ.)

АН и др.

Описана конструкция пластикового калориметра для измерения теплот гидрирования орг. соединений на Pd-черни в кач-ве Кт. Необходимое кол-во образца 20 мкл. Т-ру измеряют термистором. Кол-во р-рителя 20—25 мл. Подробно описана методика подготовки, проведения и обработки результатов эксперимента. Калориметр калибровали по теплоте гидрирования гексена-1. Для провер-

х, 1972, 4

ки метода, измерены энтальпии гидрирования пентена-1 $28,5 \pm 0,3$, октена-1 $28,3 \pm 0,6$, циклопентена $26,2 \pm 0,2$, циклогексена $26,9 \pm 0,6$, циклооктена $22,4 \pm 0,3$ ккал/моль. Результаты удовлетворительно согласуются с лит. данными. Измерены энтальпии гидрирования в ккал/моль р-ренных в циклогексане аллилциклопентана $30,9 \pm 0,4$, аллилбензола $30,2 \pm 0,2$ ($30,3 \pm 0,2$ в уксусной к-те), метилбензола $28,5 \pm 0,2$, фенилацетилена $64,7 \pm 0,9$, винилциклопентана $28,4 \pm 0,2$, этилиденциклопентана $24,2 \pm 0,2$, 1-этилциклопентена $23,5 \pm 0,2$, винилциклогексана $27,9 \pm 0,8$, этилиденциклогексана $26,2 \pm 0,3$, гексаметилбицикло[2,2,0]гекса-2,5-диена $31,4 \pm 0,7$. Полученные результаты обсуждаются с точки зрения энергий напряжения в циклах.

И. Васильев

C-H

1971

(A Hv)

52968f Calculation of the heats of evaporation of normal hydrocarbons at melting points from molar volumes. Rapshtynskaya, E. A. (Dnepropetr. Univ., Dnepropetrovsk, USSR). *Khim. Tekhnol. (Kharkov)* 1971, No. 24, 117-23 (Russ). An equation was developed for the calcn. of heats of evapn. of normal hydrocarbons at the m.p. with an accuracy of 2-3%. The van der Waals intermol. radii for C and H used in the calcn. were $r_C = 1.88$ and $r_H = 1.25$ Å.

CA. 1972. 77. 8

Углеводороды

1971

10 Б728 Деп. Расчет физико-химических свойств органических и элементоорганических соединений. VIII. Получение расчетных формул для оценки энтальпий образования ароматических углеводородов. Степанов Н. Ф., Ерлыкина М. Е. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1971. 25 с., библиогр. 8 назв. (№ 3772—71 Деп.)

Составлена расчетная схема и получен общий вид ф-л для расчета физ.-хим. св-в ароматич. углеводородов методом Татевского (в приближении по атомам с учетом 1-го окружения). Приведено подробное описание выбора структурных элементов. Постоянные в полученных расчетных ф-лах определялись МНК по имеющимся в лит-ре эксперим. данным для энтальпий образования ароматич. углеводородов в жидк. и тв. состояниях. Точность рекомендуемых расчетных ф-л характеризуется величинами $S(ж) = 1,44$, $\sigma_{ср.}(ж) = 1,16$ ($t_{0,95} = 2,23$); $S(тв.) = 1,35$ ккал/моль, $\delta_{ср.}(тв.) = 1,11$ ккал/моль ($t_{0,95} = 2,18$). Пред. сообщ. см. РЖХим, 1972, 7Б797. Автореферат

Δ H_f

РЖХ, 1972, а 10

C-H

1971

ΔH_f

ΔH_v

7 Б797 Деп. Расчет физико-химических свойств органических и элементоорганических соединений. VII. Получение расчетных формул для оценки энтальпий образования и испарения ненасыщенных алифатических углеводов. Степанов Н. Ф., Ерлыкина М. Е., Гринкина О. Е. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1971. 21 с., библиогр. 7 назв. (№ 3719—71 Деп.)

Составлена расчетная схема и получен общий вид ф-л для расчета методом Татевского физ.-хим. св-в ненасыщ. алифатических углеводов. Использована классификация структурных элементов по атомам с учетом 1-го окружения. Приведено подробное описание подсчета числа структурных элементов для рассматриваемого класса соединений. Численные значения постоянных в полученных ф-лах были найдены МНК по эксперим. данным для энтальпий образования и испарения. Сообщ. IV см. РЖХим, 1971, 10Б557. Автореферат

X. 1972. 7

C-H-соед

С*

Thinh T.P., et al.

1971

Hydrocarbon Process,

1971, 50, 1, 98.

Улучшенные ур-ва
для определения С*

(См. C-H) II

Давление пара
и теплота испарения

1971

HANDBOOK OF VAPOR PRESSURES AND HEATS OF VAPO-
RIZATION OF HYDROCARBONS AND RELATED COMPOUNDS.
B.J. Zwolinski, R.C. Willout., TRC, 1971.

Библиотека ЦВТАИ

(справочник у
Турбурга Л.В.)

(из. вып. 28, нов.
поступ. "ЦВТАИ")

Углеводороды

1972

ДНУ

6 E108. Использование ячеечной модели для определения теплот испарения и давления паров насыщенных углеводородов. Btusset Henry, Dreyre Dominique. Contribution du modèle cellulaire à la détermination de la chaleur de vaporisation et de la pression de vapeur des hydrocarbures saturés. «Phys. and Chem. liquids», 1972, 3, 6 1, 59—78. (франц.; рез. англ.)

В рамках ячеечной модели изучена роль параметра n степенного потенциала $(6, n)$. Библ. 28.

РЖФ, 1972, 68

C-H

1972

терфенил

$(C_6H_5)_2C_6H_4$

$(D_0, \Delta H_f)$

5 Д149. Расчеты π -электронных систем в рамках ω -техники с учетом перекрывания зарядов. III. Энергии π -связей, теплоты образования и энергии резонанса сопряженных углеводородов. Gupta S. P., Krishna B.

ω -Type calculations on π -electron systems with inclusion of overlap charges. III. π -Bond energies, heats of formation, and resonance energies of conjugated hydrocarbons. «J. Amer. Chem. Soc.», 1972, 94, № 1, 57—60 (англ.)

В рамках описанной ранее модификации ω -техники, учитывающей перекрывание зарядов (см. Ч. II РЖФиз, 1971, 6Д173), рассчитаны энергии π -связей, теплоты образования и энергии резонанса (ЭР) ряда полиаценов, поли- и терфенилов и полиенов (всего 22 соединения). Полученные результаты согласуются с опытом лучше,

ф. 1972.5D

чем данные расчетов методом типа Паризера — Пар-
ра — Попла. Отмечено, что ЭР поли- и терфенилов при-
мерно равны ЭР бензола, умноженной на число бен-
зольных циклов в системе, т. е. в этих соединениях
связи между бензольными циклами являются локали-
зованными и почти чисто ординарными. В. Л. Лебедев

углеводороды

C-H

1972
4 E174. Топологический индекс и термодинамические свойства. I. Эмпирические правила для температуры кипения насыщенных углеводородов. Hosoya Naoto, Kawasaki Keiko, Mizutani Kimiko. Topological index and thermodynamic properties. I. Empirical rules on the boiling point of saturated hydrocarbons. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1972, 45, № 11, 3415—3421 (англ.)

Т_{кип.}

Изучается связь термодинамич. свойств и топологии структуры насыщенных углеводородов. Сравнением с экспериментом проверена пропорциональность т-ры кипения насыщенных углеводородов и логарифма топологич. индекса — характеристики расположения углеродных атомов в рассматриваемых соединениях. Указанное соотношение выполняется для большого числа в-в, причем для циклич. соединений лучше, чем для цепочечных. Предложен ряд правил для зависимости т-ры кипения от свойств изомеров. Выяснена связь предлагаемых соотношений с существующими эмпирич. ф-лами для т-ры кипения нормальных парафинов. М. Г.

Ф. 1973. № 4.

$C(C_6H_5)_4$

1972.

$C_{25}H_{20}$

$(4Hs)$

7 Б818. Давление сублимации тетрафенилметана и ассоциированные энергии связи. Капа'ан АдГі S. Sublimation pressure of tetraphenylmethane and associated bond energies. «J. Chem. Thermodyn.», 1972, 4, № 6, 893—901 (англ.)

При t -рах 396—466° К торзионно-эффузионным методом определено давл. насыщ. пара тетрафенилметана. В том же t -рном интервале по 2-му закону получены ΔH° (субл., CPh_4) и ΔS° (субл., CPh_4), равные соотв. $33,65 \pm 0,60$ ккал/моль и 56 ± 2 э. е. С помощью лит. данных вычислены ΔH° (субл., 298,15° К, CPh_4) $36,0 \pm 1$ ккал/моль, ΔH° (обр., 298,15° К, CPh_4 , газ.) $= 93,9 \pm 1,5$ ккал/моль, $1/4\{\Delta H^\circ$ (обр., С, газ.) $- 4\Delta H^\circ$ (обр., Ph) $- \Delta H^\circ$ (обр., CPh_4 , газ.) $\}_{298,15^\circ K} = 99,2 \pm 1,5$ ккал/моль. М. В. Коробов

Х. 1973. № 7

$(C_6H_5)_4C$

$C_{25}H_{20}$

$P_{sub.}$

$\Delta H_{sub.}$

фр. 1973

N3

1972

3 E626. Давления сублимации тетрафенилметана и энергии связи. Kana'an Adli S. Sublimation pressures of tetraphenylmethane and associated bond energies. «J. Chem. Thermodyn.», 1972, 4, № 6, 893—901 (англ.)

По результатам одновременного измерения крутильного момента и массовой скорости эффузии в интервале $t-p$ 396—466° K определены давления сублимации тетрафенилметана (I). Давление сублимации, полученное торсионным методом (p_t) больше, чем давление, полученное кнудсеновским методом (p_k), причем среднее отношение $p_t/p_k = 1,18 \pm 0,05$. Из анализа эксперим. результатов методом наименьших квадратов рассчитаны значения энтальпии сублимации ($\Delta H_{sub} = 33,65 \pm \pm 0,60$ ккал/моль) и энтропии сублимации ($\Delta S_{sub} = 56 \pm 2$ кал/град·моль), что соответствует ΔH_{sub} (CPh₄, тв., 298,15° K) = $36,1 \pm 1$ ккал/моль. Средняя энергия диссоциации связи D (C—Ph) $99,2 \pm 1,5$ ккал/моль. Оценена энергия диссоциации связей при ступенчатой диссоциации I: D (Ph₃C—Ph) = 71 ± 7 ккал/моль, D (Ph₂C—Ph) = 88 ± 10 ккал/моль, D (PhC—Ph) = 88 ± 10 ккал/моль и D (C—Ph) = 150 ± 15 ккал/моль. В. Ф. Байбүз

C-H

 ΔH_v

13 Б747. Энтальпии испарения н-алканов от C_{12} до C_{20} . Morawetz Ernst. Enthalpies of vaporization of n-alkanes from C_{12} to C_{20} . «J. Chem. Thermodyn.», 1972, 4, № 1, 139—144 (англ.)

Калориметрически при 25° определены энтальпии испарения ΔH^0 (исп.) гомологич. серии н-алканов от C_{12} до C_{20} . ΔH^0 (исп.) жидк. алканов от додекана до эйкозана (C_{12-20}) равны, соотв. $14,65 \pm 0,06$, $15,86 \pm 0,02$, $16,99 \pm 0,08$, $18,21 \pm 0,07$, $19,45 \pm 0,08$, $20,56 \pm 0,20$, $36,49 \pm 0,20$, $34,31 \pm 0,25$ и $40,73 \pm 0,28$ ккал/моль. Прирост ΔH^0 (исп.) обусловлен увеличением числа CH_2 -групп. Энтальпия сублимации ΔH^0 (субл.) при 25° (ккал/моль) для алканов с C_{12-18} может быть определена по ур-нию ΔH^0 (субл.) = $-1,031 + 2,082 n_c$ и для алканов с C_9-17 ΔH^0 (субл.) = $2,008 + 1,151 n_c + 0,0288 n_c^2$. ΔH^0 (субл.) алканов с C_{19} и C_{20} , определенные путем экстраполяции, равны 34,29 и 40,64 ккал/моль, соответственно.

Б. Г. Пожарский

X, 1972. 13

Алканы

ΔH_v

X. 1972. 12

1972

12 B719. Корреляция энтальпий испарения с молекулярной структурой для изомерных алканов. Moga-wetz Ernst. The correlation of enthalpies of vaporization of isomeric alkanes with molecular structure. «J. Chem. Thermodyn.», 1972, 4, № 1, 145—151 (англ.)

Разница между энтальпиями испарения при 25° разветвленных и неразветвленных алканов $\Delta\Delta H$ (исп.) коррелирует со структурными параметрами молекул. Показано, что $\Delta\Delta H$ (исп.) есть линейная функция линейной комбинации этих параметров. Получено ур-ние для расчета $\Delta\Delta H$ (исп.) изомерных алканов от бутана до октана с максим. отклонением 0,10 и средн. отклонением 0,04 ккал/моль. Предложено ур-ние для расчета энтальпий испарения при 25° изомерных алканов общей ф-лы $C_n - C_{jH_{2n+2}}$, где $(n-\gamma)$ = число атомов наиболее длинной прямой цепи, $\gamma=1, 2, 3, 4$. Погрешность расчета $\pm 0,1$ при $\gamma=1, 2, 3$ и $\pm 0,2$ ккал/моль при $\gamma=4$.
По резюме

С-Н

орг. соедин.

1972

23 Б802. Энтальпии испарения ряда ароматических соединений. Morawetz Ernst. Enthalpies of vaporization for a number of aromatic compounds. «J. Chem. Thermodyn.», 1972, 4, № 3, 455—460 (англ.)

Из калориметрич. измерений в неравновесных условиях определены теплоты испарения 13 орг. соединений, составившие при 25° (ккал/моль): нафталин $17,22 \pm 0,06$, азулен $18,36 \pm 0,04$, фенантрен $21,72 \pm 0,19$, бифенилен $20,03 \pm 0,07$, аценафтилен $17,44 \pm 0,08$, флуорантен $23,7 \pm 0,2$, бифенил $19,54 \pm 0,09$, дифенилметан (жидк.) $16,13 \pm 0,07$, 1,2-дифенилэтан $21,84 \pm 0,11$, транс-стильбен $23,71 \pm 0,19$, дифенилоксид (жидк.) $15,99 \pm 0,08$, бензофенон $22,31 \pm 0,08$, бензойная к-та $21,39 \pm 0,04$. Большая величина $\Delta H_{\text{исп}}$ азулена по сравнению с нафталином объясняется наличием у первого периферийной делокализованной

 $\Delta H_{\text{исп}}$

X-1972-23

системы из 10 π -электронов, обуславливающей небольшой дипольный момент порядка 1 D , что увеличивает межмолекулярное взаимодействие. В предположении о линейном возрастании энтальпии за счет вкладов CH_2 -групп в алкилах от $n\text{-C}_1$ до $n\text{-C}_5$ энтальпии испарения гомологов α, ω -дифенил- n -алканов представлены линейным выражением $\Delta H_{\text{исп}}(\text{тв.}, 298,15^\circ \text{ K}, \text{ ккал/моль}) \approx 16,3 + 2,1 n_{\text{C}}$ для $n_{\text{C}} \geq 5$, где n_{C} — число атомов C в цепи алкана. Аналогичным методом учета вкладов отдельных групп оценена энергия водородной связи, образующейся при димеризации карбоксильных групп в бензойной к-те, составившая 7,3 ккал/моль. Полученные результаты сравнены с лит. данными.

А. Гузей

C-H

Pittam, D. R.; Pilcher, G.

1972

(ΔH_f ; 4 H comb.)

"J. Chem. Soc., Faraday Trans."

1972, 68, N12, 2224-9.

(cal CH_4 , I)

Ученый журнал

1972

(ΔH_v)

115951p Temperature calculation of the heats of evaporation of hydrocarbons. Rapshtynskaya, E. A. (Dnepropetr. Univ., Dnepropetrovsk, USSR). *Vop. Khim. Khim. Tekhnol.* 1972, No. 26, 73-82 (Russ). A formula was derived for the calcn. of internal heats of evapn. ($L - RT$) of hydrocarbons, where L is the latent heat, R is gas law const. and T is abs. temp., with the use of known values of m.p. T_m , crit. temp. T_c , and ($L - RT$) at the m.p. The formula is based on the assumption of inverse proportionality between the no. of local cavities in the liq. hydrocarbon structure and $T - T_m$ and of the linear weakening of Van der Waals forces in the interval $T_c - T_m$. The calcd. values of ($L - RT$) agree with the exptl. ones within 0.5-1% at $T \lesssim (T_c - 40^\circ)$ and within 3-5% at temps. near the b.p. L. Kuca

C.A. 1973. 78 v18

Yurekogorogor

1972

ΔH_f

ΔH_v

132352v Calculation of the physicochemical properties of organic and heteroorganic compounds. VII. Derivation of calculation formulas for evaluating the enthalpies of formation of unsaturated hydrocarbons. Stepanov, N. F.; Erlykina, M. E.; Grikina, O. E. (Khim. Fak., Mosk. Gos. Univ. im. Lomonosova, Moscow, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1972, 46(2), 543 (Russ). Addnl. data considered in abstracting and indexing are available from a source cited in the original document. The Tatevskii method was used for deriving general formulas for calcg. heats of formation (H_f) and evapn. (H_v) of unsatd. hydrocarbons. Structural units are atoms and nearest neighbors are taken into account. The accuracy is 0.82 kcal/mole for H_f and 0.34 kcal/mole for H_v . Karel A. Hlavaty

C.A. 1972. 46. 22

30316.6087

Tx, Ch, Ph

C - H

ΔH_f

34469

1972

4-114

Srivastava A.K., Bal Krishna.

Heats of formation [REDACTED] of some alternant hydrocarbons and heteromolecules by a semi-empirical method. "Indian J. Pure and Appl. Phys.", 1972, 10, N8, 627-628

(англ.)

0032 пин

820

823

825

ВИНИТИ

C-H

1972

соедин.

✓ 17 Б548. Физические свойства н-парафинов в зависимости от числа атомов углерода. Prabhaaker L., Ramalingam Karparthi. Physical properties of N-paraffins based on the number of carbon atoms. «Indian Chem. Eng.», 1972, 14, № 4, 20—26 (англ.)

На основании эксперим. данных по 20 первым членам гомологич. ряда н-парафинов, получены эмпирич. ф-лы, выражающие зависимости их физ.-хим. св-в от числа атомов в углеродной цепи. Рассчитанные по предложенным ф-лам значения совпадают с эксперим. данными в пределах: т-ра кип. $\pm 1^\circ \text{K}$ (кроме пропана и бутана), крит. т-ра $\pm 1^\circ \text{K}$ (кроме этана), крит. давл. $\pm 0,64$ атм, крит. объем ± 10 см³/г·моль, скрытая теплота испарения:

ΔH_v ; S_v

Х. 1973 N 17

$\pm 1\%$, энтропия испарения при t -ре кип. и нормальном
давл. $\pm 0,67\%$ (кроме этана). М. Я. Френкель

Alkanes

Emmuck 1990

1972

Samayajulu G.R.
Zwolinski B.F.

(Hf)

Thermodyn. Res. Center,
Dept. of Chemistry

Texas
College

University,
State, Texas, 77843.

"Generalized

Treatment of
Alkanes. II

C-H

1972

4 Б706. Применение схемы энергий связи Аллена—Скиннера к ароматическим углеводородам и аминам. Volcu Rodica, Perisanu St. Application of the Allen—Skinner bond energy scheme to aromatic hydrocarbons and to amines. «Rev. roum. chim.», 1972, 17, № 3, 447—453 (англ.)

ΔH_f .

По методу Аллена—Скиннера вычислены и сопоставлены с эксперим. данными теплоты атомизации большого числа ароматич. углеводородов и перв., втор., трет. аминов и диаминов. Расхождение между расчетом и экспериментом лежит, в основном, в пределах погрешности измерений. Сделана попытка объяснить расхождение в лит. данных для теплот образования бромалканов

По резюме

X. 1973. № 4.

Алканы

1973

5 Б715 Деп. Исследование изобарной теплоемкости
алканов. Ахмедов А. Г., Алекперова С. Р.,
(Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1973.
бс., библиогр. 12 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ
9 окт. 1973 г., № 6967-73 Деп.).

(ср)

С применением метода расчета В. М. Татевского вычислены значения мол. изобарных теплоемкостей ~70 алканов. Сравнение полученных результатов с эксперим. данными показывает, что метод В. М. Татевского позволяет с достаточной точностью вычислять и изобарные теплоемкости алканов (максим. отклонение 2%). Нек-рые результаты теории подтверждаются экспериментом. По сравнению с существующими методами, примененный метод расчета изобарной теплоемкости алканов является наиболее общим и точным. Автореферат

X. 1974 N 5

Бензин

1973

24 В914. Расчет энтальпии бензина. Ciolan I.
Calculul entalpiei benzinei. «Petroli. și gaze», 1973, 24,
№ 5, 290—292 (рум.; рез. англ., франц., нем., рус.)

(ЛН.) Предложен способ расчета теплосодержания бензина
с использованием элементов векторной алгебры. Полу-
чено ур-ние, связывающее теплосодержание с т-рой и
плотностью бензиновых фаз. Константы ур-ния, зави-
сящие от соотношения фаз в системе, табулированы для
т-рой области 93,33—648,89° С (200—1200° F). А. Гузей

Х. 1973 № 24

углеводороды

1973

3 Б825. Прикладная термодинамика углеводородов. Часть 51. Теплоты химических реакций. Edmister Wayne C. Applied hydrocarbon thermodynamics. Part 51. Heats of chemical reaction. «Hydrocarbon Process.», 1973, 52, № 7, 123—129 (англ.)

ΔH реакц.

Рассмотрены инженерные методы расчета тепловых эффектов хим. р-ций и зависимости их от т-ры и давл. Даны рекомендации для расчета тепловых эффектов сложных хим. процессов, напр., каталитич. и термич. крекинга гидролиза, полимеризации и т. д. Приведены примеры расчетов синтеза аммиака и произв-ва серы из H_2S . Пред. сообщ. см. РЖХим, 1973, 22Б635.

Н. Васильев.

x 1974
N3

углеводороды

1973

З Б826. Прикладная термодинамика углеводородов:
Часть 52. Равновесие химической реакции. Edmister
W a y n e C. Applied hydrocarbon thermodynamics. Part 52.
Chemical reaction equilibria. «Hydrocarbon Process.»,
1973, 52, № 8, 109—115 (англ.)

Рассмотрены инж. методы расчета величин констант
равновесия хим. р-ций и их зависимости от т-ры, а так-
же расчета равновесных составов компонентов хим.
р-ций. Приведены примеры расчетов. Эта часть заверша-
ет журнальную публикацию т. 2 кн. «Прикладная тер-
модинамика углеводородов», готовящейся к изданию
в 1 квартале 1974 г. в изд. Gulf Publishing Co. Book. Di-
vision. Часть 51 см. пред. реферат. И. Васильев

x 1974
N3

перилена

$C_{20}H_{12}$



$P, 4H_3$

$C_{20}H_{12}$

X. 1977.6

6 Б863. Давление пара и энтальпия сублимации перилена. Gigli Rosario, Malaspina Leopoldo, Bardi Giampiero. Tensione di vapore ed entalpia di sublimazione del perilene. «Ann. chim.» (Ital.), 1973, 63, № 9—10, 627—633 (итал.; рез. англ.)

В интервале t -р $443—518^\circ \text{K}$ с помощью эффузионной ячейки, помещенной в микрокалориметр, исследован процесс сублимации перилена (I). Эффузионным методом (ЭМ) получено ур-ние зависимости давл. I от t -ры

$\lg P(I, \text{мм}) = (13,8 \pm 0,2) - (7,2 \pm 0,1) \cdot 10^3/T$. Т-рная зависимость энтальпии сублимации выражена ур-нием $\Delta H = (37,5 \pm 0,1) \cdot 10^{-3} - (9,6 \pm 0,2) T$ кал/моль. Энтальпия сублимации I $\Delta H_{298^\circ \text{K}}$ получена из данных ЭМ по 2-му закону и микрокалориметрич. соотв. $34,7 \pm 0,6$ и $34,6 \pm 0,1$ ккал/моль. По 2-му закону определена энтропия $\Delta S_{298^\circ \text{K}}$ сублимации 54 ± 1 э. е. По лит. значению $S_{208^\circ \text{K}}$ (I, тв.) рассчитана $S_{298^\circ \text{K}}$ (I, газ) $= 117 \pm 1$ э. е.

М. В. Коробов

1973

1973

8 Б665. Теплоемкость образования дефектов в бимолекулярных слоях длинноцепочечных н-алканов. Lagally Gerhard, Fitz Stephan, Weiss Armin. Spezifische Wärme bei der Bildung von Kinken in bimolekularen Filmen langkettiger n-Alkylverbindungen. «Angew. Chem.», 1973, 85, № 20, 915—916 (нем.)

Проведены измерения теплоемкости длинноцепочечных н-парафинов и отмечены резкие пики на кривых $C_p(T)$ (C_p — теплоемкость при постоянном давлении, T — т-ра) при т-рах 50, 60 и 70°. Эти пики отнесены за счет локальных дефектов с сохранением направления цепи: дефекты типа 2g1, возникающие при появлении двух гош-форм в транс-цепи поли-н-алкана (ттгтгттттт, где т означает «транс», г — поворот на 120° от транс и $\bar{g}$ — поворот на —120° от транс), дефекты типа 3g2 (ттгтгтггггг), а также дефекты 2g2 (ттгтгттгтттт) и 2g3 (ттгтгттгттгт). Согласно сделанным оценкам, ср. потеря энтальпии при образовании дефектов в бимолек. слоях составляет 0,7 ккал/моль, что существенно меньше энтальпии дефекта в изолированной цепи н-алкана (1,2 ккал/моль) и полиэтилене (0,95 ккал/моль). В. Г. Дашевский

полч-н-
алканы

C_p

х. 1974
N 8

Гуськогоспоса

1973

(ep)

82441v Heat capacity of natural hydrocarbons and products of their heat treatment. Usenbaev, K.; Sabyraliev, K.; Rasulkaev, M.; Zhumalieva, K. (USSR). Tr. Frunz. politekhn. in-ta 1973, (68), 21-34 (Russ). From Ref. Zh., Khim. 1974, Abstr. No. 12P32. Title only translated.

C.A. 1975, 83 N10

Углеводороды

1974

24 Б816 К. Прикладная термодинамика углеводородов. Edmister Wayne C. Applied hydrocarbon thermodynamics. Vol. 2. Houston, Tex., Gulf Publ. Co., 1974. viii, 290 pp., ill. (англ.)

Рассмотрены след. вопросы термодинамики углеводородов: (1) влияние давл. на энтальпию и энтропию, (2) разность теплоемкостей и влияние давл. на теплоемкость и коэф. Джоуля—Томсона, (3) изоэнтропийные и изоэнтальпийные показатели для т-рой зависимости и расчеты процессов сжатия и расширения газа. (4) энтальпия, энтропия и теплоемкость в идеальном газовом состоянии, (5) коэф. сжимаемости, коэф. летучести, поправки на неидеальность с давл. и K -отношения для равнове-

сия пар—жидкость, (6) проверка термодинамич. согласованности значений K и волюметрич. данных, (7) теплоты испарения для смесей, (8) диаграммы энтальпия—состав для смесей углеводородов, (9) теплоты хим. реакций и (10) равновесия хим. реакций. В. Ф. Байбуз

термодинамика

Х. 1978, № 24

50116.4729

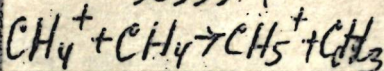
Ex-AR/BAT-z,

Ma, Ch, TC

96559

(K)

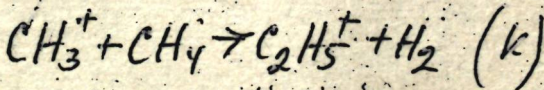
1974



2897

Miasek P.G., Beauchamp J.L. A novel trapped-ion mass spectrometer for the study of ion-molecule reactions. "Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.", 1974, 15, N 1; 49-66

(англ.)



В 281 БИЖ

ВИНИТИ

249 255

273

40923.6648

TC, Ph, Ch

 $C_2H_4^+ + C_3H_8$
96559

(A.H.); (K)

02

1974

* 4-6434.

Solka B.H., Harrison A.G. Bimolecular reactions of trapped ions. IX. Effect of method of preparation on the rate of reaction of $C_2H_5^+$. "Int. J. Mass. Spectrom. and Ion Phys.", 1974, 14, N 2, 125-138

(англ.)

01975

160 163 0189

ВИНИТИ

40923.6648

TC, Ph, Ch

(А.И. Реанг, К)
196559

02

1974

 $C_2H_5^+ + (CD_3)_2O$

*

4-6434

Solka B.H., Harrison A.G. Bimolecular reactions of trapped ions. IX. Effect of method of preparation on the rate of reaction of $C_2H_5^+$. "Int. J. Mass. Spectrom. and Ion Phys.", 1974, 14, N 2, 125-138

(англ.)

0197

160 163 0189

ВИНИТИ

Углеводороды

1974

Зависимость.

$$T_{\text{кип}} = f(p)$$

5 Б1012. Зависимость между давлением пара и температурой кипения углеводородов. Часть I. Takhalate H. R., Bhaskara Rao B. K. Vapour pressure boiling point relations for hydrocarbons. Part I. «Chem. Ind. Develop.», 1974, 8, № 3, 19—21 (англ.)

Построены две диаграммы зависимости: $T_{\text{кип}} = f(p)$ для углеводородов с нормальными т. кип. от 50 до 550—600°. Диаграммы охватывают интервалы давл. от 10 до 600 мм и от 1 до 10 атм. Во второй части работы аналогичные две диаграммы построены для давл. 10—100 атм (норм. т. кип. от 25 до 400°) и 0,01—10 мм (норм. т. кип. от 250 до 650°).

С. Бык

Х. 1975 N 5

Ароматические
углеводороды

1975

И Б1039.

Определение уравнений, представляющих термодинамические параметры испарения ароматических углеводородов при любой температуре. Применение этих уравнений для расчета коэффициентов активности в растворе. Chitour Semche Eddine, Vergnaud Jean-Maurice. Détermination d'équations représentant les grandeurs thermodynamiques de vaporisation d'hydrocarbures aromatiques valables pour toute température application au calcul du coefficient d'activité dans une solution. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1975, 72, № 9, 1001—1006 (франц.; рез. англ.)

Для расчета энтальпии испарения ароматич. углеводородов при различных т-рах предложено ур-ние, основанное на ур-нии Тейзена—Уотсона и имеющее вид:

$$\Delta H_{vT} = \Delta H_{vT_e} [(1-T_r)/(1-T_{re})]^{A+BT_r+CT_r^2} \quad (1), \text{ где}$$

ΔH_{Tv} и ΔH_{vT_e} — энтальпии испарения при т-ре T и нормальной т-ре кипения T_e ; T_r и T_{re} — приведенные т-ры T и T_e ; A , B и C — эмпирич. параметры. Ур-ние (1) может быть использовано для расчета энтальпий

м.г.
св. Ве

X 1976
N 11

испарения при любой т-ре от $T_r=0,47$ до крит. т-ры. Табулированы величины A , B и C для бензола (I), толуола (II), этилбензола (III), о- (IV), м- (V) и п-ксилола (VI). Сопоставление расчетных величин энтальпий испарения I в интервале $283-543^\circ$ с эксперим. данными показало хорошее согласие. Рассчитаны величины энтальпий испарения I—VI в интервале $203-613$ К. Методом ГЖХ исследовано поведение р-ров I—II, IV—VI в смеси сквалана с бентоном и с помощью ур-ния (1) рассчитаны коэф. активности при $100, 120, 130$ и 150° .

П. М. Чукуров

H-CH₄

1975

H-CO (cureu)

(Cp)

153558b Enthalpy measurements on synthetic gas mixture. Eakin, Bert E.; De Vaney, Will E.; Bailey, Nancy L. (P-V-T, Inc., Houston, Tex.). *Proc., Annu. Conv., Gas Process. Assoc., Tech. Pap.* 1975, 54, 52-8 (Eng). A modified isobaric calorimeter was developed and tested. Heat capacity and enthalpy changes were detd. for H-CH₄ and H-CO mixts. The data are tabulated for various temp. and pressures.

(+1) ☒

C. A. 1975, 83 N18

АКАДЕМ

1975

(T. g. ch. ba)

169279x Application of graph theory in chemistry. VI.
Prediction of thermodynamic properties of alkanes. Gutman,
Ivan; Trinajstić, Nenad (Inst. "Ruder Bosković", Zagreb,
Yugoslavia). *Kem. Ind.* 1975, 24(1), 25-9 (Croat). The
application of the graph theory for satd. hydrocarbons in
predicting the thermodynamic properties of alkanes is described.
A method is shown of linear combination of graph invariants in
calc. the heats of combustion of alkanes. The structural details
of the graph result from an examn. of other graph characteristics,
which in the phys. order represent the interactions between
various components and other phenomena. The calcd. data is in
good agreement with exptl. literature data. S. A. Mersol

C.A. 1975. 83 N20

Ароматич. углеводородов

1975

таблицы (C_p , H_f° - H_o°)

86: 22536g Heat capacity and enthalpy of liquids. I: Aromatic hydrocarbons. Engineering Sciences Data Unit (London, Engl.). Eng. Sci. Data Item 1975, 75015, 15 pp. (Eng). A data table with 36 refs. Selected literature data on enthalpy and heat capacity are presented for 34 arom. hydrocarbons.

C.H. 1977 86 NY

С7-С9 - бицикл. углерод

1975

Тимофеева Л. П.

Энтальпия образования
бициклических углеродо-
родов с числом атомов
углерода С7-С9.

Автореферат диссер-
тации на соискание ученой
степени КХН

Гексакозан $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{24}\text{CH}_3$

1976

$\text{C}_{26}\text{H}_{54}$

12 Б703. Термодинамические свойства гексакозана. Andon R. J. L., Martin J. F. Thermodynamic properties of hexacosane. «J. Chem. Thermodyn.», 1976, 8, № 12, 1159—1166 (англ.)

В адиабатическом калориметре в интервале т-р 13—358 К измерены теплоемкости гексакозана (I). Т-рная зависимость C_p для жидк. I представлена ур-нием C_p дж/град·моль = $962,30 - 1,6236T + 3,8795 \cdot 10^{-3}T^2$, ср. отклонение от эксперим. данных 0,2 дж/град·моль. Экстраполяция теплоемкости к 0 К проведена по ур-нию $C_v = 14,3D (136/T)$. Найденные значения т-р и энтальпий кдж/моль фазового перехода в тв. фазе и плавления составили 325,5 К и $33,42 \pm 0,4$; 329,26 К и $60,70 \pm 0,3$. Рассчитаны величины термодинамич. функций I в изученном интервале т-р. Значения C_p , S° дж/град·моль и $(H_T - H^\circ_0)$ дж/моль составили при т-рах 10,00 К 3,680; 1,230 и 9,218; 100,0 К 273,2; 213,7 и 13030; 298,15 К 661,2; 667,0 и 101500; 350 К 880,8; 1103 и 244800. Полученные данные сопоставлены с лит. данными для I и др. углеводородов. Ж. Василенко

(ср)

X 1977. N 12

Ацетиленовые углеводороды 1976

8 Б662 Деп. Энтальпии испарения ацетиленовых углеводородов. Купреев А. И. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1976. 11 с., библиогр. 11 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 14 дек. 1976 г., № 4298—76 Деп.).

Предложен метод расчета энтальпий испарения ΔH (исп.) углеводородов по нормальной т-ре кипения, представляющий собой развитие ур-ния Кистяковского — Фиштайна. Проверкой на 78 различных углеводородах установлено, что метод позволяет оценивать величину ΔH° (исп.) с погрешностью $< 0,10$ ккал/моль.

Для 96 ацетиленовых углеводородов вычислены ΔH (исп.), к-рые могут быть использованы для оценки их энтальпий образования, если известно одно из значений ΔH° (обр., газ.) или ΔH° (обр., жидк.).

Автореферат

Х. 1877. № 8

1976

16 Б823 Деп. Экспериментальное исследование изобарной теплоемкости парафиновых углеводородов. Муштафаев Р. А. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1976. 11 с., ил., библиогр. 9 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 13 апр. 1976 г., № 1224—76Деп.).

На основе эксперим. исследований установлен характер изменения изобарной теплоемкости парафиновых углеводородов в зависимости от т-ры и числа углеродных атомов в молекуле. Автореферат

алканы

Ср

Х. 1976. №16

1976

2 Б817. Расчет равновесия для реакций дегидрирования высших н-алканов в н-алкены. Васильев И. А., Минкин Д. М. В сб. «II Всес. конф. по термодинамике орган. соедин., Горький, 1976. Тезисы докл.» Б. м., 1976, 33—35

Рассмотрено равновесие р-ций дегидрирования газ. н-алканов по схеме: образование в 1-й стадии (р-ция 1) алкенов с двойной связью у крайнего атома углерода, во 2-й стадии (р-ция) — изомеризация полученного алкена-1 в алкен с двойной связью у i -го углеродного атома. Расчет равновесных кон-ий компонентов проведен на основе справочных лит. данных по равновесиям (1) и (2) с учетом того, что ΔH (2) примерно одинаковые для всех i , а при $n \geq 6$ значения K (1) равны для всех n в C_nH_{2n+2} . При расчете учтено также кол-во образующихся симм. и несимм. алкенов.

Ж. Василенко

алканы

расчет
равнов

X1947 N2

1976

алканы

17 Б840. Зависимость давления насыщенных паров углеводородов метанового ряда от температуры. Соколов С. Н. «Изв. высш. учеб. заведений. Нефть и газ», 1976, № 2, 69—71

(Р)

Рассмотрено ур-ние, к-рое позволяет вычислять давл. насыщ. паров углеводородов метанового ряда в широком интервале т-р. Расхождение между вычисленными по ур-нию и опытными значениями давл. насыщ. паров не превышает 1—2%, что находится в пределах точности опытов по определению этих св-в углеводородов метанового ряда.

Резюме

Х 1976 №17

АЛКАНЫ

1977

88: 95657y Heat capacity and enthalpy of liquids: Alkanes.
Anon: (Engl.). *Eng. Sci. Data Item* 1977, 77025, 23 pp.
(Eng). A review with 57 refs..

(Cp)

(ΔH)

C.A. 1978, 82, 114

Aukere

1978

89: 136672r Heat capacity and enthalpy of liquids: alkenes and dienes. Beaton, C. F. (BP Chem. Int. Ltd., London, Engl.). *Eng. Sci. Data Item* 1978, 78015, 15 pp. (Eng). Selected values are tabulated for 35 alkadienes and alkenes in liq. state.

(cp)

C.A., 1978, 29, N16

Alkenes (re)

1948

90: 13112w Heat capacity and enthalpy of liquids: alkenes and dienes. Engineering Sciences Data Unit (London, Engl.). Report 1978, Order No. ESDU-78015, 15 pp. (Eng). Avail. NTIS, Atten: ESDU. From Gov. Rep. Announce. Index (U. S.) 1978, 78(18), 132. The selected values of satd. liq. heat capacity and enthalpy data are tabulated in SI units for the straight and branched chain alkenes and dienes from the m.p. to the normal b.p. or to the limit of the exptl. data, whichever is the higher. Conversion factors to other units are provided. The procedure used to obtain the values of heat capacity data is discussed and the effect of pressure is evaluated. The uncertainties in the values are given, as well as the sources of data used in the prepn. of the tables.

Cp, H-H298

C.A. 1949, 90, 12

1977

алканы

З Б749 Деп. Теплота парообразования алканов. А х -
медов А. Г. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН
СССР) М., 1977. 8 с., библиогр. 512 назв. (Рукопись
деп. в ВИНТИ 5 окт. 1977 г., № 3924—77 Деп.)

(Д Н в)

4.
опии

х., 1978, №3

По теплотам парообразования н-гексана, 2,2-диметилпропана, 2-метилпентана, 3-метилпентана, 2,2-диметилбутана, 2,3-диметилбутана и н-гептана при 20° определены величины теплот парообразования связей: C_{12} , C_{22} , C_{13} , C_{23} , C_{14} , C_{24} , C_{33} — к-рые соотв. равны: 2020; 1180; 1573,5; 833,3; 1320; 716 кал/моль. По теории Татевского рассчитаны величины теплоты парообразования более ста алканов, к-рые составляют гомологич. ряды: н-алканы, 2-метил-, 3-метил-, 2,2-диметил-, 2,3-диметил-, 2,4-диметил-, 3,3-диметил-, 3,4-диметилалканы и др. Теплоты парообразования в указанных гомологич. рядах, начиная с определенного члена, увеличиваются строго линейно в зависимости от числа углеродных атомов в молекуле. Предложена ф-ла, отражающая взаимосвязь теплоты парообразования и $\sigma \cdot (\mu v)^{2/3}$, где σ — поверхн. натяжение, (μv) — молек. объем, имеющая вид: $L = L_0 + C \cdot \sigma (\mu v)^{2/3}$, где L — теплота парообразования; L_0 — постоянная для данного гомологич. ряда, $C = \Delta L / \Delta [\sigma \cdot (\mu v)^{2/3}] = L_{22} / [\sigma \cdot (\mu v)^{2/3}]_{22}$ — является универсальной постоянной для всех гомологич. рядов, т. е. для всех алканов.

Автореферат

1948

Алканы

2 8 Б800. Предсказание скрытых теплот испарения алканов при нормальных температурах кипения методом групповых вкладов. Hoshino Daisuke, Nagaham Kunio, Hirata Mitsuo. Prediction of the latent heats of vaporization of alkanes at the normal boiling points by the group contribution method. «J. Chem. Eng. Jap.», 1978, 11, № 5, 403—404 (англ.)

Для расчета скрытых теплот испарения алканов методом групповых вкладов $\Delta H_{\text{исп}} = \sum \Delta h_i$ по лит. дан-

(ΔH_v)

2.144, N8

ным оценены групповые инкременты Δh_i (кал/моль) для i -х функциональных групп. Для n -алканов инкременты составили: $-\text{CH}_3$ 1760; $-\text{CH}_2-$ $971n^{0,913} - 2n^{2,75}$ ($n \leq 9$, $435(n-9) + 6515$ ($10 \leq n \leq 16$), $284(n-16) + 9666$ ($17 \leq n \leq 30$) и $180(n-30) + 13600$ ($31 \leq n \leq 38$); для главных цепей изоалканов: $-\text{CH}_3$ 1760; $-\text{CH}_2-$ 800, 790, 775, 740, 715, 690 и 680 (положения 2—8 соотв.); $-\text{CH}-$ 750, 650, 530, 320, 300 и 280 (положения 2—7 соотв.); $-\text{C}-$ 300, 290, 90 и 30 (положения 2—5 соотв.); для побочных цепей изоалканов: $-\text{CH}_3$ 800, $-\text{CH}_2-$ 650 и $-\text{CH}-$ 200. Сообщается, что расчет $\Delta H_{\text{исп}}$ для 180 алканов дал средн. ошибку 1,2% с максим. ошибкой 4,3% для 2,3,4-триметилгептана.

А. Б. Кисилевский

1978

20 Б816. Теплоемкость в ряду жидких н-парафинов.
 Кирьяков Б. С., Мелихов Ю. Ф. «Науч. тр.
 Курск. пед. ин-т», 1978, 184, № 12, 141—147

Предложены методики расчета коэф. объемного расширения и теплоемкостей C_p и C_v жидк. н-парафинов при высоких давл. по результатам акустич. измерений. Отличительной чертой методик является использование функций, монотонно изменяющихся с давл. и не имеющих перегибов. Расчет зависимостей C_p от давл. для пентана, гептана, нонана и ундекана показал, что с ростом давл. теплоемкость монотонно уменьшается.

А. Б. Кисилевский

алканы

(C_p)

2.1978 N20

1948

22 Б836. Зависимость свойств производных углеводородов от степени замещения. II. Энтропия. К т и -
к я н А. А., Папулов Ю. Г., Смоляков В. М.,
Роненсон М. В. «Ж. физ. химии», 1978, 52, № 7,
1658—1660

Обсуждаются зависимости станд. энтропий газ. углеводородов от степени замещения. Зависимости, как найдено, нелинейны, однако, линии замещения на одну и ту же группу симбатны между собой. На основе выявленных закономерностей развит метод инкрементов замещения. Средн. абс. ошибка расчета этим методом станд. энтропий сорока первых алканов составляет 0,48 э. е., максим. отклонение $\pm 1,64$ э. е., средн. квадратичное отклонение 0,45, дисперсия 0,45. Автореферат

Алканы

2. 10. 1978

C-H

1978

(90)128449d **Hydrocarbon enthalpies.** Ostroveanu, Tudor;
Bucur, Cristian (Rom.). *Rev. Chim. (Bucharest)* 1978, 29(11),
1019-21 (Rom). A math. model is proposed for the calcn. of the
ideal gas enthalpy and the heats of evapn. along the satn. line
from a min. no. of basic property data. The method was tested
on 10 hydrocarbons with satisfactory results.

C-H (алкил. радикалы)

1978

13 Б791. Стандартные энтальпии образования и конформации алкильных радикалов. Смоленский Е. А., Кочарова Л. В. «Докл. АН СССР», 1978, 239, № 1, 135—137

Предложен метод приближенного расчета ΔH° (обр.) свободных алкильных радикалов. Ф-ла для расчета, содержащая четыре параметра, к-рые определены из эксперим. данных, дает средн. отклонение 0,59 ккал/моль, что практически совпадает с эксперим. точностью и свидетельствует о непланарности радикалов. Метод позволяет оценить конформац. состав алкильных радикалов и энергии разрыва связей C—C и C—H в молекулах алканов.

Автореферат

ΔH_f

2. 1978 N 13

Алканы

1979

1 Б673. Теплоемкость алканов при различных температурах. Ахмедов А. Т. «Ж. физ. химии», 1979, 53, № 9, 2387—2389

(ср)

С применением теории В. М. Татевского вычислено значение мольной изобарной теплоемкости более восьмидесяти жидк. алканов при различных т-рах. В результате анализа полученных данных предложена ф-ла, отражающая зависимость теплоемкости от состава и структуры молекул алканов. Автореферат

2.1980.N1

Алканол

1979

92: 11986b Heat capacity of alkanes at different temperatures. Akhmedov, A. G. (Azerb. Gos. Pedagog. Inst., Baku, USSR). Zh. Fiz. Khim. 1979, 53(9), 2387-9 (Russ). By using the theor. model developed by V. M. Tat'yanskii (1953, 1960), isobaric heat capacities were calcd. for >80 alkanes over different temp. ranges. An expression is proposed for the calcn. of the heat capacity as function of the mol. structure of the alkane.

Cp

paper

C.A. 1980. 92, N2

1973

Алканы

1 Б677. Теплоты парообразования алканов при различных температурах. Ахмедов А. Г. «Ж. физ. химии», 1979, 53, № 9, 2354—2356
С использованием лит. данных для расчета теплот парообразования алканов ($n \geq 10$) предложена ф-ла:

(ΔH_v)

Х-1980. N2

$$L = L_0 + C [2,12 (T_{к^n} - T_{к}) + 0,1315(n-6) (T_{к^n} - T - \tau)]$$
 (1), где L — теплота парообразования, L_0 — постоянная для данного гомологич. ряда, τ — постоянная, $T_{к^n}$ и $T_{к^z}$ — крит. т-ры любого и начального членов данного ряда, C — универсальная постоянная для всех алканов, не зависящая от состава и структуры молекул; в интервале т-р от -50 до 100° $C = 10,50 + 0,01733(T - 223)$, выше 383 К т-рная зависимость C имеет более сложный характер и C возрастает от $13,07$ до $26,32$ в интервале $100-200^\circ$. Максим. отклонение рассчитанных по ф-ле (1) теплот парообразования н-октана в интервале $223-373$ К составило $\sim 0,5\%$. Рассчитаны и табулированы теплоты парообразования н-ундекана, н-додекана, н-тридекана и н-тетрадекана в интервале $273-383$ К, для к-рых отсутствуют эксперим. данные.

А. Б. Кисилевский

Алкарбе

10.42

92: 11931e Heats of evaporation of substances at different temperatures. Akhmedov, A. G. (Azerb. Gos. Pedagog. Inst., Baku, USSR). Zh. Fiz. Khim. 1979, 53 (Russ).
An expression is proposed for calcn. of evaporation heats from -50 to $+100^{\circ}$.

ΔH_v

C.A. 1980. 02 N2

1979

Алканы

(ср)

13 Б688 Деп. Вычисление изохорной теплоемкости алканов на линии насыщения. Багдасарян С. С. Редкол. ж. «Теплофиз. высок. т-р». АН СССР. М., 1979. 11 с., библиогр. 4 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 13 марта 1979 г., № 879—79 Деп.)

Получены расчетные ф-лы, выражающие зависимость изохорной теплоемкости жидк. углеводородов на линии насыщения в виде $C_v = a_n l^\alpha + iR/\mu_n(1-l-\alpha)$, где $\alpha = (T - T_c)/(2T_k - T)$, T_c — т-ра отвердевания жидкости, T_k — ее крит. т-ра, a_n — изохорная теплоемкость жидкости при T_c , т. е. при $\alpha = 0$. Для алканов, от C_5 до C_{12} $a_n = a_5 + 0,05(n-5)$, $a_5 = 1,45$. Значение i соответствует кол-ву групп CH_2 в молекуле C_nH_{2n+2} , к-рую можно написать в виде $CH_3-(CH_2)_i-CH_3$; μ_n — молекулярная масса жидкости. Результаты вычисления значе-

ний C_v для алканов удовлетворительно согласуются с лит. данными. Автореферат

22. 1979, N/3

n-алканы

1979

Д 5 И161. К термодинамике жидких смесей, состоящих из двух *n*-алканов. On the thermodynamics liquid mixtures of two *n*-alkanes. Liebermann Ernst. «Z. phys. Chem.» (BRD), 1979, 115, № 1, 1-6 (англ.; рез. нем.)

термодин.

В последовательной теории растворов избыточные термодинамич. свойства определяются параметрами взаимодействия молекул разных сортов. В настоящей работе построено выражение для избыточного объема двухкомпонентной смеси *n*-алканов, которое содержит лишь термодинамич. параметры чистых компонент. Подход основан на модели, применявшейся Флори и др. (Flory P. I. et al., «J. Amer. Chem. Soc.», 1964, 86, 3507) для смеси, состоящей из цепочечных молекул. Рассчитанные для нескольких смесей *n*-алканов избыточные объемы меньше наблюдаемых экспериментально и отличаются от них менее, чем на 10%. Г. И. Салистра

ф. 1980 №5

C-H

18 Б765. Расчет энтальпии образования углеводородов различными методами. Грикина О. Е., Яровой С. С., Татевский В. М. «Ж. физ. химии», 1980, 54, № 6, 1384—1388

1980

Предложен простой метод оценки энтальпий образования углеводородов, содержащих кратные связи и циклич. группировки. Метод основан на сопоставлении энтальпии образования исследуемого углеводорода с энтальпией образования нормального алкана с тем же числом атомов углерода и внесении дополнительных поправок на определенные циклич. группировки и кратные связи. Результаты расчета по предложенному методу сравнены с результатами, полученными полуэмпирич. методами квантовой химии МЧПДП/3 и МНДП, к-рые были специально разработаны для вычисления энтальпий образования. Показано, что предложенный метод приводит к существенно меньшим отклонениям эксперим. значений от вычисленных, чем методы МЧПДП/3 и МНДП. В частности, значительно лучше согласуются с экспериментом расчетные значения для соединений с 4-членными циклами.

Автореферат

(ΔHf)

ж 1980 № 18

углеводородов
(природный газ)

1980

10 Б806. Экспериментальные термодинамические параметры для предсказания условий диссоциации гидратов природного газа. Dharmawardhana P. B., Parrish W. R., Sloan E. D. Experimental thermodynamic parameters for the prediction of natural gas hydrate dissociation conditions. «Ind. and Eng. Chem. Fundam.», 1980, 19, № 4, 410—414 (англ.)

Гидраты природного газа являются нестехиометрич.

соединениями, к-рые образуются в одной из двух возможных структур. Каждая структура состоит из полостей различного размера, в к-рых содержится газ. Для точного предсказания условий диссоциации гидратов природного газа необходимо знать значения двух основных параметров. Эти два параметра, а именно разность хим. потенциалов и разность энтальпий между пустыми решетками гидрата и льда при 273,15 К и 0 кПа, были экспериментально определены для обоих известных структур с использованием гидратов циклопропана. Кол-во клатратированного газа определялось

Д. 1981-1610

из волюметрич. измерений газа, израсходованного при образовании гидрата. Кол-во израсходованной воды определялось по уд. электропроводности р-ра KCl, из которого образовывался гидрат. Для задержки метастабильности и предотвращения поглощения газа маточной жидкостью использовалась УЗ-мешалка. Разность хим. потенциалов определялась по изменению подводимой мощности к УЗ-аппаратуре для определения частоты, требуемой для того, чтобы полностью исключить поглощение газа маточной жидкостью внутри гидрата. Дан анализ возможных ошибок эксперимента, а точность полученных значений параметров продемонстрирована сравнением предсказанных значений для давления диссоциации модельных смесей природного газа из метана, этана и пропана с эксперим. данными. Показано, что полученные новые значения параметров позволили более точно предсказать условия диссоциации гидратов природного газа для обеих структур, чем это можно было сделать с использованием др. известных в настоящее время методов предсказания.

В. Ф. Байбуз

1980

Алканы

17 Б871. Аддитивная схема для алканов с учетом второго окружения для атомов. Кнобель Ю. К., Кизин А. Н., Лебедев Ю. А. «Свойства веществ и строение молекул». Калинин, 1980, 38—47

Показана возможность уменьшения числа эмпирич. постоянных в расчетной схеме энтальпий образования алканов во втором окружении для атомов с 70 до 10, воспроизводящих эксперим. данные с точностью $\pm 0,18$ ккал/моль. Резюме

(ΔH)

№ 1980 N 17

1980

алканы

17 Б869. Сравнительное изучение аддитивных схем расчета энтальпий образования алканов. К т и -
к я н А. А., Папулов Ю. Г. «Свойства веществ и
строение молекул». Калинин, 1980, 21—32

Дан анализ расчетных методов, последовательно учи-
тывающих взаимное влияние несвязанных атомов (в
неявном и явном виде), удаленных через один, два,
три скелетных атома и т. д. по цепи алкана. Резюме

(ДН)

№ 1980 № 14

Углеводороды

1980

алканы

расчет
равновес.

14 Б924 Деп. Расчет равновесия и свойств предельных углеводородов и их смесей. Рено Н. Н. Казан. хим.-технол. ин-т. Казань, 1980. 28 с., ил., библиогр. 10 назв. (Рукопись деп. в ОНИИТЭхим г. Черкассы 26 марта 1980 г., № 285хп—Д80).

Представлены методы расчета парожидкостного равновесия и св-в легких предельных углеводородов и их смесей. При выборе методов предпочтение отдавалось аналитич. зависимостям, с целью их использования для расчетов на ЭВМ. Предложены по возможности простые и достаточно точные методы. Большинство расчетов св-в может быть проведено вручную. Термодинамич. св-ва газов и их смесей, а также константы фазового равновесия рассчитываются по уравнениям состояния с использованием ЭВМ. Порядок их расчета иллюстрирован блок-схемами.

Автореферат

№ 1980 N 14

1980

ANKAWR

$\Delta_{mix} H;$

/ 97: 29263b Calculation of equilibrium and properties of saturated hydrocarbons and their mixtures. Reno, N. N. (USSR). *Deposited Doc.* 1980, SPSTL 285khp-D80, 28 pp. (Russ). Avail. SPSTL. Liq.-vapor equil. calcns. were made for multi.-component hydrocabron mixts. using an algorithm developed by Klimenko and Kalashnikov (1974). Heats of mixing were also calcd. Equations are given for calcg. properties (d., heat capacity, thermal cond., viscosity) of gases, their mixts., and liqs.

C.A. 1982, 97, N 4

1980

Алканы

17 Б870. Расчет энтальпий образования алканов методом инкрементов замещения. Роненсон М. В., Ктикян А. А. «Свойства веществ и строение молекул». Калинин, 1980, 33—37

Найдены новые значения инкрементов замещения. Рассчитаны энтальпии образования первых 40 алканов.
Резюме

(ДН)

ж 1980 N 17

Ароматические

1981

углеводоро

гн

197: 44680d Approximate calculation of some thermodynamic properties of aromatic hydrocarbons under isothermal conditions. Bondarev, P. V. (USSR). *Nauchn. Tr. - Kursk. Gos. Pedagog. Inst.* 1981, 214(15), 194-201 (Russ). L. P. Filipov (1978) theory can be used to calc. the densities of liq. substances at high pressures. As example, densities of xylene isomers were calcd. at 20-140° and pressures to 200 MPa.

термодин.

ф-ии

©.A.1982, 97, N6

1981

$C_{23}H_{48}$
 $C_{25}H_{52}$

T_{tr}

9 Б810. Доказательство наличия фазового перехода во вращательной фазе нечетных парафинов $C_{23}H_{48}$ и $C_{25}H_{52}$. Doucet J., Denicolo I., Craievich A. Evidence of a phase transition in the rotator phase of the odd-numbered paraffins $C_{23}H_{48}$ and $C_{25}H_{52}$. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 10, 5125—5127 (англ.)

Методами ДСК и порошковой рентгенографии исследована так называемая «вращательная фаза» парафинов $C_{23}H_{48}$ и $C_{25}H_{52}$, содержащих не более 0,3 и 0,2% примесей соотв. При увеличении t -ры в области существования «вращательной фазы» происходит фазовое превращение 1-го рода из модификации с псевдогексагон. симметрией в модификацию с гексагон. симметрией. Для $C_{23}H_{48}$ этот переход происходит при $45,6^\circ$ с изменением энтальпии 25 кал/моль. Г. Л. Апарников

Х. 1982, 19, №9.

Алканы
C-H

[Оммуек 13287]

1981

$\Delta_f H^\circ$
оценка

Edward J.T.,

Can. J. Chem., 1981, 59,
N22, 3192-3194.

C-H (соединения)

алканы

1981

16 Б924. Теплота образования насыщенных углеводов и топологический индекс. Nagumi Hideyuki, Hosoya Haruo, Katayama Meiseki. «Хоккайдо дайгаку когакубу кэнкю хохоку, Bull. Fac. Eng. Hokkaido Univ.», 1981, № 103, 19—25 (япон.; рез. англ.)

Найдено и обсуждено линейное соотношение между теплотой образования линейных и разветвленных насыщ. углеводов и топологич. индексом Z. Резюме

(АНФ)

Х.1981. N16

Мужские ульяво-
городки

1981

алканы

1. 97: 12155v Improved equation of state for liquid hydrocarbons. Rykov, V. I.; Yakovleva, G. S. (USSR). *Nauchn. Tr. - Kursk. Gos. Pedagog. Inst.* 1981, 214(15), 51-6 (Russ). The proposed equation was used to calc. the thermodyn. properties, heats of formation, and isothermal compressibilities of several *n*-alkanes.

ур-не
состояние

С. А. 1982, 97, № 2.

Углеводороды

алканы

1981

Д 12 Б 796 Деп. Уравнение для расчета теплоты испарения жидких углеводородов метанового ряда в ши-

роком диапазоне температур. Соколов С. Н., Соколов Н. С., Трушкин А. О. Редкол. ж. «Изв. Вуз. Физика». Томск, 1981. 5 с., ил., библиогр. 1 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 23 февр. 1981 г., № 816—81 Деп.)

Рассмотрено уравнение зависимости теплоты испарения жидк. углеводородов метанового ряда от приведенной температуры и числа атомов в молекуле. Полученное уравнение м. б. использовано для тепловых расчетов. Уравнение представляет также нек-рый теор. интерес. Автореферат

уравнение
для расчета
теплоты
испарения

Х. 1981. N 12

$C_{20}H_{42}$

1981

Sohns J., et al.

Int. J. Thermophys.,

$\Delta H_m; T_m$; 1981, 2, N1; 71-87;

Cp.

(see $C_{14}H_{30}$; I)

Н-алканы

1981

С-Н (соед.)

ΔH_v

24 B864. Применение аддитивного метода для оценки термодинамических свойств испарения жидкостей. Н-алканы. Stein Stephen E. Application of additive estimation methods to vaporization properties of liquids. n-Alkanes. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1981, Part I, 77, № 7, 1457—1467 (англ.)

Разработан метод групповой аддитивности для оценки станд. энергий Гиббса, станд. энтальпий и станд. энтропий испарения. Метод проверен на н-алканах как модельном ряде соединений. Для оценки термодинамич. св-в испарения к сумме вкладов от каждой Me- и CH_2 -группы добавлялся терм, связанный с относит. мол. объемом жидк. и газ. фаз. Для получения давл. пара P ΔG^0 (исп.) преобразовывалась в давл. пара f в идеальногазовом состоянии. Отношение f/P оценивалось методом соответственных состояний по ф-ле Питцера. Описанный метод позволяет оценить с высокой точ-

X. 1981, 19, N24.

ностью давл. пара низколетучих n -алканов, для к-рых вкладом в неидеальность паров можно пренебречь. С использованием имеющихся неаддитивных методов для введения поправок на неидеальность величины P вплоть до $\sim 0,5$ атм м. б. оценены с близкой к эксперим. точностью.

Р. Г. Сагитов

(n-алканы)

$C_n H_{2n+2}$

$n = 5-8$

(204 вери-
альн. котг.,
 C_v)

1982

98: 96010a Calculation of the virial coefficients of some n-alkanes from calorimetric measurements. Abdulagatov, I. M.; Alibekov, B. G.; Aronson, A. S. (Dagest. Politekh. Inst., Makhachkala, USSR). *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Neft Gaz* 1982, 25(9), 55-9 (Russ). A method is proposed for detn. of model intermol. potential parameters and consequently of virial coeffs. from isochoric heat capacity, C_v , measurements. The Lennard-Jones and spherical-shell model potentials are considered. The model potential parameters for $C_n H_{2n+2}$ ($n = 5-8$) and the 2nd virial coeffs., B , for hexane at 400-633 K are presented. The B values obtained from C_v are compared with literature exptl. and theor. data.

C. A. 1983, 98, N 12.

Углевородек

1982

2 Б920. Термодинамика передачи водорода в полиядерных системах. Расчет теплот образования ароматических углеводородов и тепловых эффектов элементарных актов присоединения водорода методом эффективного гамильтониана. Гюльмалиев А. М., Гагарин С. Г., Кричко А. А. «Химия тверд. топлива», 1982, № 5, 47—55

ВН;

Предложен метод расчета теплот образования ароматич. углеводородов различного строения, на основе которого впервые рассчитаны термодинамич. параметры (теплоты образования, атомизации, сгорания) ряда полициклич. соединений, моделирующих участки структуры орг. массы угольного в-ва. Рассмотрены способы расчета тепловых эффектов элементарных стадий присоединения водорода с целью оценки относит. уд. скорости р-ции гидрирования ароматич. молекул. Резюме

Х. 1983, 19, № 2

Оммуек 16085

1982

Население
узелов

Maddad, A bded-
daim K., et al.,

Dr H,
(оценка,
координаты)

C.2. Acad. sci., 1982,
ser. 2, 295, N 11,
931- 933.

1982

С5 Н11

Кацурента Н. С., Ван -

С7 Н5

Чин - Сян Ю. Я. и др.

ЗВсее. конгр. по калориметрич и жем. Термодинам.,

Δ Нf;

Тбилиси, 14-16 сент., 1982,
Росширен. тез. докл. Тбилиси,
1982, 115.

(см. С2 Н5; I)

C₃₆H₇₄

1982

T_{tr};

11 E645. Упругие свойства монокристаллов гексатриаконтана при различных фазовых переходах. The elastic properties of hexatriacontane single crystals at their various phase transitions. Krüger J. K., Pietralla M., Unruh H.-G. «Phys. status solidi», 1982, A 71, № 2, 493—504 (англ.; рез. нем.)

Методом бриллюэновского рассеяния исследованы упругие свойства гексатриаконтана C₃₆H₇₄, в частности их зависимость от т-ры. В дополнение к уже известным фазам обнаружена новая низкотемпературная фаза между 71 и 72,7°C. Симметрия новой фазы является, по-видимому, орторомбической, с осью, перпендикулярной поверхности слоя. Упругая жесткость C₃₃ в направлении молекулярной цепочки невелика и составляет 11 ГПа при т-ре 71°С. C₃₃ определяется упругими свойствами межслойных поверхностей. Обсуждается связь температурной зависимости скорости звука в высоко-

сп. 1982, 18, N 11.

температурной гексаг. фазе (выше $73,8^{\circ}\text{C}$) с динамикой образования кинков. Полученные результаты не согласуются с данными для аналогичной фазы соединения $\text{C}_{19}\text{H}_{40}$. Различия могут быть обусловлены разной длиной молекулярных цепочек. Кратко обсуждаются упругие свойства еще одного соединения — пентакосана $\text{C}_{25}\text{H}_{52}$. Библ. 33. И. О. Майер



$C_{36}H_{74}$

1982

22 Б876. Упругие свойства монокристаллов гексатриаконтана при различных фазовых переходах. Krüger J. K., Pietralla M., Unruh H.-G. The elastic properties of hexatriacontane single crystals at

their various phase transitions. «Phys. status solidi», 1982, A71, № 2, 493—504 (англ.; рез. нем.)

$T_{\pm 2}, T_m,$

Методом бриллюэновской спектроскопии в интервале т-р 20—76,3°С (т. пл.) в трех кристаллографич. направлениях измерены упругие св-ва монокристаллов гексатриаконтана $C_{36}H_{74}$ (чистота 97%), выращенных из 0,15%-ного р-ра петр. эф. медленным испарением при комн. т-ре. В дополнение к трем обнаруженным ранее (лит. данные) и подтвержденным данным методом фазовым переходам обнаружена новая низкот-рная фаза между 71 и 72,7°С, вероятно с ромбич. структурой. Эта фаза обнаружена и подтверждена так-

X. 1982, 19, N 22

же методом ДОК. Постоянная жесткости c_{33} в направлении молек. цепей при 71°C составляет всего 11 ГПа. Рассмотрены модели всех 4 фазовых переходов. Аналогичные измерения в диапазоне т-р $20\text{—}55,7^\circ\text{C}$ сделаны для пентакозана $\text{C}_{25}\text{H}_{52}$, кристаллизованного из расплава.

В. А. Ступников

$[C_7H_7]^+$

1982

З Б139. Фотоионизационная масс-спектрометрия в миллисекундном диапазоне. Photoionization mass spectrometry in the millisecond range. Lifshitz C., Goldeberg M., Malinovich Y., Peres M. «Org. Mass Spectrom.», 1982, 17, № 9, 453—455 (англ.)

Предложена конструкция фотоионизационной масс-спектрометра, работающего в режиме заданного времени жизни ионов в диапазоне от микросекунд до нескольких миллисекунд. Прибор предполагается использовать для

ΔH_f ;

X. 1983, 19, N3

измерения энергий появления осколочных ионов, характеризующихся большим «кинетич. сдвигом», а также для измерения констант скоростей ионно-молек. р-ций. Основным конструктивным элементом нового прибора является цилиндрич. ионная ловушка (см. Mather R. E. и др., «Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.», 1980, 33, 201), из к-рой ионы эжектируются в квадрупольный анализатор спустя нек-рое заданное время. Экспериментально показано, что ионная ловушка при давлении $\leq 10^{-5}$ Торр сохраняет ионы без заметной потери до 1 мс. Найдены кривые пороговой фотоионизации для образования иона $[C_7H_7]^+$ из этилбензола при времени хранения 450 и 35 мкс; определена величина ΔH_f ($[C_7H_7]^+$) = 858 кДж/моль. Обнаружена диссоциация молек. иона циклооктатетраена до $[C_8H_8]^+$ при энергии, превышающей порог диссоциации на 0,3 эВ.

А. Кирюшкин

Углеворогдк

1982

4 Б845. Метод и установка для исследования термодинамических свойств углеводородов в тройной точке и ее окрестности. Порхун Л. Д., Патурянц А. Б. «7 Всес. конф. по теплофиз. свойствам веществ, Ташкент, 17—19 нояб., 1982. Тез. стенд. докл.» М., 1982, 114—115

термодин-
св-ва

Описана эксперим. установка, методика проведения опытов и обработки данных, позволяющих получить комплекс термич. и калорич. св-в углеводородов в окрестности тройной точки. Измерены плотности трех сосуществующих фаз вблизи тройной точки этилена, а также $P-I$ -соотношения на кривых фазовых переходов. А. М.

X. 1983, 19, N 4

$C_7H_7^+$

1982

11 Б152. Изучение C_1 — C_3 -монозамещенных алкил-бензолов путем обратной свертки первых дифференциалов кривых эффективности ионизации. The study of C_1 — C_3 monosubstituted alkyl benzenes by the inverse convolution of first differential ionization efficiency curves. Selim Ezzat T. M., Helal A. I. «Org. Mass Spectrom.», 1982, 17, № 11, 539—543 (англ.)

С использованием обратной свертки первых дифференциалов кривых эффективности ионов, образующихся при ионизации и фрагментации PhMe (I), PhEt (II) и PhPr (III). Полученные энергии ионизации (ЭИ) и энергии появления ионов, в основном, совпадают с полученными ранее данными по фотоионизации. Исследована структура кривых эффективности ионизации в пределах энергий от ЭИ до величин на ~ 4 эВ выше этой величины. Рассчитаны теплоты образования ионов $C_7H_7^+$, к-рые для I и II равны 864—5 кДж/моль. Эта величина соответствует структуре ионов тропилия. Теплота образования этих ионов в случае III составляет 923 кДж/моль и соответствует образованию бензил-катиона.

Д. В. Загоревский

ΔH_f

X. 1983, 19, N 11

[Оммуек 13622]

1982

C-H соединени

ΔH_f ,

мерной
св-ва

Svoboda V., Charvato-
va V., et al.,

Collect. Czech. Chem.
Comm. un., 1982, 47,
N2, 543-549.

1983

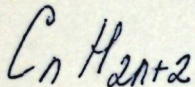
алканы

12 Б871. Разработка обобщенного уравнения калорической C_v - φ - t -поверхности н-алканов в широкой окрестности критической точки. Абдулагатов И. М., Алибеков Б. Г. «Ж. физ. химии», 1983, 57, № 2, 438—439

На основе анализа эксперим. значений C_v нек-рых н-алканов построено обобщенное ур-ние, описывающее C_v - φ - t -зависимость для в-в этого ряда. Полученное ур-ние позволяет с точностью эксперимента рассчитать значения C_v неисследованных в-в ряда н-алканов.

Резюме

X. 1983, 19, N 12



1983

/ 101: 98720m Calculation of isochoric heat capacity of a substance in liquid and two-phase regions and at the saturation line. Bagdasaryan, S. S. (USSR). Deposited Doc. 1983, VINITI 3134-83, 12 pp. (Russ). Avail. VINITI. A two-phase model was developed for the calcn. of the isochoric heat capacity, C_v , of liqs. and 2-phase regions including the satn. line. The general equation has the form $C_v = A e^a + B(1 - e^a)$, where A = isochoric heat capacity at the solidification point; $B = iR/\mu$ (R = gas const., μ = mol. mass, and i = the no. of CH_2 groups in mols. such as $C_n H_{2n+2}$ and $C_n H_{2n+1} OH$). Calcd. values are presented for water (323-533 K) and pressures of 100, 500, and 1000 bar, as well as along the satn. line (295-593 K). Equation coeffs. are presented for a series of hydrocarbons and alcs.

 C_v

R (2)

 $C_n H_{2n+1} OH, H_2O$ C.A. 1984, 101, N 12

С-Н - соединения

1983

Коптюг, Валентин Афанасьевич.

Аренониевые ионы : Строение и реакц. способность/
Отв. ред. Ю. Н. Молин. — Новосибирск : Наука. Сиб.
отд-ние, 1983. — 269 с., ил.; 22 см.

В надзаг.: АН СССР, Сиб. отд-ние, Новосиб. ин-т орган. химии.
Библиогр.: с. 252—269 (793 назв.).

В пер. : 3 р. 60 к. 1200 экз.

— — 1. Ониеые соединения.

547-128.4

№26486 18.3

14 №233 [84-41497] п. вс

ВКП 31.07.84 K658

К 1803000000-729/055(02)-83 22-83-1

CH₄ - C₂H₄

1983

непримен.
сб - 82

101:79095v The prediction of thermodynamic properties by the use of the principle of corresponding states. Lee, J. W.; Kim, H. S.; Rhee, B. S. (Dae-Jeon Mach. Depot, Daejeon, S. Korea). *Proc. - Pac. Chem. Eng. Congr.*, 3rd 1983, 2, 327-33 (Eng). Edited by Kim, Chul; Ihm, Son Ki. Korean Inst. Chem. Eng.: Seoul, S. Korea. A computer program was developed on the principle of corresponding states theory. Two binary correction parameters are optimized for CH₄-ethylene and CO₂-ethylene systems. The compressibility factors are predicted for these systems.

~~101~~ (7) CO₂ - CO₂

C.A. 1984, 101, N 10

Углеводороды

1984

23 Б3015. Расчет теплофизических параметров углеводородов. Балмуш Н. И., Рыков В. И., Яковлева Г. С. «Ультразвук и термодинам. свойства вещества». Курск, 1984, 42—45

Предложено уравнение для расчета изобарной коэф. объемного расширения углеводородов на линии насыщения.

Резюме

расчет теплофиз. параметров.

Х. 1985, 19, N 23.

C-H

1984

Ботова В. И., Фиалков Б. С.

О роли активных частиц Н и H_2O в химионизации
при горении углеводородов.

Журн. физ. химии, 1984, т. 58, вып. 3, с. 708—711.

Библиогр.: 12 назв.

— — 1. Углеводороды — Горение. 2. Пламя — Ионизация.

№ 52942

14 № 4077

ВКП 21.05.84

УДК 541.128+543.42+536.46+537.212

18.5

Температурные
св-ва
углеводородов

C-H

Ср,
Теплопроводность

1984

7 БЗ008 Деп. Обобщенные уравнения для расчета теплофизических свойств жидких ароматических углеводородов в зависимости от температуры. Мустафаев Р. А., Тагиев С. И., Степанова Т. А., Кривцов В. Г., Гасанов Г. Т.; Ред. «Инж. физ. ж.», Минск, 1985. 10 с. Библиогр. 22 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ) 25 дек. 1984 г., № 8242—84 Деп.)

На основе имеющихся эксперим. данных предложена методика расчета и прогнозирования коэф. теплопроводности и уд. теплоемкости ароматич. углеводородов в широком диапазоне при атмосферном давлении. Приведены результаты проверки предложенных методов расчета по имеющимся эксперим. данным. Автореферат

Х. 1985, 19, № 7

Углеводороды

1984

18 Б3012. Возможности для оценки свойств чистых веществ. Часть 6. Энтальпия испарения углеводородов. Möglichkeiten zur Schätzung der Eigenschaften reiner Stoffe. Teil 6: Die Verdampfungsenthalpie der Kohlenwasserstoffe. Richter Harald. «Chem. Lab. und Betr.», 1984, 35, № 4, 187 (нем.)

С использованием лит. данных для углеводородов исследована зависимость от среднеквадратичного значения радиуса молекулы r^2 безразмерных величин $\Delta h_{0p_k}/p_k$ и $\Delta H_0/RT_k$, где Δh_0 — уд. теплота испарения в т. кип. при нормальном давл., экстраполированная к 0 К, ΔH_0 — мол. теплота испарения при 0 К, а p_k , p_k и T_k — крит. постоянные. Найдено, что обе безразмерные величины с одинаковой точностью линейно зависят от r^2 . На основе вывода Альтенбурга, что определенные комбинации крит. постоянных для ациклич. и циклич. углеводородов являются простыми ф-циями r^2 , показано, что Δh_0 для углеводородов зависят только от их крит. постоянных. Пред. сообщ. см. «Chemicer-Zeitung», 1971, 95, 916. В. Ф. Байбур

ΔH_v , оценок

X. 1984, 19, № 18

Yueboqogtr

1984

/ 103: 27626r Hole theory and viscosities of liquids. Saleh, M. A.; Ahmed, Omar (Dep. Chem., Univ. Chittagong, Chittagong, Bangladesh). *J. Bangladesh Acad. Sci.* 1984, 8(2), 35-9 (Eng). Viscosities of 34 liqs. were measured and the $n(\Delta H_v/B)$ ratios, where ΔH_v = heat of evapn. and B = activation energy of viscous flow, were calcd. Within the limits of exptl. error and with some approxn. in the ΔH_v value for some liqs., $n = 3-5$ for hydrocarbons, $n = 1-3$ for H_2O and alcs., and $n \sim 3$ for amines and esters. The lower the n values, the greater is the strength of mol. interaction. Eyring mechanism of viscous flow, based on the hole theory, is discussed.

(Dr H)

C. A. 1985, 103, N4.

Угневогорич

(Om. 20553)

1984

102: 68259w Lines of extremes of isochoric heat capacity of hydrocarbons. Amirkhanov, Kh. I.; Abdulagatov, I. M.; Alibekov, B. G.; Vikhrov, D. I.; Mirskaya, V. A. (Inst. Fiz., Makhachkala, USSR). *Teplofiz. Vys. Temp.* 1984, 22(6), 1116-19 (Russ). The curves representing max. and min. of the isochoric heat capacities of pure compds. in the vicinity of the crit. points were studied. Equations are proposed for the curves as functions of crit. parameters and the coeffs. are presented for heptane. The approach can be used to calc. the C_v of various substances in wide regions around the crit. points, including the metastable regions.

(Cv)

C.A. 1985, 102, N 8

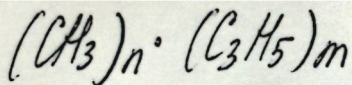
$C_{14}H_{18}$ (x, a)

1985

Chrico R. D.,
Hossenlopp I. A.
et al.

$G_5 \rightarrow 446K,$
 $\Delta_m H, H(T, 0),$
 $S(T, 0)$

Bulletin of Chem.
Thermodyn., 1985,
28, ● N 228.



1985

$$n = 0-3$$

$$m = 1-4;$$

$$n+m = 4$$

9 Б3063 Деп. Температурная зависимость давления насыщенного пара метилаллилсиланов. Дицент В. Е., Скороходов И. И., Терентьева Н. А., Жунь В. И., Цветков А. Л., Шелудяков В. Д.; НИИ химии и технол. элементоорган. соедин. М., 1985. 6 с. Библиогр. 3 назв. Рус. (Рукопись деп. в ОНИИТЭхим, г. Черкассы 10.11.85, № 1081-хп)

В статич. условиях определены т-рные зависимости давл. насыщ. пара метилаллилсиланов состава $(CH_3)_n \cdot (C_3H_5)_m$, где $n=0-3$; $m=1-4$; $n+m=4$. Результаты аппроксимированы ур-ниями вида $\lg P = A - B/T - C \lg T$.
Автореферат

X. 1986, 19, 49

C₆H₂

[DM. 29488]

1985

Hebler W.,

Wilhelm-Pieck-Universi-
tät Rostock, Wissen-
schaftliche Z., Natur-
wissenschaftliche Reihe, 1985,

34, Heft 9, 36-42.

C7 H12

Lebedev B.V., Lebedev N.K.,
et al.,
1985

G,
bulletin of Chem. Therm
dyn., 1985, 28, p. 228
13 → 330K

C_3H_{10}

1985

Mraw S.C.,

ΔH_v ,

Bulletin of Chem. Thermo
dyn., 1985, 28, p. 228

C_4H_{18} [On: 21648] 1985
(membranous) Saito K., Atake T.,
et Chikara H.,
J. Chem. Thermodyn.
G, Tr, ΔH_{tr} ; 1985, 17, N 6, 539 -
548.

$(CH)_{12}$

1985

21 Б3074. Неэмпирические расчеты теплот образования углеводородов средних размеров. 5. Структура $(CH)_{12}$, близкая к усеченному тетраэдру. Ab initio heats of formation of medium-sized hydrocarbons. 5. A $(CH)_{12}$ structure related to the truncated tetrahedron. Schulman J. M., Disch R. L., Sabio M. L. «J. Amer. Chem. Soc.», 1985, 108, № 12, 3258—3260 (англ.)



I



II



III

ΔH_f°

X. 1986, 19, N 21

Неэмпирическим методом ССП рассчитаны геометрия и энергия Ув $C_{12}H_{12}$ (I), углеродный каркас к-рого близок к усеченному тетраэдру, и возможных предшественников I — триена (II) и тетраена (III). Для величины $\Delta_f H$ (I, 298 K) получено значение 91 ккал/моль. II устойчивее I на ~16 ккал/моль, а III по сравнению с I менее стабилен на 24 ккал/моль. Сообщ. 4 см. РЖХим, 1986, 10Б1053. Р. Г. Сагитов

[Om. 21905]

1985

С4 Н18

Васвков Е.Т.,

Холод. техника, 1985,
N 3, 29 - 30.

ур-не
сост.,
термез.
св-ва

Углевородороды

1985

Zheleznyi V.P., Pugach A.K.

(Ткрыт) Zh. Fiz. Khim. 1985,
59(3), 739-40.

(см. Блатородные газы; I)

$C_n H_{2n}$

Om. 23793

1986

Alberty R.A., Oppenheim I.,

$\Delta_f H;$

J. Chem. Phys., 1986, 84,
N2, 917-920.

$C_2H_2 \div C_5H_8$ (mean of cb-ba)

1986

$C_2H_2 \div C_8H_{14}$
(avg. range)

($C_p, S, \Delta_f H, \Delta_f G$)

/106: 126861g Standard chemical thermodynamic properties of alkyne isomer groups. Alberty, Robert A.; Burmenko, Ellen (Dep. Chem., Massachusetts Inst. Technol., Cambridge, MA 02139 USA). *J. Phys. Chem. Ref. Data* 1986, 15(4), 1339-49 (Eng). The chem. thermodyn. properties of alkyne isomer groups from C_2H_2 to C_8H_{14} in the ideal gas phase were calcd. from 298.15 to 1000 K from the tables of Stull, Westrum, and Sinke. In the absence of literature data on all isomers of higher isomer groups, the properties of isomers of C_6H_{10} to C_8H_{14} were estd. by using Benson group values. Equil. mol fractions within isomer groups were calcd. for the ideal gas state from 298.15 to 1000 K. For isomer group properties, increments per C atom were calcd. to show the extent to which thermodyn. properties of higher isomer groups may be obtained by linear extrapolation. Values of heat capacity, entropy, heat of formation, and free energy are given for all species from C_2H_2 to C_8H_{14} in SI units for a std. state pressure of 1 bar.

C. A. 1987, 106, N 16.

Угневорог

1986

105: 232704x Vapor pressures of hydrocarbons (C_{10} - C_{18} alkanes and alkylbenzenes) at 3-1000 Pa. Allemand, Nadine; Jose, Jacques; Merlin, J. C. (Lab. Chim. Anal. I, Univ. Lyon I, 69622 Villeurbanne, Fr.). *Thermochim. Acta* 1986, 105, 79-90 (Fr). For decane, dodecane, tetradecane, pentadecane, octadecane, octylbenzene, nonylbenzene, and dodecylbenzene, the vapor pressures ($P = 10^{-2}$ to 10 mm Hg at 50-250°) were detd. exptl. (with the gas-satn. method for low P), and were correlated with the equation given by D. W. Scott and A. G. Osborn (1979). The Scott-Osborn equation was also used to extrapolate literature data for high P to low P for comparison with the present exptl. results.

(p)

C.A. 1986, 105, n26

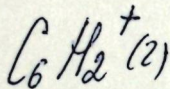
$C_6H^+(17)$

(DM. 24284)

1986

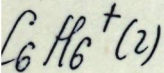
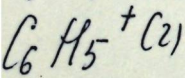
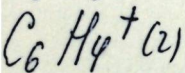
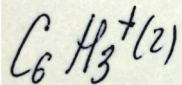
Anicich V., Muntress W.T.,
et al.,

$\Delta_f H$; J. Phys. Chem., 1986,
90, N 11, 2446-2450.



(OM 24284)

1986



Anicich V., Muntress W.T.,
et al.,

J. Phys. Chem., 1986,
90, N11, 2446 - 2450.

ΔH° ,

$C_5H^+(17)$

(Om. 24284)

1986

$C_5H_2^+(17)$

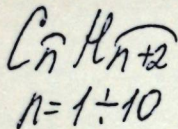
Anicich V., Muntress W.T.,
et al.,

$C_5H_3^+(17)$

$C_5H_5^+(17)$

J. Phys. Chem., 1986,
90, 11, 2446-2450.

$\Delta_f H_i$



1986

/ 105: 232696w A formula for calculating boiling points of normal paraffinic hydrocarbons. Cao, Jing (Jiangsu Prov. Inst. Chem. Eng., Nanjing, Peop. Rep. China). *Huaxue Tongbao* 1986, (9), 36 (Ch). An equation for calcg. the boil point of normal paraffinic hydrocarbons $C_n H_{n+2}$ is given. The b.p.'s of alkanes with $n = 1$ to 10 and higher n were calcd. and compared with other calcd. results.

(T_b , paraffin)

C. A. 1986, 105, N 26

Уневзорост Om. 25048 1986

Chickos F. S., Annunziata R.
Ladon L. H.,

Δ₃H
(overku)

J. Org. Chem., 1986,
51, ● N22, 4311-4314.

Углеродист

1986

105: 198055z Estimating heats of sublimation of hydrocarbons. A semiempirical approach. Chickos, James S.; Annuziata, Robin; Ladon, Liina H.; Hyman, Arthur S.; Liebman, Joel F. (Dep. Chem., Univ. Missouri. St. Louis, MO 63121 USA). *J. Org. Chem.* 1986,

51(22), 4311-14 (Eng). Existing relationships for the estn. of the heats of sublimations and exptl. results available (often with large discrepancies) are discussed. A simple relation reported earlier by the author together with measured heats of fusion and calcd. heats of evapn. was used to calc. acceptable heat of sublimation values.

(ДЗН, оцетка)

С.А. 1986, 105, № 22

(All. open.)

$n\text{-C}_{12}\text{H}_{26}$

1986

12 E357. Теплопроводность твердого n -додекана при высоких давлениях; сопоставление с n -ундеканом и n -тридеканом. Thermal conductivity of solid n -dodecane at high pressure and a comparison with n -undecane and n -tridecane. Forsman H., Andersson P. «Mol. Phys.», 1986, 58, № 3, 605—610 (англ.)

Теплопроводность λ твердого $n\text{-C}_{12}\text{H}_{26}$ (I) измерена методом нагреваемой проволоки с погрешностью 3% в интервале t -р 190—280 К при давл. 30 МПа, а также при t -ре 273 К и давл. до 1 ГПа. Полученные результаты сопоставлены с аналогичными данными для $n\text{-C}_{11}\text{H}_{24}$ (II) и $n\text{-C}_{13}\text{H}_{26}$ (III). Обнаружено, что величина λ для I в кристаллич. фазе заметно выше, чем для II и III, тогда как в жидкой фазе все три вещества имеют примерно одинаковую величину $\lambda = 0,15 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$. Причиной обнаруженной нерегулярности поведения λ в ряду n -алканов авторы считают различия в

λ ;

Ф. 1986, 18, № 12.

кристаллич. структуре *n*-алканов C_nH_{2n+2} с четным и нечетным *n*. Структура в-в с четным *n* более стабильна и эти в-ва обладают большей плотностью. Т. обр. сравнительно большую величину λ для I удастся качественно объяснить при помощи известной корреляции между λ и плотностью.

А. Д. О.

Угневсорогт (Dm. 26723)

1986

Hicks M., Thiel W.,

ΔH, kb. mex.
parent

J. Comput. Chem.,
1986, 7, N2, 213-
218.

$H^+(CH_4)_2$ [om. 25299] 1986

Miraoka K., Takimoto H.,
et al.,

$(\Delta_f H^\circ_{Ap})$ J. Phys. Chem., 1986,
90, 1122, 5910-5914.

Углевороодк

1986

6 Б3011. Принципы аддитивности энтальпий циклических углеводородов. Кабо Г. Я.; Роганов Г. Н. «Докл. АН БССР», 1986, 30, № 9, 832—835 (рез. англ.)

Предложен универсальный подход к аддитивным расчетам термодинамич. св-в алициклич. соединений, основанный на введении в рамках современной классич. теории строения орг. соединений дополнительной х-ки, эффективного атома, названной цикличностью. Цикличность определяется исходя из размеров циклов, в к-рые включен атом, и способов соединения циклов в молекуле. Эффективность предложенных принципов классификации атомов проверена в аддитивных расчетах энтальпий образования и р-ций при 298,15 К для 92 газ. алициклич. углеводородов, содержащих циклы размером 2—6 атомов углерода, с числом циклов от 1 до 6. Среднее отклонение рассчитанных величин от эксперим. не превысило 1,25 кДж/моль. Резюме

ΔH_f

Х. 1987, 19, № 6.

Умбого/рогк (K)

1986

106: 108321b Method and apparatus for determining the temperature of phase conversions of solid hydrocarbons. Orlov, F. P.; Arsen'ev, S. A.; Grishin, A. P. (Grozny Petroleum Institute) U.S.S.R. SU 1,260,792 (Cl. G01N25/02), 30 Sep 1986, Appl. 3,820,330, 04 Dec 1984. From *Otkrytiya, Izobret.* 1986, (36), 171. The temp. of the phase transition of solid hydrocarbons is detd. by uniform heating of the substance being studied, contg. a trace of a surfactant, in the phase transition temp. range, measuring the temp. of the substance and the p.d. at the elec. double layer formed during the directional crystn. of the substance being studied, and detg. the desired value from the sudden change of course of the temp. in relation to the p.d. at the elec. double layer. The sensitivity and reliability of the detn. are increased by 1st heating the substance being studied to 40-50 K above its m.p., carrying out directional crystn. of the melt at a rate ≥ 10 K/min until solidification, cooling the system to a temp. below the phase transition temp. and then heating at a rate ≤ 0.05 K/min. The app. consists of a heating unit, within which are placed electrodes, and a temp. sensor, and recorders. The electrodes are made of coaxially arranged tubes with hemispherical bottoms. The outside tube, designed to engage the sample, is grounded, and the inside one, connected to a recorder, is equipped with a coolant distributor.

И
И₂

C.A. 1987, 106, N 14

Угневодороды

1986

(термодинам.)

монокристаллы

106: 20821d Thermodynamic properties of hydrocarbons. Parker, T. E.; Sawyer, R. F.; Oppenheim, A. K. (Lawrence Berkeley Lab., Berkeley, CA USA). Report 1986, LBL-21104; Order No. DE86010401, 200 pp. (Eng). Avail. NTIS. From *Energy Res. Abstr.* 1986, 11(14), Abstr. No. 32368. A numerical technique for calcg. thermodyn. properties of nonpolar pure substances is presented. It is based on the use of the extended principle of corresponding states for the detn. of pressure-vol.-temp. relations and their redn. to the Benedict-Webb-Rubin equation of state. Virial coeffs. are deduced and combined with sp. heat data to det. the internal energy, entropy, and bulk modulus of elasticity. On this basis an algorithm is developed to calc. properties for a state fixed by any 2 independent parameters. The technique thus established is applied to normal paraffins, and the results for all species, from CH_4 [74-82-8] to hexadecane [544-76-3], are presented in tabular and graphical form.

C. A. 1987, 106, N4.

Угневогорогн

1986

1 106: 162930n Method of determining hydrocarbon vapor pressure. Rut'kov, E. V.; Tontegode, A. Ya. (Leningrad Physical-Technical Institute) U.S.S.R. SU 1,272,195 (Cl. G01N7/14), 23 Nov 1986, Appl. 3,759,952, 04 May 1984. From *Otkrytiya, Izobret.* 1986, (43), 73. The vapor pressure of hydrocarbons is measured by introducing them into a chamber and measuring the pressure with an ionization manometer. The detn. of the vapor pressure of different hydrocarbons is simplified by placing a Re sample in the chamber before adding the hydrocarbon, heating it to 2400° K to remove impurities, and before measuring the vapor pressure the Re sample is heated to 2000-2300° K. The vapor pressure of the hydrocarbons is calcd. from the relation $P_{C_mH_n} = 2p/\alpha_{H_2}n$ ($P_{C_mH_n}$ is the vapor pressure of the hydrocarbon; p is the pressure measured with the ionization manometer; α_{H_2} is the sensitivity of the ionization manometer to H_2 ; and n is the no. of atoms of H in the mol. of the hydrocarbon being studied).

(P)

C.A. 1987, 106, N 20.

Углеводороды

1986

22 Б2463. Расчет теплофизических параметров жидких углеводородов на линии насыщения. Рыков В. И. «Ультразвук и термодинам. свойства вещества». Курск, 1986, 103—105

Предложено новое полуэмпирич. ур-ние, к-рое позволяет рассчитывать в широком интервале т-р изобарич. коэф. объемного расширения жидкости на линии насыщения. Из резюме

коэф. объем

ного расши
рения

Х. 1987, № 22

$C_{12}H_{12}(2)$ [Om. 24 296]

1986

Schulman J.M., Disch R. L.,
et al.,

AsH, u.n. J. Amer. Chem. Soc.,
1986, 108, N12,
3258 - 3260.

Углевоспрогн

1986

105: 178736u Vapor pressure and saturated liquid density of seven hydrocarbons. Sifner, Oldrich; Nemec, Frantisek (Ustav Termomech., CSAV, Prague, Czech.). *Chem. Prum.* 1986, 36(8), 420-3 (Czech). Approxn. equations are given for calcg. the satd. liq.

densities and satd. vapor pressures of the C_1 - n -alkanes, isobutane, C_2H_4 , and propene. The relatively simple equations describe the relative d. (ρ/ρ_c) and relative pressure (p/p_c) as multiparameter functions of $\tau = 1 - (T/T_c)$, where T is the abs. temp., and subscript c denotes the crit. value. The exptl. data agreed with those described by the equations with deviations ranging from 0.1 to 0.2%, with the exception of propene (for which the deviations were up to 0.4%).

(P)

C.A. 1986, 105, N20

Углеводороды
метанового
ряда

1986

7 9 И212 ДЕП. Аномалии в теплофизических свойствах жидких углеводородов метанового ряда. Соколов Н. С.; Ред. ж. «Изв. ВУЗОВ. Физ.» — Томск, 1986. 19 с., ил. Библиогр. 5 назв. Рус. (Рукопись деп. в ВИНТИ 28.05.86, № 3841—В)

Обобщены опытные данные по теплофизич. свойствам жидких углеводородов метанового ряда. Получены ур-ния, описывающие ряд свойств. Обнаружена линейная зависимость свойств от числа атомов в молекуле углеводорода и ее нарушение в некоторых точках.

Автореферат

ср. 1986, 18, № 9

$C_7H_{11}^+(2)$ [Om. 26144]

1987

Blanchette M.C., Holmes J.
et al.,

AsH,

J. Amer. Chem. Soc.,
1987, 109, N 5, 1392 -
1395

C-H,

[Om. 28160]

1987

аккары

Орлов Ю.Ф., Крюков Ю.К.

и др.,

Δ Hf, лето-
ге оцветки

Зл. гру. хвощи,

1987, ● 6.1, N 12, 3175-80

Углеводороды

1987

С - Н

термод. св-ва

14 Б3023. Дополнительные факторы, влияющие на термодинамические свойства углеводородов. Половой Ю. Н. «Прогресс. технол. судостр. и свароч. пр-ва». Николаев, 1987, 78—86

Констатируется, что в отдельных случаях структурно-групповой метод для Ув с поправками на цикличность и разветвление цепей требует учета дополнительных факторов — взаимодействия кратных связей, а также различного положения заместителей в ароматич. и нафтеновых циклах. Представлены в виде табл.

вычисленные в интервале t -р 298—1500 К значения энтальпийных и энтропийных поправок на взаимодействие кратных связей и на положение алкильных заместителей в ароматич. Ув, циклопентанах и циклогексанах. Введение поправок нетрудоемко и приводит к удовлетворительным результатам. Р. Г. Сагитов

Х. 1988, 19, № 14

Yurevskiy - (Om. 26 510)

1987

progr
Cn Hm

Randzio S. L.,

Thermochim. acta, 1987,

(Cp(2)) 115, 83-89.

$C_7H_6^+$

1987

108: 229038q Energetics of $[C_7H_6]^+$ fragment ion using electron impact technique. Selim, Ezzat T. M.; Rabbih, M. A.; Rezk, A. M. Hassan; Fahmey, M. A. (Nucl. Res. Cent., At. Energy Establ., Cairo, Egypt). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1987, 25(11), 451-5 (Eng). $[C_7H_6]^+$ fragment ions produced from benzyl alc., benzylamine and benzyl cyanide were studied using the electron impact technique. The ionization efficiency data were treated by deconvoluted 1st differential technique. First and higher appearance energy values for the ion are reported. The heats of formation for the ions obtained from benzyl alc., benzylamine and benzyl cyanide are <1274, 1293 and 1221 kJ mol⁻¹, resp. Kinetic energy release values assocd. with fragmentation of metastable $[C_mH_6]^+$ ions suggest that these ions undergo loss of H from three different structures or mixts. of structures.

(A₅H)

C.A. 1988, 108, N26

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

$$n \leq 10$$

1987

Shelomentsev A.M.
Golik N.N.

Tr, Per,
Per;

Izvzh. - Fiz. Zh. 1987,
53(4), 678 - 86.

(see. CD; I)

C-H

1987

соединен.

Tzouporoulos C.

AIChE J. 1987, 33

критическ.
поемоям.

(12), 2080-3.

(сир. CH_4 4 гр; $\frac{1}{\text{X}}$)

C₇H₁₂

[Om. 27712]

1987

(норборкан)

Xu-Wu A., Hui-Ping Z.
et al.,

ΔH_f ,

Thermochim. acta, 1987,
121, 473-477.

$C_{10}H_2$

(DM-28712)

1988

Dessau L., Spangenberg H.-J.

memos.
p-u

Z. Phys. Chem. DDR,

$T \leq 2000K$

1988, 269, N 1, 187-190

C₆H₂

[om. 28712]

1988

DeSSau L., Spangen-
berg H. - Z.,

memor.
op-III

$T \leq 2000\text{K}$

Z. Phys. Chem. DDR,
1988, 269, N 1,

187-190 ●

C_8H_2

(om. 28712)

1988

Dessau L., Spangenberg H.-J.

memor.

q-m

$T \leq 2000K$

Z. Phys. Chem. DDR,
1988, 269, N1, 187-190.

Жерноу. св-ва
углеводородов

1988

10 И91. Вычисление термодинамических свойств углеводородов при 298,15 К. Estimation of the thermodynamic properties of hydrocarbons at 298,15 K / Domalski E. S., Hearing E. D. // J. Phys. and Chem. Ref. Data.— 1988.— 17. № 4.— С. 1637—1678.— Англ.

Метод Бенсона, предложенный для вычисления термодинамич. свойств органич. соединений в газовой фазе, распространен на твердое и жидкое состояние. К ряду вычисляемых характеристик — энтальпия образования, теплоемкость и энтропия при t -ре 298,15 К. Расчет теплофизич., характеристик предполагает суммирование инкрементов атомных групп, составляющих молекулу, с учетом ближайшего окружения. Представлены таблицы групповых вкладов для углеводородов ряда алканов, алкенов, алкинов, ароматических и циклич. углеводородов, составленные на основе эксперим. данных последних лет. Проведено сопоставление рассчитанных и эксперим. значений, наблюдаемое расхождение имеет порядок погрешности эксперим. данных. Библ. 144. С. К.

ср. 1989, №10

Опавика
(универзитет)

1988

($\Delta_f H_{298}$)
Опавика

111: 29170b Estimation of the thermodynamic properties of hydrocarbons at 298.15 K. Domalski, Eugene S.; Hearing, Elizabeth D. (Cent. Chem. Phys., Natl. Inst. Stand. Technol., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Phys. Chem. Ref. Data* 1988, 17(4), 1637-78 (Eng). The estn. methods developed by S. W. Benson and coworkers, for calcg. the thermodyn. properties of org. compds. in the gas phase, were extended to the liq. and solid phases for hydrocarbon compds. at 298.15 K. The 2nd order approach which includes nearest neighbor interactions was applied to the condensed phase. A total of 1311 comparisons are made between exptl. detd. values and those calcd. by using additive group values. Of the 559 comparisons given for the enthalpy of formation in the gas, liq., and solid phases, the av. difference (residual), without regard to sign, is 2.5 kJ/mol. The av. differences for 390 comparisons for the heat capacity and 352 comparisons for the entropy in the three phases are 1.9 and 2.3 J/mol.K, resp. The good agreement between exptl. and calcd. values shows that the Benson group additivity approach to the estn. of thermodyn. properties of org. compds. is applicable to the liq. and solid phases as well as the gas phase. Appendices provide example calcns. of the thermodyn. properties of selected hydrocarbon compds., total symmetry nos., and Me repulsion corrections. Most of the 144 refs. listed offer an indication of the activity in the development of estn. methods for calcg. thermodyn. properties since 1931.

C.A. 1989, III,
N 4

(all open)

1988

Периодичам
св-ва углево
родов

18 БЗ004. Оценка термодинамических свойств углеводородов при 298,15 К. Estimation of the thermodynamic properties of hydrocarbons at 298,15 K / Domalski E. S., Hearing E. D. // J. Phys. and Chem. Ref. Data.— 1988.— 17, № 4.— С. 1637—1678.— Англ.

Метод групповых вкладов для оценки термодинамич. св-в орг. соединений в газовой фазе, предложенный Бенсоном с сотрудниками, применен к жидк. и тв. Ув при 298,15 К. Метод Бенсона является приближением 2-го порядка, в к-ром учитываются взаимодействия между соседями и их ближайшим окружением. Всего проведено 1311 сравнений вычисленных и эксперим. величин. Из 559 сравнений для $\Delta_f H^\circ$ газ., жидк. и тв. фаз средн. разность (безотносительно к знаку) составила 2,6 кДж/моль. Из 390 сравнений для C_p и S° трех фаз средн. разность равна 1,9 и 2,3 Дж/К·моль соотв. Хорошее согласие между расчетными и эксперим. данными свидетельствует о возможности применения метода групповой аддитивности Бенсона как к газ., так и к конденс. фазам. Приведены примеры расчетов термодинамич. св-в, полных чисел симметрии и поправок на отталкивание метильных групп. Библ. 144.

По резюме

Х. 1989, № 18

Алканы

(C-H соединения)

1988

15 Б3018. Термодинамические свойства алканов из данных по скорости звука, полученных с использованием сферического резонатора. 2. н-Бутан. Thermophysical properties of alkanes from speeds of sound determined using a spherical resonator. 2. n-Butane. Ewing M. B., Goodwin A. R. H., McClashan M. L., Trusler J. P. M. «J. Chem. Thermodyn.», 1988, 20, № 2, 243—256 (англ.)

Из измерений частот радиальной моды сферич. акустич. резонатора получена скорость звука в газ. н-бутане при t -рах 250—320 К и давл. 12—110 кПа. Вычислена C_p в состоянии идеального газа, t -рная зависимость k -рой описывается ур-нием $C_p/R = 0,03414T + 440/T$, а также 2-й и 3-й акустич. вириальные коэф. Детально обсуждены методы нахождения P , V , T вириальных коэф. из акустич. данных. Вычисл. значения 2-го ($-B$) и 3-го ($-C$) вириаль-

C_p ;

(*)

X. 1988, 19, № 15

C_3H_8

ных коэф. при 250, 300 и 320 К составили соотв.
1081,5 см³/моль и 0,716 дм⁶/(моль)², 695,9 и 0,071,
601,8 и -0,0002. Сообщ. 1 см. РЖХим, 1988, 4Б3021.
Р. Г. Сагитов

C-H

[Om. 30 833]

1988

актатор

Gao Y., Hosoya H.,

Bull. Chem. Soc. Jap. 1988,

61, N 9, 3093-3102.

Topological Index and Thermo-
dynamic Properties of the -size de-
pendency of the structure —

Activity Correlation of Alkanes.

RCH_x

$R = H, CH_3,$
 C_2H_5, C_2H, C_2H_3
 $X = 0, 1, 2$

u.n., $\mathcal{I}$,
 ΔH

1988
Georg E., Onderschub.

Z. Chem. 1988, 28,
N^o, 339-340

● (all. RCH_x , III)
 $R = H, CH_3$, u.T.G.
 $X = 0, 1, 2$.

$C_{10}H_{20}$

1988

Гусейнов С. О.,
Мирзалиев А. А.

Ср;

Теплофиз. свойства
веществ и материалов
(Албекка), 1988, №24,
14-18. ●

(см. C_4H_{14} ; I)

C₂₂H₄₆

1988

/ 112: 64141p Thermodynamic properties and evolution of structure as function of temperature of pure paraffines n-C₂₂, n-C₂₃ and n-C₂₄ and of binary mixtures n-C₂₂/n-C₂₄. Hasnaoui, N.; Bourdet, J. B.; Dellacherie, J.; Schuffenecker, L.; Dirand, M. (INPL, ENSIC, 54042 Nancy, Fr.). *Calorim. Anal. Therm.* 1988, 19, P11.1-P11.6 (Fr). The compds. and the mixt. were studied by DTA, differential scanning calorimetry and powder x-ray anal. Enthalpies were measured at 290-340 K. For pure C₂₂H₄₆ and C₂₄H₅₀, only one phase transition was obsd., the low-temp. β to high-temp. α , near the m.p. More complicated phase transitions were obsd. in C₂₃H₄₈. Complex phase transitions were also obsd. for the C₂₂H₄₆-C₂₄H₅₀ system, which was studied over the entire compn. interval.

(C_p , T_g , T_m)

(42) $\boxtimes$

C.A. 1990, 112, n8

● C₂₃H₄₈, C₂₄H₅₀

И-С₂₂Н₄₆

1988

T_m, T_{t2}

9 Б3008. Изменение термодинамических свойств, связанных со структурными изменениями индивидуальных парафинов $n\text{-C}_{22}$, $n\text{-C}_{23}$ и $n\text{-C}_{24}$, а также их бинарных смесей. Propriétés thermodynamiques et évolutions structurales en fonction de la température des paraffines pures $n\text{-C}_{22}$, $n\text{-C}_{23}$ et $n\text{-C}_{24}$, et de mélanges binaires $n\text{-C}_{22}$ — $n\text{-C}_{24}$ / Hasnaoui N., Bourdet J. B., Dellacherie J., Schuffenecker L., Dirand M. // JCAT 88: 19ème Journées calorim. et anal. therm., Lille, 24—26 mai, 1988— [Marseille], [1988].— Р.11/1—Р.11/6.— Фр.

Фазовые превращения Ув $n\text{-C}_{22}$ (I), $n\text{-C}_{23}$ (II), $n\text{-C}_{24}$ (III), а также их бинарных смесей исследованы методами ДСК и рентгенографич. анализа в интервале t -р от 290 до 340 К. Обнаружены фазовые переходы в тв. состоянии при 315 К в I, 312 и 320 К в II и 320 К в III, т. пл. равны 318, 322 и 325 К, соотв. Эксперим. данные по H_T — H_{298} приведены в графич. форме.

Л. А. Резницкий

⊠ (+2)

Х.1990, №9

$C_{23}H_{48}$

1988

Hasnaoui N.,

Bourdet J.B. et al.

Calorim. Anal. Therm.

1988, 19, P 11.1 - P 11.6.

(C_p , T_z ,
 T_m)

(cell. $C_{22}H_{46}$; I)

$C_{24}H_{50}$

1988

Hasnaoui N.,
Bourdet J.B. et al.

(C_p , T_z ,
 T_m)

Calorim. Anal. Therm.
1988, 19, P 11.1 - P 11.6.

(see $C_{22}H_{46}$; I)

(CH₄)₂ (aq)

1988

109: 177756w Efficient computation of absolute free energies of binding by computer simulations. Application to the methane dimer in water. Jorgensen, William L.; Buckner, J. Kathleen; Boudon, Stephane; Tirado-Rives, Julian (Dep. Chem., Purdue Univ., West Lafayette, IN 47907 USA). *J. Chem. Phys.* 1988, 89(6), 3742-6 (Eng). An efficient procedure is noted for computing abs. free energies of binding for complexes in soln. Two series of computer simulations are required in which the substrate is annihilated in the solvent by itself and in the solvated complex. For illustration, the free energy of binding for two methane-like particles at their contact sepn. of 4 Å was computed in TIP4P water. Though several alternatives are possible, in this case, Monte Carlo simulations were employed with statistical perturbation theory in the NPT ensemble at 25° and 1 atm. The results for the free energy of binding as well as for the potential of mean force are consistent with prior findings from the integral equation theory of Pratt and Chandler.

(16)

C.A. 1988, 109, N 20

Сб Н₁₈

(Дм. 30687)

1988

Кузнецов М. А., Харин В. Е.
и др.

Ср; Изв. Вузов. Серия Мертв, 2017,
1988, № 11, 49-52.

Углеворода

1988

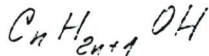
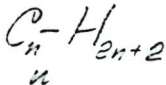
22 БЗ092. Энтальпии образования углеводов,
содержащих трехчленные циклы. Тимофеева Л. П.,
Кузнецова Т. С., Лукин К. А., Кожушков С. И.
«12 Всес. конф. по хим. термодинам. и калориметрии.
Тез. станд. докл., Горький, 13—15 сент., 1988. Ч. 1.»
Горький, 1988, 62

В прецизионном жидкостном калориметре с изотер-
мич. оболочкой измерены энергии сгорания диспиро-
[2,0,2,1]гептана, бициклопропилидена (I) и метилен-
спиропентана (II), рассчитаны энтальпии образования,
оценены и обсуждены энергии напряжения (ΔE_n).
Значения $-\Delta_c H^\circ(l)$, $\Delta_f H^\circ(l)$, $\Delta_{vap} H^\circ$, $\Delta_f H^\circ(g)$ и
 ΔE_n кДж/моль составили соотв. для: I $3791,12 \pm 2,5$,
 $286,60$, $37,66 \pm 2,1$, $324,26 \pm 3,3$ и $317,6$; II $3791,54$, $287,02$,
 $33,89 \pm 2,1$, $320,91$ и $311,3$.
А. С. Гузей

АНФ;

X. 1988, N 22

1989



Р

8 Б3141. Давление паров нормальных алканов и 1-алканолов до критической температуры. Vapour pressures up to their critical temperatures of normal alkanes and 1-alkanols: [Pap.] 4th Int. Workshop on Vapour—Liquid Equilibria in 1—Alkanol+n—Aalkane Mixt. Thessaloniki, 24—26 Oct., 1988 / Ambrose D., Walton J. //Pure and Appl. Chem.— 1989.— 61, № 8.— С. 1395—1403.— Англ.

На основе принципа соответственных состояний и различных уравнений состояния проанализированы данные по крит. параметрам орг. в-в с линейным строением. С помощью четырехпараметрич. уравнения Вагнера проведены расчеты для 20 нормальных УВ и 20 спиртов. Полученные данные табулированы.

Г. Л. Апарников

Х. 1990, № 8

СНЛ

От. 31 962

1989

(углеводороды)

Богдасарян С.С., Ара-
мян К.С.,

оценка
С и З

Изм. - Физ. м. 1989,
56, N 1, 142-143.

Темпера

● турное измерение

изохорной
жесткости
водородов.

теплоемкости и
ароматических угле-

$\text{CH}_5(\text{CH}_4)_n^+$
 $n=1-9$

(ΔH_f)

X. / 1990, N 13

DM 33 271

1989

13 Б3040. Газофазная стабильность и структура кластерных ионов $\text{CH}_5(\text{CH}_4)_n^+$ с $n=1-9$. Gas-phase stability and structure of cluster ions $\text{CH}_5^+(\text{CH}_4)_n$ with $n=1-9$ / Hiraoka K., Mori T. // Chem. Phys. Lett. 1989.— 161, № 2.— С. 111—115.— Англ.

Методом импульсной МС определены величины $-\Delta_f H^0$ ккал/моль и $-\Delta S^0$ э. е. газофазных р-ций образования кластерных ионов $\text{CH}_5^+(\text{CH}_4)_{n-1} + \text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_5(\text{CH}_4)_n$, равные соотв. при $n=1$ $6,87 \pm 0,3$ и $22,1 \pm 2$; $n=2$ $5,34 \pm 0,3$ и $24,9 \pm 2$; $n=3$ $3,14 \pm 0,2$ и $22,4 \pm 1$; $n=4$ $3,02 \pm 0,2$ и $23,7 \pm 1$; $n=5$ $2,79 \pm 0,2$ и $24,8 \pm 1$; $n=6$ $2,71 \pm 0,2$ и $25,3 \pm 1$; $n=7$ $2,67 \pm 0,2$ и $26,5 \pm 1$; $n=8$ $2,04 \pm 0,2$ и $21,6 \pm 1$; $n=9$ $1,54$ и —. Лит. значения превышают найденные величины $-\Delta H$ на $0,5-0,9$ ккал/моль. Ход зависимостей $\Delta_f H^0-n$ и $\Delta_f S^0-n$ немонотонный и указывает на изменения в структуре кластеров при $n=2-3$ и $n=7,8$. Найдено, что после образования первичной оболочки с двумя лигандами, что соответствует лит. данным, может образоваться кластер со вторичной оболочкой, содержащей до пяти CH_4 -лигандов. Ж. Г. Василенко



C-H covalent.

1989

Om 33271

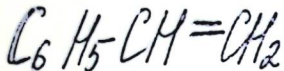
112: 43678a Gas-phase stability and structure of cluster ions
monoprotonated methane-methane ($\text{CH}_5^+(\text{CH}_4)_n$ with $n = 1-9$).
Hiraoka, Kenzō; Mori, Toshiharu (Fac. Eng., Yamanashi Univ.,
Kofu, Japan 400). *Chem. Phys. Lett.* 1989, 161(2), 111-15 (Eng).
Thermochem. data, ΔH° and ΔS° for the clustering reactions
 $\text{CH}_5^+(\text{CH}_4)_{n-1} + \text{CH}_4 = \text{CH}_5^+(\text{CH}_4)_n$, with $n = 1-9$ were measured in
an electron-beam mass spectrometer. Both $-\Delta H^\circ$ and $-\Delta S^\circ$ show
irregular decreases between $n = 2$ and 3, and 7 and 8 the latter
indicating the formation of a shell structure, $\text{CH}_5^+(\text{CH}_4)_2(\text{CH}_4)_5$.

ΔH

c.A. 1990, 112, N 6

Стирол

1989



24 Б3034 ДЕП. Химико-термодинамические функциональные зависимости реакций получения стирола / Кадыров Н. К., Махмуд-заде Р. А., Киршенбаум Д. И.; Ин-т теор. пробл. хим. технол. АН АзССР.— Баку, 1989.— 9 с.:— Библиогр.: 5 назв.— Рус.— Деп. в ВИНТИ 15.09.89, № 5921-В89

Выведены функциональные зависимости для определения изобарной теплоемкости (ΔC_p), энтропии (ΔS), свободной энергии (ΔF), хим. потенциала ($\Delta \mu^0$), в интервале т-р $T = (300-1000)$. Автореферат

G, S

х. 1989, № 24

CAHm

1989

111:241159a Systematic analysis of the physico-chemical properties of saturated hydrocarbons. Kefarov, V. V.; Dorokhov, I. N.; Vetokhin, V. N.; Volkov, L. P. (Mosk. Khim.-Tekhnol. Inst., Moscow, USSR). *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 1989, 307(5), 1144-9 [Phys. Chem.] (Russ). Relationships between the physicochem. properties of satd. hydrocarbons, expressed in terms of the basic properties (sum of at. nos., mol. wts., d., and sum of bond lengths) are discussed. Expressions are proposed and values are tabulated for a series of properties of n-alkanes, C_1 to C_{16} .

ОБЩЕКА
физ-хим
сб-б

C.A. 1989, 111, N 26

Углевородки

1989

3 Б2559. Системный анализ физико-химических свойств насыщенных углеводородов / Кафаров В. В., Дорохов И. Н., Ветохин В. Н., Волков Л. П. // Докл. АН СССР.— 1989.— 307, № 5.— С. 1144—1149.— Рус.

На основе принципов закономерности множественных взаимосвязанных функциональных изменений упорядоченных совокупностей базисных и производных св-в сложных соединений изложена методика определений значений величин базисных и производных св-в насыщенных углеводородов.

Резюме

физико-хим.
св-ва

х. 1990, №3

С20 Н42

1989

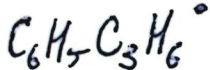
7 Б3063. Давление паров бинарных трехфазных (твердая фаза+жидкость+пар) смесей. III. Температуры плавления твердых фаз н-эйкозана. Vapour pressures of binary three-phase (solid+liquid+vapour) mixtures. III. Melting temperatures of the solid phases of n-eicosane / Książczak Andrzej // J. Chem. Thermodyn.— 1989.— 21, № 8.— С. 789—792.— Англ.

(T_m)

Статическим методом измерено давл. паров смесей н-эйкозона (I) с гексаном (II). Исходный I 99,4 мол.% чистоты был дополнительно очищен фракц. кристаллизацией. Данные по давл. паров смесей I—II в зависимости от т-ры и состава приведены в виде таблиц. Соотношение между активностью a р-рителя и т-рой трехфазных смесей I—II описывается ур-нием $(1-a) = -7621,7155 (K/T) + 24,64044$. Экстраполированные значения т. пл. α - и β -I равны $309,63 \pm 0,02$ и $309,32 \pm 0,04$ К соответственно.

Л. Г. Титов

X.1990, N 7



Кумил-ион

Kp

Х. 1990, № 9

1989

9 Б3024. Труды по структуре и реакционной способности нестабильных веществ. Стабильность α -кумил катионов в газовой фазе. Mishima Masaaki, Usui Satoshi, Inoue Hiroki, Fujio Mizue, Tsuno Yuho // Ниппон кагаку кайси = J. Chem. Soc. Jap., Chem. and Ind. Chem. — 1989. — № 8. — С. 1262—1268. — Яп.; рез. англ.

С помощью масс-спектрометра ионно-циклотронного резонанса измерены константы равновесия газофазных ионно-молек. р-ций типа $B + B_0H^+ = BH^+ + B_0$ (1), где B — молекулы 2-(м, п-замещенный фенил)пропенов, B_0 — молекулы с известной величиной энтальпии отрыва протона. При этом для каждого B эксперименты проведены с несколькими B_0 . Из полученных данных в предположении $\Delta S^\circ = 0$ рассчитаны $\Delta_r H^\circ$ (1) и ΔH отрыва протона от BH^+ . Полученные результаты по основности α -кумил катионов в газовой фазе представлены в виде линейной зависимости от параметров, характеризующих св-ва заместителя, и сопоставлены с аналогичными данными в растворах. По резюме

С-Н (углеводороды)

1989

112: 43703e Development of Benson group additivity method for estimation of ideal gas thermodynamic properties of polycyclic aromatic hydrocarbons. Moiseeva, N. F.; Dorofeeva, O. V.; Iorish, V. S. (Inst. High Temp., 127412 Moscow, USSR). *Thermochim. Acta* 1989, 153, 77-85 (Eng). The improved group additivity method was applied to the prediction of ideal gas thermodyn. properties C_p° , S° , $(G^\circ - H_0^\circ)/T$, $H^\circ - H_0^\circ$, $\Delta_f H^\circ$ and $\log K_f^\circ$ between 100 and 1500 K for polycyclic arom. hydrocarbons consisting of six-membered rings.

метод
оценки
термод. функ-
ций газоб

С.А. 1990, 112, N 6

Керосин ТС-1

1989

С-Н - соединитель

1 БЗ003 ДЕП. Таблицы рекомендуемых справочных данных. Керосин ТС-1. Термодинамические свойства в интервале температур 233—423 К, давлений 0,1—60 МПа / Мурсалов Б. А., Абдулагатов И. М., Степанов Г. В.; Всес. н.-и. центр по матер. и веществам Госстандарта СССР.— М., 1989.— 24 с.: ил.— Библиогр.: 18 назв.— Рус.— Деп. в ВНИИКИ 07.09.89, № 579-кк89

Приведены эксперим. данные по теплоемкости C_p и PVT -св-вам керосина ТС-1, полученные для обл. жидк. фазы от пограничной кривой до 50 МПа методом адиабатич. калориметрии. Приведены таблицы термодинамич. св-в керосина ТС-1 в обл. т-р 233—423 К и давл. 0,1—60 МПа. Средн. квадратич. погрешности расчетных значений термодинамич. ф-ций оценены 0,04. Таблицы аттестованы в кач-ве рекомендуемых справочных данных 26 мая 1989 г. (Протокол № 6). Автореферат

Ф;

Х. 1990, №1

C₆H

1989

спульмупа,
хуахуа
бас. косм.,
ab initio
расчет

[111: 104605c The lowest two electronic states of the hexatriynyl radical: C₆H. Pauzat, F.; Ellinger, Y. (Lab. Radioastron., ENS, F-75005 Paris, Fr.). *Astron. Astrophys.* 1989, 216(1-2), 305-9 (Eng). The structure of the lowest 2 electronic states of C₆H was detd. by ab-initio calcs. Optimizations of both geometries were performed at increasing levels of sophistication in the basis sets (3-21G, split-valence + polarization) and wavefunctions (UHF, RHF, FOCI and limited second order CI). The calcs. confirm unambiguously that C₆H has an inverted ²Π ground state with 3 electrons in the π open shell; the rotational const. B₀ = 1387.3 MHz is in remarkable agreement with the exptl. value B₀ (exp) = 1386.2 MHz. The nearby ²Σ state is estd. 0.25 eV higher with B₀ = 1380.3 MHz. The calcd. dipole moment is 5.9 Debye for the ²Π state (1.2 Debye for ³Σ) which leads to a column d. of 1 × 10¹⁴ cm⁻² in IRC + 10216 where it has been recently obsd. As a consequence of the present work, it is anticipated that all C_nH radicals with n ≥ 6 have a ²Π ground state, thus breaking the well-established ²Π-²Σ alternance with the purity of the carbon chain.

C.A. 1989, 111, N12

C-H- coequilibrium, alkene

1989

112: 85444b Enthalpies of hydrogenation of the dimethylpentenes, ethylpentenes, methylethylbutene, and trimethylbutene. Rogers, D. W.; Dejoongruang, Kosol (Chem. Dep., Long Island Univ., Brooklyn, NY 11201 USA). *J. Chem. Thermodyn.* 1989, 21(11), 1115-20 (Eng). The molar enthalpies of hydrogenation ($\Delta_{\text{hyd}}H_m^\circ$) are given for the dimethylpentenes, ethylpentenes, methylethylbutene, and trimethylbutene. Four compds. with terminal double bonds not stabilized by a Me group have a mean $\Delta_{\text{hyd}}H_m^\circ$ of -122 kJ/mol within a narrow range. Terminal double bonds stabilized by a Me or Et group in the 2-position have a mean $\Delta_{\text{hyd}}H_m^\circ = -144$ kJ/mol, while double bonds in the 2-position stabilized by one or two Me groups or an Et group α to it have $\Delta_{\text{hyd}}H_m^\circ = -103$ kJ/mol. The exceptional case is *cis*-4,4-dimethylpent-2-ene, which has $\Delta_{\text{hyd}}H_m^\circ = -130.4$ kJ/mol, due to *cis*-repulsion energy. Comparison with existing literature values is made.

(ΔH)

C.A. 1990, 112, N10

$C_6H_4(CH_3)_2$

1989

' 111: 241496g Isobaric heat capacity of p-xylene in the liquid phase. Sultanov, Ch. I.; Sambur, Kh. O.; Dzhaifarov, M. T. (Azerb. Tekhnol. Inst., Baku, USSR). *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Neft Gaz* 1989, (5), 95 (Russ). The heat capacity of liq. p-xylene was measured at 298 K satn. temp. under pressures of 5, 10, 15, 20, and 25 bar.

(Cp)

C.A. 1989, 111, N26

C-H-соединения

1990

113: 85706j Standard chemical thermodynamic properties of polycyclic aromatic hydrocarbons and their isomer groups. III. Naphthocoronene series, ovalene series, and first members of some higher series. Alberty, Robert A.; Chung, Michael B.; Reif, Andrea K. (Dep. Chem., Massachusetts Inst. Technol., Cambridge, MA 02319 USA). *J. Phys. Chem. Ref. Data* 1990, 19(2), 349-70 (Eng). Thermodyn. properties were calcd. for the 1st 2 isomer groups in the naphthocoronene series, the 1st 2 isomer groups in the ovalene series, and the 1st members of some higher series. Successive isomer groups in each series differ by C_4H_2 . The properties of individual species are estd. by using Benson group values of Stein and Fahr for temps. from 298.15 to 3000 K. Values of heat capacity, entropy, heat and free energy of formation (C_p° , S° , $\Delta_f H^\circ$, and $\Delta_f G^\circ$) for a std. state pressure of 1 bar are given for isomer groups and for individual species. The isomer group values provide a basis for extrapolating to higher C nos. where it is not feasible to consider sep. compds.

ΔH_f° ;

① ☒

C. A. 1990, 113, N870

Термодинамические
свойства, оверка ΔH_f°

Углеводороды

1990

3 И210. Стандартные химические термодинамические свойства полициклических ароматических углеводородов и их изомерных групп. 3. Ряды нафтокоронена, ряды овалена и первые члены некоторых более высоких рядов. Standard chemical thermodynamic properties of polycyclic aromatic hydrocarbons and their isomer groups. 3. Naphthocoronene series, ovalene series, and first members of some higher series / Alberty R. A., Chung M. B., Reif A. K. // J. Phys. and Chem. Ref. Data.— 1990.— 19, № 2.— С. 349—370.— Англ.

Продолжение таблицы термодинамич. свойств полициклич. ароматич. углеводородов, две первые части которой уже опубликованы авторами (// J. Phys. Chem. Ref. Data.— 1988.— 17.— С. 241 и // J. Phys. Chem. Ref. Data.— 1989.— 18.— С. 77. Приведены стандартные теплоемкости, энтропии, энтальпии для новых рядов соединений. Представлены энтальпии и энергии Гиббса образования этих соединений. Библ. 34. О. П. И.

ф. 1991, № 3

C-H связывание

1990

24 Б3033. Определение энтропий и энтальпий плавления углеводородов. Estimating entropies and enthalpies of fusion of hydrocarbons / Chickos J. S., Hesse D. G., Liebman J. F. // J. Org. Chem.— 1990.— 55, № 12.— С. 3833—3840.— Англ.

Методом ДСК определены энтальпии плавления циклотетрадекана и циклотетрадекалина, составившие $6,86 \pm 0,08$ и $5,40 \pm 0,26$ ккал/моль. На основе эксперим. лит. значений величин $\Delta_{fus}H$ для 191 УВ найдены величины групповых вкладов в величину $\Delta_{fus}H$ для групп различного строения и окружения. Подробно описана техника расчета $\Delta_{fus}H$ по табулированным значениям инкрементов, рассчитанные значения сравнены с эксперим. и вычисленными лит. данными. Средн. отклонения расчетных величин от эксперим. значения для $\Delta_{fus}H$ и $\Delta_{fus}S$ составили $\pm 0,56$ ккал/моль и $\pm 1,85$ кал/моль·К. Обсуждено изменение расхождений между эксперим. лит. данными и рассчитанными значениями с ростом температуры. Ж. Г. Василенко

$\Delta Sm,$
 ΔKm

X. 1990, № 24

C₁₀H₂₀

1990

10 БЗ028. Термодинамический расчет равновесного состава н-деценов, образующихся при дегидрировании н-декана / Елисеев Н. А., Баркова А. П., Стерлигов О. Д., Исагулянц Г. В. // Изв. вузов. Химия и хим. технол.— 1990.— 33, № 10.— С. 19—22.— Рус.

В интервале т-р 600—900 К и давл. 0,01—0,5 МПа проведен расчет равновесного состава н-моноолефинов, образующихся при дегидрировании н-декана (I) для мольных разбавлений (ρ) I инертным газом или H₂ равных 0—8. Для расчета констант равновесий р-ций дегидрирования I до н-деценов -1, -2, -3, -4, -5 (соотв. II—VI) с учетом цис- и транс-изомеров III—VI использованы лит. значения C_p и $\Delta_f H$ I, II и H₂, для остальных в-в эти величины рассчитаны по методу Бенсона. Табулирован равновесный выход II—VI в изученных условиях с шагом т-р 100°. В равновесной смеси мень-

(Kp)

Х. 1991, № 10

ше всего II (до 1,8%), кол-ва III—V мало отличаются друг от друга, VI в смеси вдвое меньше, чем каждого из III—V; общий выход не более 48,7%. Проведена эксперим. проверка расчетных данных дегидрированием I в присутствии модифицир. алюмоплатинового катализатора при 753 К, парц. давл. H_2 0,01 МПа и $\rho=8$. Равновесные содержания II—VI составило соотв. 4; 29; 29; 27; 15%. Соотношение цис- и транс-изомеров 43 : 57%.

Ж. Г. Василенко

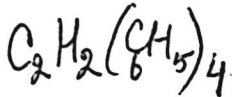
C-H-cyclohexane

1990

(H_T-H₀)

112: 166359e Enthalpies for ethylbenzene, isooctane and ethylcyclohexane in the fluid state. Johnson, Mark G.; Sato, Haruki; Williamson, Arthur G.; Eubank, Philip T. (Dep. Chem. Eng., Texas A and M Univ., College Station, TX 77843 USA). *J. Chem. Eng. Data* 1990, 35(2), 101-7 (Eng). A flow calorimeter was used to measure the enthalpies of ethylbenzene (349-551 K, 1.5-200 bar), isooctane (358-520 K, 20-100 bar), and ethylcyclohexane (335-576 K, 20-100 bar). The measurements are accurate to $\pm 0.25\%$ in enthalpy and $\pm 2\%$ in heat capacity. Literature vapor pressures, heats of vaporization, and perfect gas state enthalpies, consistent with the present hydrocarbon enthalpies, are used with the results to provide pressure/enthalpy diagrams for both the liq. and vapor states.

C.A. 1990, 112, N18



1990

13 Б3026. Термическая стабильность и энтальпия образования 1,1,2,2,- и 1,1,1,2-тетрафенилэтана. Энергия стабилизации бензгидрил- и трифенилметил-радикалов. Thermische Stabilität und Bildungsenthalpie von 1,1,2,2- und 1,1,1,2-Tetraphenylethan. — Die Stabilisierungsenergien von Benzhydryl- und Triphenylmethyl-Radikalen / Beckhaus H.-D., Dogan B., Schetazer J., Hellmann S., Rüchardt C. // Chem. Ber.— 1990.— 123, № 1.— С. 137—144.— Нем.; рез. англ.

В калориметре сжигания определены величины ΔH° ккал/моль 1,1,2,2-тетрафенилэтана (I) и 1,1,1,2-тетрафенилэтана (II), составившие при 298 К соотв. $3249,5 \pm 0,8$ и $3252,0 \pm 0,6$. Из измерений давл. пара найдены значения $\Delta_{\text{subl}} H^\circ$, равные для I 32,3, для II 31,7 ккал/моль. Методом ГХ изучена кинетика р-ций термолиза I в р-ре тетралин/тиофенол и II в р-ре мезителен/тиофенол. Выше 200°С эти процессы являются

X. 1990, N 13

р-циями 1-го порядка. Параметры активации $\Delta H^\ddagger$ ккал/моль и $\Delta S^\ddagger$ э. е. составили соотв. для термолиза I 47,3 и 12,8; для II 45,0 и 14,0. Из полученных термодинамич. и кинетич. данных и лит. термохимич. данных для парафиновых аналогов I и II получены величины энергий стабилизации (резонансной энергии) дифенилметил- и трифенилметил-радикалов равные соотв. $12,9 \pm 0,9$ и $20,0 \pm 1,7$ ккал/моль. Стабилизирующее влияние Ph-групп уменьшается с ростом их кол-ва в радикале, что связано со стерич. отталкиванием и стерич. ингибированием резонанса. Ж. Г. Василенко

C₇H₁₂

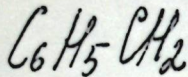
1990

) 2 Б3124. Фазовые переходы в твердом циклогептене. Phase transitions in solid cycloheptene / Haines J., Gilson D. F. R. // Can. J. Chem.— 1990.— 68, № 4.— С. 604—611.— Англ.; рез. фр.

В диапазоне т-р 47—220 К методами ДСК, ИК- и КР-спектроскопии и измерением протонной спин-решеточной релаксации исследовано фазовое поведение циклогептена. При 154 К отмечен фазовый переход (ФП) III—II, при 210 К наблюдается ФП II—I и при 217 К фаза I плавится, $\Delta_{\text{trs}}H=5,28, 0,71$ и $0,97$ кДж/моль и $\Delta_{\text{trs}}S=34,3, 3,4$ и $4,5$ Дж/К·моль соотв. Обратные ФП идут при 201—203, 199—195 и 129 К, причем ФП II—III необратим. Из спектроскопич. данных следует, что фазы I и II сильно разупорядочены. Кольцевая инверсионная мода зависит от фазового состояния, и до ФП III—II проявляет св-ва мягкой моды. В III вибрац. полосы узкие, в элементарной ячейке 2 молекулы, симметрия C₂ или C₅. Спектры II и I подобны спектрам фаз стекла. Энергетич. барьер переориентации составляет 9,0 в I и II и 15,4 кДж/моль в III. Резюме

(T_{tr} , ΔH_{tr})

X.1991, N 2



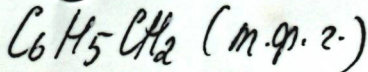
1990

21 Б3049. Термодинамические свойства радикалов бензила: энтальпия образования из толуола, бензил-иодида и равновесие диссоциации дибензила. Thermodynamic properties of benzyl radicals: enthalpy of formation from toluene, benzyl iodide, and dibenzyl dissociation equilibria / Hippler H., Troe J. // J. Phys. Chem.—1990.— 94, № 9.— С. 3803—3806.— Англ.

На основе найденных ранее собственных и лит. эксперим. значений констант скоростей прямых и обратных р-ций в процессах толуол (I) = бензил (II) + H (1), бензилиодид (III) = II + I (2), дибензил (IV) = 2 II (3), I + I = II + HI найдены константы равновесия (K) р-ций (1) — (3). С использованием экспоненциальных уравнений зависимости K рассчитано и рекомендовано значение $\Delta_f H_0^\circ(II) = 229$ кДж/моль. В интервале т-р 0—3000 К рассчитаны термодинамич. функции C_p , S_0° Дж/моль·К, $H_T^\circ - H_{298}^\circ$, $\Delta_f H_T^\circ$ и $\Delta_f G_T^\circ$ кДж/моль II в состоянии идеального газа, составившие при 100 К

$$\Delta H_f, \text{ м.ф.г.}$$

Х. 1990, № 21



44,56, 245,3, $-14,90$; 221,1 и 233,0; при 298 К 74,81; 321,1; 0,00, $210,5 \pm 4$; 263,0; 1000 К 251,7, 540,7, 137,4, 192,9, 405,1; 3000 К 318,7, 861,9, 733,7, 211,5, 822,0 соотв. Найденное значение $\Delta_f H_{298}^\circ$ II выше лит. значения. Критически оценены также величины энергий связи II с H, с Me, с II. Рекомендованные величины $\Delta_f H_{298}^\circ$ процессов (1) — (3) и этилбензол = II + Me равны соотв. 378,4; 190,0; 277,2; 328,8 кДж/моль. Ж. Г. Василенко



C-H
(алканы)

1990

112: 241314s Thermodynamic properties of small normal alkanes from an interaction-site model. Kvamme, Bjoern; Hertzberg, Terje (Sivilingeniørutdanningen Telemark, 3900 Porsgrunn, Norway). *Fluid Phase Equilib.* 1990, 55(1-2), 87-107 (Eng). Thermodyn. properties of ethane, propane, butane and pentane are calcd. by using interaction-site model and the high temp. approxn. to the exact expansion of Helmholtz free energy. The models are predictive in the dense liq. region with basically a single adjustable parameter fixed against a single exptl. point. Theor. limitations of the theory are discussed and a possible improvement in the calcn. of contact values for hard homonuclear diatomics is suggested.

метод
оценки
терм. св-в

С.А. 1990, 112, N 26

Удвоение

1990

15 Б3018. Теплоемкости пент-1-ена (от 10 до 320 K); цис-гекс-2-ена (от 10 до 330 K), нон-1-ена (от 10 до 400 K) и гексадец-1-ена (от 10 до 400 K). Heat capacities of pen-1-ene (10 K to 320 K), cis-hex-2-ene (10 K to 330 K), non-1-ene (10 K to 400 K), and hexadec-1-ene (10 K to 400 K) / Messerly J. F., Todd S. S., Finke H. L., Let-Bechtold S. H., Guthrie G. B., Steele W. V., Chirico R. D. // J. Chem. thermodyn.— 1990.— 22, № 11. — С. 1107—1128.— Англ.

(P)
В адиабатич. калориметре измерены теплоемкости в указанных ниже т-рых интервалах для пент-1-ена (I) (10—320 K), цис-гекс-2-ена (II) (10—320 K), нон-1-ена (III) (10—400 K) и гексадец-1-ена (IV) (10—400 K). Значения C_p ниже эксперим. т-р найдены по ур-нию Дебая. Табулированы эксперим. значения и сглаженные величины C_p/R , $[S^0(T) - S^0(0)]/R$ и $[H^0(T) -$

X. 1991, N 15

$-H^0(0)]/RT$ в изученных T -рых интервалах с шагом 5—10 К, составившие при 298,15 К для жидк. I 18,627; 31,583 и 14,618; II 21,452; 36,103 и 17,179; III 32,517; 47,212 и 26,155; IV 58,432; 73,832 и 45,488; $R = 8,31451$ Дж/моль·К. Ниже указаны рассмотренные фазовые переходы, значения T_{tr} и $\Delta_{tr}H/R \cdot K$ I $s \rightarrow l$ 108,016 К и 714,1; $s(\text{метастаб}) \rightarrow l$ 107,797 и 707,4; II $s \rightarrow l$ 132,030 К и 1067,8; III крист. фаза $1 \rightarrow l$ 191,912 К 2328,3; крист. фаза $2 \rightarrow l$ 191,604 К и 2401,8; IV крист. фаза $3 \rightarrow$ крист. фаза 2 217,7 К и 0,0; крист. фаза $2 \rightarrow$ крист. фаза 1 249,2 К и 465,4; крист. фаза $1 \rightarrow l$ 277,396 К и 3620,1. Полученные результаты сопоставлены с лит. данными.

Ж. Г. Василенко

Углеводороды

1990

18 Б3020 ДЕП. Метод расчета температурной зависимости изобарной теплоемкости индивидуальных углеводородов и производных предельных углеводородов / Мухамедзянов Г. Х., Зарипов З. И.; Казан. хим.-технол. ин-т.— Казань, 1990.— 5 с.: ил.— Библиогр.: 8 назв.— Рус.— Деп. в ОНИИТЭХИМ г. Черкассы 21.05.90, № 393—хп90

Предложено уравнение для описания температурной зависимости C_p жидк. УВ ($n \geq 6$) в зависимости от молек. и структурных х-к:

$$C_{p_2} = (R/R^*)^{1/6} (\rho/\rho^*)^{1/2} [C_0 + (6.29 + 0.01 \cdot n) R_0/M] \times \\ \times \exp A(T - 298) \sqrt{TR_D/M^{1.3}}, \quad (1)$$

(где R/R^* , ρ/ρ^* — соответственно отношения средн. межмолек. расстояний и плотностей в-в нормального и изостроения с одинаковым числом атомов углерода в

х. 1990, № 18

молекуле; C_0 , A — постоянные гомологич. ряда, R_D — молек. рефракция, M — молекулярная масса, n — число атомов C в молекуле. Погрешность расчета не более 2%. На примере изоалканов рассмотрена связь A со структурой молекулы и типом углеводородной связи для $n \geq 7$. По методу Татевского определены составляющие A_{ij} различных углеродных связей. Автореферат



1990

Парафин

 $C_n H_{2n+2}$ $n=22, 24, \dots$ (T_{t2})

X. 1991, № 10

10 Б3095. Структурные изменения в кристаллических парафинах с четными номерами при температурах ниже их точки плавления. Structural changes in even-numbered crystalline paraffins at temperatures below their melting point / Royaud I. A. M., Hendra P. J., Maddams W., Passingham C., Willis H. A. // J. Mol. Struct.— 1990.— 239.— С. 83—102.— Англ.

В диапазоне т-р от комн. до т. пл. методами ДСК и низкочастотной спектроскопии КР исследовано фазовое поведение парафинов $C_n H_{2n+2}$ с $n=22, 24, 26, 28, 30, 32, 34$ и 36 . С ростом n в спектрах КР дублет продольной акустич. моды линейно уменьшается, проведение поперечных акустич. мод более сложное. При т-рах непосредственно ниже т. пл. парафины существуют в фазе ротатора, субъячейка к-рой содержит только одну молекулу на элементарную ячейку. В фазе ротатора поперечные акустич. моды исчезают, один из двух пиков продольной акустич. моды сохраняется, слегка сдвигаясь к низким частотам (не более 2 см^{-1}), сам пик уширяется. Наблюдаемые фазовые превращения

парафинов зависят от термич. истории образца в про-
цессе его кристаллизации. В. А. Ступников



C₃H₇C₆H₅

1990

13 Б3044. Термодинамический анализ превращений изопропилбензола в присутствии водорода / Сафонов В. С., Кондратьев О. И., Богомолова Г. Я., Смирнов Б. Ю. // Нефтехимия.— 1990.— 30, № 1.— С. 18—21.— Рус.

Приведены результаты термодинамич. анализа процесса дегидрирования изопропилбензола в условиях разбавления сырья водородом 0—10 моль/моль при соотношении водяной пар : изопропилбензол 20 моль/моль в интервале т-р 700—1000 К. Оптимальные условия проведения процесса — т-ра выше 820 К, соотношение водород : изопропилбензол 1 : 1.

Резюме

(Кр)

X. 1990, N 13.

Низкие
температуры

1990

3 БЗ013. Межмолекулярное взаимодействие и конформационные превращения в жидких углеводородах / Сперкач В. С., Гуца Т. О., Руденко А. П. // Спектроскопия немет. кристаллов.— Киев, 1990.— С. 148—152.— Рус.

Из частотных зависимостей скорости распространения и коэф. поглощения звука в интервале t -р 150—360 К определены миним. времена релаксации конформац. переходов и слабых межмолек. взаимодействий в жидк. n -алканах (C_5 — C_{15}), толуоле, o - и p -фтортолуолах (I, II), трифтортолуоле (III), октафтортолуоле, p - и m -ксилолах (IV, V) и мезитиле (VI). Показано, что в I—VI поворотно-изомерная релаксация не может быть зафиксирована вследствие малости эксперим. значений. На основе полученных эксперим. величин найдены значения ΔH и ΔS поворотно-изомерной релаксации (транс—транс и транс—гош) в C_5H_{12} , равные 2,9 кДж/моль и 17,3 Дж/моль·К. Для алканов или толуола время жизни межмолек. связи $CN...C$ оценивается как 10^{-10} — 10^{-11} с, ΔH разрыва этой связи 4—5 кДж/моль.

Ж. Г. Василенко

X. 1991, N.3

C₁₇H₃₆

1990

14 Б3027. Влияние веса образца на микро-ДСК измерения гептакозана. Effect of sample weight on micro DSC measurements of heptacosane / Takamizawa K., Urabe Y. // Chem. Lett.— 1990.— № 1.— С. 63—66.— Англ.

Энтальпия плавления гептакозана (I) определена методом ДСК с использованием малых навесок ~0,01 мг. I получена кристаллизацией из разбавленного р-ра в гексане. Установлено влияние массы I на измеренные T -ры и $\Delta_{trs}H$ фазовых переходов и плавления I. Суммарная энтальпия фазовых переходов остается постоянной, однако ошибка резко возрастает при очень малых навесках. Фазовые переходы установлены при 324,4 и 326,5 К, $T_{пл}$ равна 332,0 К. Л. А. Резницкий

$\Delta H_m, T_{t2},$
 T_m

х. 1990, N 14

$C_n H_{2n+2}$
парафины $\equiv$
алканы

$C-H-O$
(кислоты)
 ΔH_m

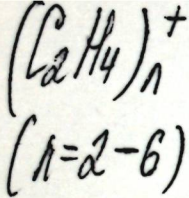
X. 1990, N 16

1990

16 БЗ023 ДЕП. О трансферабельности структурных инкрементов энтальпии плавления парафинов и монокарбоновых кислот нормального строения / Прорвин А. И., Романова Л. М.; Кузбасск. политехн. ин-т.— Кемерово, 1990.— 14 с.— Библиогр.: 11 назв.— Рус.— Деп. в ВИНТИ 07.05.90, № 2415-B90

Для гомологич. рядов парафинов и монокарбоновых к-т нормального строения показано, что эксперим. данные по энтальпии плавления со средн. погрешностью 2,6% можно описать ур-ниями: $H = \beta N - H_0$ для четных N , $H = \beta(N-1) - H_0$ для нечетных N и $H = 0,5(2\beta N - H_0)$ для четных N , $H = 0,5[\beta(2N-1) - H_0]$ для нечетных N , соотв., для парафинов и монокарбоновых к-т (N — число атомов углерода в молекуле n -парафина либо — число атомов углерода в алкильном радикале молекулы к-ты). Константы $\beta = 972$ кал/моль и $H_0 = 2807$ кал/моль для двух гомологич. рядов одинаковы, что, по мнению авторов, указывает на трансферабельность структурных инкрементов энтальпии плавления.

Автореферат

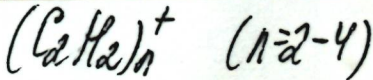


1990

3 ИЗО. Изучение кластеров этилена и ацетиленов методом фотоионизационной спектроскопии: диссипация внутрикластерной избыточной энергии. Photoionization mass spectroscopic studies of ethylene and acetylene clusters: intracuster excess tnergy dissipation / Shinohara Hisanori, Sato Hiroyasu, Washida Nobuaki // J. Phys. Chem.— 1990.— 94, № 17.— С. 6718—6723.— Англ.

С использованием масс-спектрометрич. методики исследовано эффективное образование неразрушенных ионных кластеров этилена, $(C_2H_4)_n^+$ ($n=2-6$), и ацетилена, $(C_2H_2)_n^+$ ($n=2-4$), при фотоионизации вблизи порога исходных нейтральных кластеров этих молекул с аргоном $(Ar)_n(C_2H_4)_m$ и $(Ar)_n(C_2H_2)_m$ с помощью квантов с энергией 11,83 и 11,62 эВ соответственно. Отмечено, что ранее не сообщалось об образовании таких неразрушенных стабильных (по крайней

ф. 1991, № 3



мере в интервале десятков микросекунд) кластерных ионов в обычных ионномолекулярных реакциях этилена и ацетилена. Обсуждается механизм диссипации избыточной энергии в ионизованных исходных кластерах и их распада на атомы аргона и наблюдаемые ионные кластеры этилена и ацетилена. Приведены доказательства существования некоторых особо стабильных ионных кластеров этилена и ацетилена. Библ. 29.
Б. И. А.



$C_n H_{2n+2}$

1990

$C_n H_{2n+1} OH$

11 Б3025. Корреляция данных по теплоемкостям жидких n -алканов и 1-алканолов. Heat capacities of liquid n -alkanes and 1-alkanols data correlation / Zábran-ský M., Rožička V., Majer Vladimír // Sb. VŠCHT Pra-ze. N.— 1990.— 10, С. 1.— С. 55—68.— Англ.; рез. чеш.

Критически рассмотрены лит. данные по теплоемкостям жидк. n -алканов ($C_4—C_{16}$) и 1-алканолов ($C_1—C_{10}$). Т-рные зависимости теплоемкостей при давл. насыщенного пара $C_{p, sat}$ описаны тремя корреляц. ур-ниями $C_{p, sat} = \sum A_j (T/100)^j$, где $j=1—8$ (1); $C_{p, sat}/R = A_0/t + \sum A_{j+1} \cdot t^j$, $j \leq 5$ (2); $C_{p, sat} = A_0 (1-T_r)^{-1/3} \exp(A_1 T_r)$ (3). Здесь A_j — корреляц. коэф., $t=1-T_r$, $T_r=T/T_c$. Наименьшее отклонение от эксперим. лит. данных в широком интервале т-р до T_c дают ур-ния типа (1). Ур-ние (2) хорошо описывает данные при высоких т-рах, а ур-ние (3) используется для экстраполяции вдали от т-р, для к-рых имеются лит. данные. Рассмотрена так-

C_p

Х. 1991, № 11

же температурная зависимость вкладов отдельных групп $C_{p, sat}^m$ в величину $C_{p, sat}$ в соответствии со схемой Бенсона и Луриа. $C_{p, sat}^m$ представлены уравнением $C_{p, sat}^m = A_0 + A_1 \cdot T/100 + A_2 (T/100)^2$ (Дж·моль·К). Значения коэф. A_0 , A_1 и A_2 составили для инкрементов групп $C-(C)(H)_3$ 45,8; -15,2 и 4,25; $C-(C)_2(H)_2$ 20,0; 3; 55 и -0,071; $C-(H)_2(C)(O)$ 37,1; -11,7 и 7,55; $O-(H)(C)$ 53,8; -33,4 и 5,87. Ж. Г. Василенко

1990

См Ненте
парафины ≡
алканы

T_m

Х. 1991, №4

4 БЗ021. Температуры плавления сверхдлинных парафинов и их гомологов. The melting points of ultralong paraffins and their homologues / Somayajulu G. R. // Int. J. Thermophys.— 1990.— 11, № 3.— С. 555—572.— Англ.

Проведено сравнение лит. эксперим. данных по величинам т. пл. парафинов с большой длиной цепи и величин т. пл., рассчитанных по ур-нию $(T_{fus}^{\infty} - T_{fus}) = a - b \cdot n^{1/25}$ (1), где a и b — константы, равные 24,71207 и 17,79905, T_{fus}^{∞} — т. пл. парафина с бесконечно большой длиной цепи, n — кол-во атомов С в молекуле данного парафина. Показано, что T_{fus}^{∞} равно 416,6 К при $n > 1\,000\,000$. Ур-ние (1) справедливо при $n > 31$. Аналогичный анализ проделан для циклоалканов, алкилциклопентанов, замещенных 1-алканов (заместители F, Cl, Br, I, OH, SH=O, =S, NH₂, CN), а также высших простых эфиров, ди- и три-алкиламинов. Лит. значения т. пл. для этих классов соединений имеются при n , равном 15—30. Коэф. a и b ур-ния (1) для всех рассмотренных случаев табулированы.

Ж. Г. Василенко

Узлевогородк

1990

(аллотропные
форы) Usenbaev K.,

(4)

Izv. Akad. Nauk Kirg.
SSR, Khim - Tekhnol.
Biol. Nauki 1990, (4),
17-22

Смесь угле-
водородов

1990

11 Б3016. Экспериментальное определение теплоемкостей смесей углеводородов под давлением. Determination experimentale des capacites calorifiques de melanges hydrocarbones sous pression / Vidal J., Barreau A., Janneteau P. // Calorim. et anal. therm. Vol. 20—21. 21 émes Jpurnées Assoc. fr. calorim. et anal. therm. (AFCAT), Clermont—Ferrand, 14—17 mai, 1990.— [Clermont—Ferrand], 1990.— С. 459—466.— Фр.

Описан сконструированный прибор для определения теплоемкостей C_p газов под давлением. В интервале т-р 57—140°С под давл. 80 бар определены величины C_p метана, значения к-рых отклоняются от табличных лит. величин на 2,2%. Найденные величины C_p смеси $\text{CH}_4\text{—C}_2\text{H}_6$, имеющей мол. соотношение компонентов 0,8933—0,1067 под давл. 100 бар составили при т-рах средн. 57,3°С 55,2; 81,0°С 53,8; 99,8°С 52,9; 120,5°С 53,9 и 140,3°С 54,0 Дж/моль·К. Макс. отклонение полученных эксперим. величин от расчетных 0,87%.

Ж. Г. Василенко

(Ср)

Х. 1992, № 11

Теплопроводность
углеводородов

1991

1 Б2469. Новая корреляция для расчета теплопроводности жидких алифатических углеводородов / Agi-
koI M., Gürbüz H., Bilge D. // Turk. Kim. Derg.— 1991.
— 13, № 1.— С. 98—110.— Тур.; рез. англ.

На основе принципа соответственных состояний, модели плотного флюида Ван-дер-Ваальса и теории жестких сфер Энскога развито новое эмпирич. корреляц. уравнение для расчета теплопроводности жидк. алифатич. УВ. Исходными данными являются только крит. св-ва и нормальная т. кип. данного в-ва. Предложенная корреляция проверена на 58 различных алифатич. УВ в интервале приведенных т-р от 0,3 до 0,8 при атмосферном давл. Среднее абс. отклонение расчета от эксперимента составляло $\pm 2,1\%$.

В. Ф. Байбуз

X. 1992, № 1

C18 H2n+2

1991

Barbillon P., Schuffene-
cker L., et al.,

H-Ho, G.
(260-340K)

J. Chim. Phys. Phys.-Chim.
Biol. 1991, 88 (1), 91-113

(all. C18 H38; I)

Алканы

1991

11 И231. Термодинамические параметры нормальных алканов с числом углеродных атомов от 5 до 100 / Болотин Н. К., Шеломенцев А. М. // Физ. жидк. состояния.— 1991.— № 19.— С. 75—79

На основе новых эксперим. данных получены зависимости нормальной т-ры кипения, критич. т-ры и давления, а также термодинамич. фактора корреляции для нормальных алканов с числом углеродных атомов от пяти до ста. Проведены сопоставления полученных параметров с эксперим. данными.

Резюме

(Тв)

ср. 1991, № 11

Ароматические
углеводороды

1991

117: 15250q Enthalpy and Gibbs free energy of hydration of aromatic hydrocarbons and their halogenated derivatives. Borisover, M. D.; Baitalov, F. D.; Solomonov, B. N. (Kazan. Gos. Univ., Kazan, USSR). *Zh. Obshch. Khim.* 1991, 61(12), 2629-38 (Russ). Soly. and heats of soln. in water were detd. exptl. for a series of arom. compds. and the values of their heats and free energies of hydration were calcd. The free energy values correlate linearly with the mol. refraction of theses compds.

($H_T - H, \Delta G$)

C.A. 1992, 117, N2

1991

n -алканы
 $C_n H_{2n+2}$
 $n = 16 - 28$

$(T_z, T_m, \Delta H_m)$

7 E720. Фазовые превращения n -алканов с четным числом атомов углерода $C_n H_{2n+2, n=16-28}$. Исследование методами дифференциальной калориметрии и термооптического анализа. Влияние дейтерирования. Transitions de phase dans les n -alcanes pairs $C_n H_{2n+2, n=16-28}$. Caracterisation par A.C.D. et A.T.O. effet de la deuteration / Claudy P., Létoffé J. M. // JCAT 91: 22 èmes journées calorim. et anal. therm., Paris, 27—29 mai, 1991 / Assoc. Fr. calorim. et anal. therm. (AFCAT).— Marseille, 1991.— С. 281—290.— Фр.

Обзор. Изложено состояние проблемы фазовых превращений в алканах с четным и нечетным числом атомов углерода при $n=16-28$. Определены T_{trs} , K , $\Delta_{trs} H$, Дж/моль, T_{fus} , K и $\Delta_{fus} H$, Дж/моль для $C_{22}H_{46}$ 315,5; 28 605; 316,8 и 47 801; $C_{24}H_{50}$ 321,0, 29,155; 323,8 и 54 370; $C_{26}H_{54}$ 325,8, 32 820; 329,6 и 59 790; $C_{28}H_{58}$ 330,7, 33 675; 334,7 и 63 385. При $n=22$ и 24 алканы претерпевают превращение β -трикл. $\rightarrow \alpha$ —

ф. 1992, N 7

гексаг. а при $n=26$ и 28 β -монокл. $\rightarrow$ α -гексаг. Уста-
 новлена T_{fus} $C_{16}H_{34}$ $292,1$ К, $\Delta_{fus} H = 47\,545$ Дж/моль
 β - $C_{18}H_{38}$ $T_{fus} = 300,7$ К, $\Delta_{fus} H = 60\,670$ Дж/моль;
 β - $C_{20}H_{42}$ $T_{fus} = 310,0$ К, $\Delta_{fus} H = 66\,935$ Дж/моль. Уста-
 новлено образование новой метастабильной γ -фазы
 для алканов с $n=18-20$ при быстрой кристаллизации
 γ - $C_{18}H_{38}$ с $\Delta_{fus} H = 46\,170$ Дж/моль, γ - $C_{20}H_{42}$ с $T_{fus} =$
 $= 309,2$ К и $\Delta_{fus} H = 46\,170$ Дж/моль, а также $\Delta_{trs} H$
 γ - $C_{18}H_{34} \rightarrow \beta$ $19\,850$ Дж/моль и γ - $C_{20}H_{42} \rightarrow \beta$
 $18\,395$ Дж/моль. Для дейтерированных алканов
 $C_{16}D_{34} - \beta \rightarrow$ жидк. $T_{fus} = 288,9$ К, $\Delta_{fus} H = 52\,860$ Дж/
 /моль, $C_{24}D_{50}$ $T_{trs} = 318,7$ К, $\Delta_{trs} H = 20\,590$ Дж/моль,
 $T_{fus} = 319,4$ К и $\Delta_{fus} H = 49\,855$ Дж/моль, $C_{20}D_{42} - \beta \rightarrow$
 жидк. $T = 306,4$ К, $\Delta_{fus} H = 76\,850$ Дж/моль, $\gamma \rightarrow$ жидк.,
 $T_{fus} = 305,3$ и $\Delta_{fus} H = 51\,420$ Дж/Моль, $\gamma \rightarrow \beta$ Δ_{trs}
 $H = 25\,430$ Дж/моль.



C₂₂H₄₆

1991

21 Б3016. Энтальпии плавления и полиморфных превращений парафинов C₂₂H₄₆, C₂₄H₅₀, C₂₆H₅₄ и C₂₈H₅₈. Enthalpies of fusion and solid-solid transition of even-numbered paraffins C₂₂H₄₆, C₂₄H₅₀, C₂₆H₅₄ and C₂₈H₅₈ / Domańska U., Wyrzykowska-Stankiewicz D. // Thermochim. acta.— 1991.— 179.— С. 265—271.— Англ.

Теплоемкость C_p , энтальпии и т-ры плавления и полиморфных превращений парафинов C₂₂H₄₆ (I), C₂₄H₅₀ (II), C₂₆H₅₄ (III) и C₂₈H₅₈ (IV) определены методом ДСК. Особенностью парафинов является переход из упорядоченной крист. фазы в неупорядоченную при т-рах на неск. град. ниже T_{fus} . Парафины с $n < 26$ кристаллизуются в трикл. сингонии, с $n > 26$ в монокл. сингонии. $\Delta_{fus}H$ определены при скорости нагревания 1 град/мин. Далее приведены T_{trs} , K, $\Delta_{trs}H$ кДж/моль, T_{fus} , K, $\Delta_{fus}H$ кДж/моль, $\Sigma(\Delta_{trs}H + \Delta_{fus}H)$ кДж/моль и разность ΔC_p Дж/моль·K жидк. и тв. фаз. I 314,45; 36,35; 315,20; 39,76; 76,14 и 58,50; II 318,90; 27,68; 323,65; 57,31; 84,99 и 66,50; III 324,40, 30,36, 329,18, 63,92, 94,28 и 78,30; IV 330,40, 33,66, 333,98, 66,52, 100,18 и 118,90. Σ возрастает линейно с увеличением n в согласии с лит. данными. Л. А. Резницкий

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

☒ (43)

X. 1991, №21

$C_{22}H_{46}$

1991

) 11 E513. Энтальпии плавления и превращения в твердом состоянии четных парафинов $C_{22}H_{46}$, $C_{24}H_{50}$, $C_{26}H_{54}$ и $C_{28}H_{58}$. Enthalpies of fusion and solid-solid transition of even-numbered paraffins $C_{22}H_{46}$, $C_{24}H_{50}$, $C_{26}H_{54}$ and $C_{28}H_{58}$ / Domańska U., Wyrzykowska-Stankiewicz D. // Thermochim. acta.— 1991.— 179.— С. 265—271.— Англ.

Методом ДСК измерены энтальпии и т-ры пл. некоторых неразветвленных углеводородов. Из эксперим. результатов найдена разность теплоемкостей жидкой и твердой фаз при т-ре пл., т-ры и энтальпии превращений в твердом состоянии. Установлено, что сумма энтальпий плавления и превращения в твердом состоянии является линейной ф-цией числа атомов С в углеводороде. Библ. 20. А. И. З.

$T_m, \Delta H_m$

(43)

ф. 1991, N 11

C₂₆H₅₄ Domariska U., 1991
Wyżzykowska-Stankiewicz A.

C_p, T_{tr}, T_m, Thermochim. acta 1991.
ΔH_m, ΔH_{tr}. 179, c. 265-271.

(ser. ● C₂₂H₄₆; I)

$C_{28}H_{58}$ Domańska U., 1991
Wyżukowska-Słankiewicz D.

$C_p, T_r, T_m,$ Thermochim. Acta 1991.
 $\Delta H_m, \Delta H_r$ 179, c. 265-271.

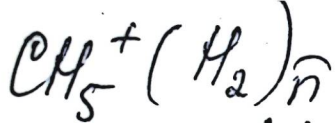
(cer. $C_{22}H_{46}$; I)

C₂₄H₅₀ Domańska U., 1991
Wyrzykowska-Stankiewicz D.

$C_p, T_{tr}, T_m,$
 $\Delta H_m, \Delta H_{tr}.$

Thermochim. ~~acta~~
1991. 179, c. 265-271.

(C_{cr} ● C₂₂H₄₆; I)



1991

Miroalca Kenzo,
Kudaka Ichiro et al.

Chem. Phys. Lett.
1991, 184 (4), 271-6.

(see  CH_5^+ ; I)

(ΔH)

Алканы
C-H соединения.

T_m, T_{t2}

фр. 1992, 49

1991

9 E378. Исследование полиморфизма парафинов с четным и нечетным числом атомов углерода (от C_{26} до C_{60}) методами термобарометрии и дифференциального термического анализа. Etude du polymorphisme de parafines paires et impaires (entre C_{26} et C_{60}) par analyse thermobarometrique et analyse thermique differentielle / Lourdin D., Roux A. H., Grolier J.-P. E. // JCAT 91: 22 èmes journées calorim. et anal. therm., Paris. 27—29 mai, 1991 / Assoc. Fr. calorim. et anal. therm. (AFCAT). — Marseille, 1991. — С. 151—158. — Фр.

T — P -диаграммы состояния алканов $C_{60}H_{122}$ (I), $C_{40}H_{82}$ (II), $C_{26}H_{54}$ (III) и $C_{27}H_{55}$ (IV) установлены методами ДСК и термобарометрии. Измерения свойств проведены в атмосфере Ar при скорости нагревания $1^\circ/\text{мин}$, воспроизводимость т-р эффектов $0,1^\circ\text{C}$. Установлены следующие т-ры фазовых превращений (методом ДСК): для I $T_{пл}=100^\circ\text{C}$, для II $T_{тр}=72,2^\circ\text{C}$, $T_{пл}=80,0^\circ\text{C}$; для III $T_{тр}=51,2^\circ\text{C}$, $T_{пл}=55,0^\circ\text{C}$; для IV $T_{тр}=45,4$ и $52,2^\circ\text{C}$, $T_{пл}=58,5^\circ\text{C}$. Т-ры превращений,

установленные термобарометрич. методом, согласуются с т-рами, определенными методом ДСК, до $0,1-1,0^{\circ}\text{C}$. Более сложное поведение III и IV выявлено термобарометрич. методом, анализ $P(T)$ -данных приводит к заключению о возможности вращения молекул алканов вокруг длинной оси молекулы в согласии с литер. данными.



$C_{60}H_{60}$

1991

Pennisi E.

Sci. News. 1991. 140,
N8, C. 120-123.

( C_{60} ; I)

Н-алканы

1991

19 Б3032. Температурная зависимость энтальпий испарения н-алканов, полученная из измерений давления паров. Temperature dependence of the vaporization enthalpies of n-alkanes from vapour-pressure measurements /Piacente Vincenzo, Pompili Tiziano, Scardala Paolo, Ferro Daniela //J. Chem. Thermodyn.—1991.—23, № 4.—С. 379—396.—Англ.

Из результатов измерений давл. паров, проведенных с использованием трех различных методов (торсионно-эффузионного, транспирац. и Кнудсена) рассчитаны постоянные ур-ния Антуана для 10 н-алканов; эйкозана (I), геййкозана (II), докозана (III), трикозана (IV), тетракозана (V), пентакозана (VI), гексакозана (VII), гептакозана (VIII), октакозана (IX) и нонакозана (X). Из постоянных ур-ния Антуана определены т-рные зависимости энтальпий испарения I—X и станд. энтальпий испарения при 298,15 К равные (в кДж/моль) I 152,3, II (141,8), III 151,1, IV 146,8, V 162,0, VI (173,6), VII 177,2, VIII 196,0, IX 208,9, X 220.

В. Ф. Байбуз

ΔH_v ,

температурная зависимость.

X. 1992, N 19

C-H coexistence

1991

/ 115: 36590z Correlation and prediction of physical properties of hydrocarbons with the modified Peng-Robinson equation of state. 3. Thermal properties. A new significant characterizing parameter m . Rogalski, Marek; Carrier, Bruno; Peneloux, Andre (INPL, ENSIC, 54042 Nancy, Fr.). *Ind. Eng. Chem. Res.* 1991, 30(7), 1612-17 (Eng). Enthalpies of vaporization and isobaric liq. heat capacities of hydrocarbons were calcd. by using a previously developed cubic equation of state. The enthalpy of vaporization predictions were in good agreement with the available exptl. data and compared favorably with those obtained by using predictive methods published in the literature. The results obtained with liq. heat capacities were satisfactory in most cases. Characterizing parameters proposed by Carrier et al. were used to develop general correlations for enthalpies of vaporization and vapor pressures of hydrocarbons. On the basis of the results obtained, m can be said to be a significant parameter that can be useful for correlating thermodyn. properties.

(SH, G)

C.A. 1991, 115, N4

$C_{60}H^+$

1991

Fullerene chemistry at NRL.
(Nav. Res. Rev. - 1991, -43, N3,
C. 45)

(all C_{60} ; ● I)

$C_{13}H_{10}$

(флуорен)

1991

115: 143990b Thermodynamic study of fluorene and dibenzofuran. Sabbah, R. (Cent. Thermodyn. Microcalorim., CNRS, 13003 Marseille, Fr.). *Bull. Soc. Chim. Fr.* 1991, (May-June), 350 (Fr). Thermodyn. functions of fluorene and dibenzofuran at 298.15 K were redetd. and the values were related to their mol. structures. The triple point of dibenzofuran was also detd. (355.51 ± 0.03 K).

термодин.

св-ла, T_m

$C_{12}H_8O$ (дибензофуран)

⑪ ~~IX~~

с. А. 1991, 115, N 14

Милые университеты

1991

116: 109873b Calculate liquid heat capacity. Yaws, Carl L. Lamar Univ., Beaumont, TX USA). *Hydrocarbon Process., Int. Ed.* 1991, 70(12), 73-7 (Eng). Correlation results of the heat capacity of hydrocarbons are given in a tabular format which is esp. applicable for rapid engineering use with the personal computer or hand calculator.

(Ср. папет)

C. A. 1992, 116, N 12

Yueboogoo

1992

118: 110802a Estimating enthalpies of sublimation of hydrocarbons. Chickos, James S.; Hesse, Donald G.; Liebman, Joel F. (Dep. Chem., Univ. Missouri, St. Louis, MO 63121 USA). NATO ASI Ser., Ser. C 1992, 367(Energ. Organomet. Species), 159-69 (Eng). A technique is proposed for the estn. of heats of evapn. and sublimation of hydrocarbons, when heats of fusion are available or can be estd. by a functional group additivity method.

($\Delta_m H$, $\Delta_v H$)

C.A. 1993, 118, N12

C-H-соедине | Om. 36344 | 1992

нине
(алканы)

Farvalena M., Hern-
don W.C.,

оценки
термич.

J. Chem. Ind. and Com-
put. Sci., 1992, 32,

сб-б N1, 37-42

CH_n

$$n = 0 \div 4$$

($\Delta_f H$)

(14)

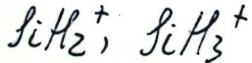
C.A. 1994, 120, N 4

1992

120: 39492h Thermochemistry of carbon and silicon hydrides (CH_n, SiH_n) (n = 0-4), and the cations silyliumylidene, silyliumyl, and silylium (SiH⁺, SiH₂⁺, and SiH₃⁺): a converged quantum mechanical approach. Grev, Roger S.; Schaefer, Henry F., III (Cent. Comput. Quantum Chem., Univ. Georgia, Athens, GA 30602 USA). *J. Chem. Phys.* 1992, 97(11), 8389-406 (Eng). The authors have detd. at 0 K the heats of formation of CH_n and SiH_n (n = 0-4) as well as the cations SiH⁺, SiH₂⁺, and SiH₃⁺ by using large at. natural orbital basis sets and coupled cluster methods including all single, double, and (perturbatively) triple excitations [CCSD(T)]. Core-correlation effects on the bond dissocn. energies have been explicitly evaluated. For the intermediate hydrides CH_n and SiH_n (n = 1-3), heats of formation are detd. from theor. bond dissocn. energies in two ways: by using exptl. heats of formation of the H and C (or Si) atoms; and using exptl. heats of formation of the H atom and the parent hydrides CH₄ (or SiH₄). In principle, this procedure allows to place rigorous upper and lower bounds on the heats of formation of the intermediate hydrides. Because the authors' theor. predicted atomization energies are already of high quality, estn. of remaining deficiencies in the one-particle basis sets can be obtained from extrapolation of obsd. trends in atomization energies upon basis set expansion. These extrapolated results are in outstanding

SiH_n (n=0÷4), SiH⁺

agreement with exptl. values where they are known to high accuracy. For the SiH_n compds., a serious problem occurs: the authors' predicted atomization energy of SiH_4 is larger than that obtained from exptl. heats of formation for the Si atom and silane. Thus either relativistic effects on the atomization energy of SiH_4 are large, or the exptl. heats of formation of Si and SiH_4 are incompatible. Excepting the atomization energy of SiH_4 , and thus the heats of formation of Si and SiH_4 , none of the authors' other SiH_n thermochem. predictions (properly interpreted) are clearly incompatible with expt. The authors' theor. predictions are again in agreement with exptl. detns. that are most certain.



1992

СН

(n=0-4)

12 Б3027. Термохимия CH_n , SiH_n ($n=0-4$) и катионов SiH^+ , SiH_2^+ и SiH_3^+ : сходящееся квантово-механическое приближение. Thermochemistry of CH_n , SiH_n ($n=0-4$), and the cations SiH^+ , SiH_2^+ , and SiH_3^+ : A converged quantum mechanical approach / Grev R. S., Schaefer III H. F. // J. Chem. Phys. — 1992. — 97, № 11. — С. 8389—8406. — Англ.

Оценена возможность точного теоретич. квантово-механич. предсказания величины $\Delta_f H$ и источники нек-рых расхождений в эксперим. термодинамич. данных для ЭH_n , $\text{Э}=\text{C}$ и Si , $n=0-4$. На обширном базисе атомных невозбужденных орбиталей (ANO) с использованием методов спаривания кластеров, включающих простые дуплетные и триплетные возбуждения, рассчитаны величины $\Delta_f H$ при 0 К для ЭH_n и ионов ЭH_n^+ . При расчетах энергий диссоциации ЭH_n учитывалось влияние корреляций в оболочках. Для $n=1-3$ $\Delta_f H$ найдены двумя путями по величинам энергий диссоциации с использованием $\Delta_f H$ атомов H , C или Si , или с использованием как $\Delta_f H$ атома H , так и $\Delta_f H$ (г, ЭH_4). В расчетах использовались экстраполяции, учитывающие эксперим. значения. Указанные способы

термохимия

①

X. 1993, N 12

SiCH (n=0-4)

расчета позволяют установить верхние и нижние границы истинных значений $\Delta_f H$. Значения $\Delta_f H$ CH_n при 0 К, найденные с применением атомных $\Delta_f H$, с использованием $\Delta_f H(g)$ и экстраполяций составили соотв. при $n=1142,29$; 341,06 и 141,85; $n=294,07$; 92,83 и 93,42; $n=337,03$; 35,80

и 36,03; $n=4-14,75$; —; — ккал/моль. Значения $\Delta_f H$ SiH_n (при 0 К), полученные из атомных $\Delta_f H$ со спин-орбитальной коррекцией и из $\Delta_f H(g)$ с применением экстраполяции составили при $n=0$ и 108,07; 188,10 и 89,21; 285,84 и 86,74; 364,77 и 65,60; 348,44 и 49,07; 410,09 и — ккал/моль. Указано на отличную сходимость расчетных и эксперим. данных для CH_n . Отмечено, что расхождения в расчетных и эксперим. величинах для Э-Si могут указывать на несовместимость значений $\Delta_f H$ Si и SiH_4 .
Библ. 90.

Ж. Г. Василенко

Углеводороды

1992

10 Б3009. Методы и результаты исследования свойств углеводородов при высоких температурах и давлениях. Methods for determination and results of investigation of properties of hydrocarbons at high temperatures and pressures /Grigoryev B. A. //12th IUPAC Conf. Chem. Thermodyn. [and] Jt Meet. 47th Calorim. Conf., Snowbird, Utah, 16—21 Aug., 1992 :Program, Abstr., and Repts .—S. l. ,[1992] .—С. 41 .—Англ.

Сообщается, что в интервалах t -р 150—700 К и давл. 0,1—150 мПа определены плотности (ν), величины C_p , поверхн. натяжение (σ), динамич. вязкость (η), теплопроводность (λ) углеводородов с применением методов:

X. 1993, N 10

адиабатич. калориметрии с точностью (ρ) 0,5—1% и прецизионной адиабатич. протонной калориметрии $\rho=0,35\%$ для определений C_p ; пьезометрич. метод; $\rho=0,05—0,15\%$ и гидростатич. взвешивания, $\rho=0,02—0,05\%$ для v ; капиллярного поднятия $\rho=0,5—0,8\%$ для σ ; вискозиметрии, $\rho=0,2—1,2\%$; метод горячей проволоки для λ , $\rho=1,1—1,6\%$. v , C_p и η измерены для $n\text{-C}_6\text{H}_{12}$ — $n\text{-C}_{11}\text{H}_{24}$ и циклогексана; σ — для $n\text{-C}_5\text{H}_{12}$ — $n\text{-C}_{24}\text{H}_{50}$ от т-р тройной точки до крит.; C_p , η и λ — для 40 углеводородов n -парафинов, изопарафинов, алкенов, алкинов, циклопарафинов и ароматич. углеводородов в интервале т-р 280—473 К и давл. до 50 мПа.

Ж. Г. Василенко

$C_{60}H_2$

1992

Henderson C. C.,
Cahill P. A.

Chem. Phys. Lett.

1992, 198(6), 570-6.

теор.
расчёт
стабильности
изомеров

(см. C_{60} ; $\frac{1}{2}$).

Термодинам. св-ва
ароматических
углеводородов

1992

11 Б3011. Эмпирические модельные расчеты термодинамических и структурных свойств конденсированных полициклических ароматических углеводородов. Empirical model calculations for thermodynamic and structural properties of condensed polycyclic aromatic hydrocarbons / Herndon William C., Nowak Paul C., Connor Dallas A., Lin Peiping // J. Amer. Chem. Soc.— 1992.— 114, № 1.— С. 41—47.— Англ.

Исследована возможность различных методов расчета структурных и термодинамич. св-в конденсированных полициклич. бензонидных ароматич. УВ (ПБАУВ). Сравнение расчета с лит. эксперим. данными для 153 ПБАУВ показало, что метод молек. механики и метод групповых вкладов хорошо оценивают относит. и абс. устойчивость ПБАУВ как с плоской, так и неплоской молек. структурой и их теплоты образования.
В. Ф. Байбуз

X. 1992, № 11

1992

21 Б3011. Изучение полиморфизма некоторых четных и нечетных парафинов (C_{26} , C_{27} , C_{40} , C_{60}) термобарометрической и дифференциальной сканирующей калориметрией. Thermobarometric and different scanning calorimetric study of the polymorphism of some even and odd paraffins (C_{26} , C_{27} , C_{40} , C_{60}): Pap. 22nd Annu. Meet. French Assoc. Calorim. and Therm. Anal. (AFCAT), Paris-XI-Chateau-Malabry, 27—29 May, 1991 /Lourdin D., Roux A. H., Grolier J.-P. E., Buisine J.-M. //Thermochim. acta .—1992 .—204, № 1 .—С. 99—110 .—Англ.

Термобарометрически и методом ДСК при давл. от атмосферного до давл. выше 1000 бар изучено термич. поведение n-алканов C_{26} , C_{27} , C_{40} и C_{60} (соотв. I—IV). Приведены фазовые диаграммы I—IV в координатах P — T для т-рных интервалов 30—100°C. Найдены след. х-ки для плавления и двух твердофазных переходов T_{fus} , $T_{tr=1}$

(T_m , ΔH_m)

Х. 1993, № 21

C_{26} № 54
 C_{27} № 56
 C_{40} № 32
 C_{60} № 122

$T_{tr=2}$, $\Delta_{fus}H$, $\Delta_{tr=1}H$, $\Delta_{tr=2}H$, $(dP/dT)_{fus}$, $(dP/dT)_{tr=1}$, $(dP/dT)_{tr=2}$, $\Delta_{fus}V$, $\Delta_{tr=1}V$, $\Delta_{tr=2}V$: I 55,0°C, 51,2°C, —, 57,6 кДж/моль, 32,2; —; 44,3 бар/°C, 33,7; —; 0,106 см³/г; 0,0709; —; II 58,9°C, 52,2°C, 45,4°C; 59,0: 26,3; 2,2; 44,9; 37,9; 27,3; 0,103; 0,55; 0,004; III 80,0°C; —; 72,2° 133,5; —; 14,0; 39,2; —; 23,6; 0,169; —; 0,030. IV 100,0°C; —; —; 186,8; —; —; 35,6; —; —; 0,165; —; —. Обсуждено влияние давл. на стабильность тв. фаз изученных парафинов.

Ж. Г. Василенко

$C_{60}H_2$

1992

Matsuzawa Nobuyuki,
Dixon D.A. et al.

($\Delta_f H$)

J. Phys. Chem. 1992,
96 (19), 7594-604.

(cur.  $C_{60}H_2$; III)

H- $C_{20}H_{42}$

1992

5 Б3195. Калориметрия в переменном режиме при точке фазового перехода первого рода. AC calorimetry at the first order phase transition point /Saruyama Y., //J. Therm. Anal. —1992. —38, № 8. —С. 1827—1833. —Англ.; рез. нем.

Предложена теор. модель для калориметрии в переменном режиме для точки фазового перехода 1-го рода, к-рая в состоянии объяснить исключение скрытой теплоты из эксперим. данных и наблюдаемый фазовый сдвиг. Эксперим. проверка модели осуществлена при исследовании методом ДСК (на частотах 2,5—80 Гц) в диапазоне т-р 2285—320 К поведения н- $C_{20}H_{42}$ в области его т. пл. Наблюдаемая частотная зависимость уд. теплоемкости согласуется с предсказаниями модели. Гармонич. компонента т-рной модуляции с частотой равна удвоенной частоте нагрева в точке перехода. Показано, что гармонич. компонента м. б. объяснена на основе предложенной модели.

В. А. Ступников

(6p)
X. 1993, n5

С-Н соединения

1992

7 E50. Конечная T_d симметричная модель алмаза: от адамантана к суперадамантану ($C_{33}H_{36}$). Finite T_d symmetry models for diamond: From adamantane to superadamantane ($C_{33}H_{36}$) / Shen Mingzuo, Schaefer Henry F. (III), Liang Congxing, Lii Jenn-Huei, Allinger Norman L., von Ragué Schleyer Paul // J. Amer. Chem. Soc. — 1992. — 114, № 2. — С. 497—505. — Англ.

Сравниваются особенности кристаллич. структуры алмаза со строением углерод-водородных соединений. Приведены расчетные энергетич. характеристики циклогексана (C_6H_{12}), адамантана ($C_{10}H_{16}$), диамантана ($C_{14}H_{20}$), триамантана ($C_{18}H_{24}$), изотетрамантана ($C_{22}H_{28}$), циклогексамантана ($C_{26}H_{30}$) и адамантан-адамантана ($C_{35}H_{36}$). Приведены структурные схемы указанных соединений, в основе которых лежат гексагональные (не всегда правильные) кольца С, образующие пространственный мотив. Рассмотрена роль Н в формировании рассматриваемых структур. Расстояние С—С в них 1,52—1,55 Å. Рассмотрены методы изучения описанных соединений. Библ. 55.

ф. 1992, № 7

Уиндзорск

1992

118: 88681m Heat capacity estimations using equations of state. Solimando, Roland; Rogalski, Marek; Coniglio, Lucie (INPL, ENSIC, 54001 Nancy, Fr.). *Thermochim. Acta* 1992, 211, 1-11 (Eng). Five equations of state accurately expressing the vapor pressures of hydrocarbons were used to est. ΔC_p , the difference between liq. and ideal gas heat capacities. It was obsd. that two equations of state giving equally accurate vapor pressures can yield very different ΔC_p ests. The consequences are investigated and discussed.

(C_p , ошибка)

c.A. 1993, 118, N 10

Углеводороды

1992

5 Б3042. Расчет равновесия конверсии углеводородов водяным паром с получением состава технического водорода, совместимого с рабочими газами топливных элементов с карбонатным расплавом /Степанов Г. К. //Расплавы.—1992.—№ 4.—С. 51—59.—Рус.

Приведен способ термодинамич. расчета сложного газ. равновесия р-ций, одновременно протекающих при конверсии углеводородов водяным паром. Рассчитаны координаты нек-рых фиксированных значений фигуративных точек кривых в тройной системе $C-H-O$, символизирующих границы углеродоотложения для 873 и 973 К при равновесии. На диаграмме выделена трапециевидная область составов газ. смесей, отвечающих в равновесии реальным рабочим составам. Область охватывает все вещественные составы газ. смесей, к-рые могут реализоваться в конверсионном объеме при возможных на практике колебаниях рабочей т-ры высокот-рного карбонатного топливного элемента-генератора в пределах $\pm 50^\circ$.

(Кр)

X.1993, N5

Угневоспозит (21)

1992

116: 182612v Use of RISM theory to calculate the heats of evaporation of liquid hydrocarbons. Talitskikh, S. K.; Khalatur, P. G. (Tver. Gos. Univ., Tver, USSR). Zh. Fiz. Khim. 1992, 66(1), 137-9 (Russ). The RISM (Ref. Interaction Site Model) was used to develop a model for the calcn. of the heats of evapn. of several hydrocarbons. The calcd. values are compared to the exptl. data.

($\Delta_r H$)

C.A. 1992, 116, N 18

Чистые углеводороды

1992

118: 28058d High-precision determination of thermophysical properties of pure liquids. Wilhelm, Emmerich; Roux, A. H.; Grolier, J. P. E. (Inst. Phys. Chem., Univ. Wien, A-1090 Vienna, Austria). *Calorim. Anal. Therm.* 1992, 23, 71-8 (Eng). Results for the selected thermodyn. properties of some pure hydrocarbon liqs. are presented and the methods which were used to det. them are discussed.

(пермодик. в-ва)

Бензол с этиленом

C₆H₆ + C₂H₄

1992

) 6 Б2459. Термодинамический анализ бензола с этиленом. Thermodynamic analysis of benzene with ethylene /Wyczesany Andrej //Pol. J. Appl. Chem. —1992. —36, № 1. —С. 73—82. —Англ.

Предложена термодинамич. модель процесса в жидк. фазе в предположении, что система ведет себя как неидеальная смесь. Модель позволяет рассчитывать равновесный состав конечных продуктов процесса. Алгоритм основан на методе минимизации свободной энергии Гиббса, а коэф. активности рассчитывается методом ASOG. Результаты расчетов сравнены с данными промышленного процесса алкилирования бензола, этиленом в присутствии AlCl₃ и C₂H₅Cl и найдено, что система не достигает хим. равновесия. Также обсуждено отклонение от идеального состояния и влияние т-ры и состава исходных в-в на рассчитываемый равновесный состав.

В. Ф. Байбуз

равновесный
состав, Кр

X. 1993, № 6

н-С₂₄H₅₀

1993

растворимость

11 Б3126. Растворимость тетракозана в углеводородных растворителях. Solubilities of tetracosane in hydrocarbon solvents /Brečević Ljerka, Garside John //J. Chem. and Eug. Data .—1993 .—38 ,№ 4 .—С. 598—601 .—Англ.

В области t -р 279,3—305,8 К определены р-римости (x_2 мол. доли) тетракозана (н-С₂₄H₅₀; I) в н-гептане и додекане и в смесях изомеров декагидронафталина (C₁₀H₁₈) и м- и п-ксилолов. Рассчитаны энтальпии и энтропии р-рения I ($\Delta_p H$ и $\Delta_p S$) в этих р-рителях. Полученные результаты описаны ур-ниями $\ln x_2 = -(\Delta_p H/RT) + (\Delta_p S/R)$. Рассчитанные по x_2 активности I в р-ре сравнены с оценками их величин, сделанными с помощью ур-ния Скетчарда — Гильдебранда и ур-ния UNIFAC. Первое ур-ние дает хорошее согласие с экспериментом, особенно в случае нормальных углеводородов.

Л. В. Арсеенков

Х. 1994, № 11

Университет

1993

119: 125586c General expression of boiling point of hydrocarbon homologs and the physical meaning of coefficients in the expression. Cao, Chenzhong; Zhou, Feiyue (Dep. Chem., Xiangtan Teach. Coll., Xiangtan, Peop. Rep. China 711100). *Huaxue Tongbao* 1992, (11), 36-9 (Ch). A ternary equation used to calc. the heat of evapn. and b.p. of hydrocarbons in a homolog series considering the no. of carbon atoms was analyzed. General equation for calcg. the b.p.s. was derived. Phys. meaning of various coeffs. in the equation was explained.

yp - ue gne
racema
 $\Delta_r H, T_b$

C.A. 1993, 119, N 12

C₆₀H₃₆

1993

11 E204. Структура C₆₀H₃₆. The structure of C₆₀H₃₆ / Hall L. E., McKenzie D. R., Attalla M. I., Vassallo A. M., Davis R. L., Dunlop J. B., Cockayne D. J. H. // J. Phys. Chem. — 1993 — 97, № 21. — С. 5741—5744. — Англ.

Методами электронной и рентгеновской дифракции изучена структура поликристаллич. образцов C₆₀H₃₆ с 10—15% C₇₀H₃₆, полученных гидрированием фуллерита при высоких давл. Молекулы упакованы в кристалле по типу ОЦК-решетки с a 11,785 Å. Посредством фурье-преобразования дифракционных данных получены функции радиального распределения атомной плотности, сопоставление которых с тремя структурными моделями показало, что наилучшее описание C₆₀H₃₆ обеспечивает структура с D_{3d}-симметрией при которой вытянутая сфероидальная форма молекулы хорошо соответствует ОЦК-решетке, что согласуется с другими эксперим. данными.

В. И. Т.

структура

СР. 1993, № 11-12

C₂₃H₄₈

1993

) 2 БЗ083. Новое фазовое превращение первого рода и новые полиморфные модификации нормальных парафинов. New phase transformation of the first order and new polymorphic modifications of normal paraffins /Filatov S. K., Kotelnicova E. N., Chaznengina S. Yu. //16th Congr. Int Union Crystallogr., Beijing, 21—29 Aug., 1993: IUCrXVI: Collect. Abstr. — Beijing, 1993. — С. PS-06.04.17. — Англ.

Методом высокот-ного РФА обнаружен скачок объема и нек-рых др. параметров крист. решетки $n\text{-C}_n\text{H}_{2n+2}$ при т-рах, близких к т. пл. Для гомолога C₂₃H₄₈ $\Delta_{tr}V=4,3\%$ при $T_{rot1}=38,5^\circ\text{C}$, отвечающей переходу ромбич. крист. фазы в ранее неизвестную ромбич. фазу вращения, к-рая при $T_{rot2}=43^\circ\text{C}$ переходит вследствие фазового превращения 2-го рода в известную гексагон. фазу вращения с т. пл. 47°C . Представлена модель наблюдаемой последовательности фазовых превращений. В. А. Ступников

(T_{t2})

X. 1994, N2

Н-алканы

1993

1 Б3056. Предплавление в н-алканах. Обзор. Pre-melting in the n-alkanes: A review /Mandelkern L., Alamo R. G., Dorset D. L. //Acta chim. hung. — Models Chem. — 1993 .— 130 ,№ 3—4 .— С. 1—7 .— Англ.

Обзор эксперим. и теор. исследований явления предплавления н-алканов, определяемого как начало конформац. разупорядочения при концевых последовательностях молекул. Проанализированы результаты прямых эксперим. наблюдений (колебат. спектроскопия и ЯМР), термодинамич. исследований и данные по малоугловому рентгеновскому рассеянию и по измерениям коэф. расширения. Эти результаты использованы для интерпретации перехода в гексагон. фазу ротора. Движение, характерное для этой фазы, не м. б. интерпретировано только на основе вращения жесткой молекулы вдоль ее длинной оси, необходимо рассматривать и релаксацию разупорядоченных концевых последовательностей.

В. А. Ступников

(T_m)

X. 1994, n1

$C_{60}H^+$

Petrie Simon, Yavahery B; et al, ¹⁹⁹³

J. Amer. Chem. Soc., 1993,
115, N14, C. 6290-6294.

$(C_{60}H^0)$

(cell.



$C_{60}; I)$

Зубоворот

1993

119: 57310f. Estimation of the heat capacities of organic liquids as a function of temperature using group additivity. I. Hydrocarbon compounds. Ruzicka, Vlastimil, Jr.; Domalski, Eugene S. (Chem. Kinet. Thermodyn. Div., Natl. Inst. Stand. Technol., Gaithersburg, MD 20899-0001 USA). *J. Phys. Chem. Ref. Data* 1993, 22(3), 597-18 (Eng). A second-order group additivity method was developed for the estn. of the heat capacities of liq. hydrocarbons as functions of temp. in the range from the melting temp. to the normal b.p. The temp.-dependence of THE group contributions and structural corrections are represented by a polynomial expression. The adjustable parameters in the polynomials were calcd. by using a weighted least squares minimization procedure. Recommended heat capacities from a large compilation of critically evaluated data that contains over 1300 org. liqs. served as the database both for the development and testing of the method.

(P. Ozerka)

C. A. 1993, 119, N 6

Ароматические
углеводороды

1993

10 БЗ133. Термодинамическая характеристика сольватации моно- и полициклических ароматических углеводородов и их производных в неводных средах /Смирнов В. И., Крестов Г. А. //Ж. хим. термодинам. и термохимии. .—1993 .—2 ,№ 1 .—С. 5—23 .—Рус. ;рез. англ.

На основе калориметрич. данных по энтальпиям р-рения ряда ароматич. углеводородов в орг. р-рителях различной природы, а также значений энтальпий испарения и сублимации дан анализ особенностей их сольватации. Показано, что энергетика процесса вз-вия ароматич. углеводород — орг. р-ритель хорошо описывается линейным пятипараметровым корреляц. ур-нием, учитывающим полярность, поляризуемость, плотность энергии когезии, основность и электрофильность р-рителя. Процесс вз-вия, как правило, носит донорно-акцепторный характер, где ароматич. углеводород может выступать как в кач-ве донора, так и акцептора электронов, что определяется природой орг. р-рителя и природной функциональных заместителей, если таковые имеются. Соль-

Δ H_{жж}

X.1994; N10

сольватация ароматич. углеводов определяется преимущественно универсальной составляющей, к-рая слабо зависит от природы орг. р-рителя. Вклад специфич. составляющей увеличивается с введением в молекулу углеводорода электронодонорных заместителей, а также с усилением электронодонорной способности р-рителя. Энтальпии сольватации ароматич. углеводов, не содержащих реакц. групп и имеющих плоскую молекулу, находятся в линейной связи с кол-вом π -электронов сопряженной системы π -связей и могут быть легко рассчитаны по предлагаемому ур-нию. Предложена модель расчета энтальпии сольватации ароматич. углеводов с функциональными заместителями различной природы.



$C_6H_4(CN)_2$ C_6H_4 1993
(актрацен) Тееенко А. А.,
Тееенко В. Ф. и др.
термод. Ж. физ. химии.
характерей. 1993. 67, N 2. С.
245 - 247.

(см. ● $C_{10}H_8$; 1)

Полнукристаллический
ароматический углеводород

1993

119: 257402z Enthalpies of formation of PAH molecules and radicals. Wang, Hai; Frenklach, Michael (Dep. Mater. Sci. Eng., Pennsylvania State Univ., University Park, PA 16802 USA). *Combust. Fundam. Appl., Jt. Tech. Meet., Cent. East. States Sect. Combust. Inst.* 1993, 655-9 (Eng). Combustion Inst.: Pittsburgh, Pa. A new method is presented of calcn. of the heats of formation of polycyclic arom. hydrocarbons (PAH), which combines semiempirical group additivity methods. The std. state heats of formation of selected cata- and peri-condensed benzenoid aroms. up to 3-circum= coronene are examd. and values calcd. by several method together with exptl. data are compared.

($\Delta_f H$)

C. A. 1993, 119, N24

Гидролог

1993

120: 331717v Predicting the vapor pressures of hydrocarbons from normal boiling points. Zhao, Xingmin (Dep. Chem. Eng., Tianjin Univ., Tianjin, Peop. Rep. China). *Tianjin Daxue Xuebao* 1993, (6), 131-5 (Ch). A method of predicting vapor pressures of hydrocarbons from the normal b.ps. and the mol. formulas is proposed. For 481 exptl. data points of 29 hydrocarbons, including high-mol.-wt. hydrocarbons, the new method gives a relative av. error of 3.2%.

Рррр мотк
(Курену)

(all. open)

C. A. 1994, 120, N 26

C60 Hx [Om. 38101] 1994

Beardmore K., Smith R.,
Richter A., et al.,

J. Phys: Condens. Matter
1994, 6, 7351-7364

The interaction of hydrogen
with C60 fullerenes. I

$(CH_3)_4C_6H_2$

1994

Chirico R.D., Heek W.V.,

Ind. Eng. Chem. Res. 1994,

33 (1), 157-67.

(G. T. Quem., p)

(All. C_6H_6 (21); I)

α -аланин

1994

11 53125. Энтальпии растворения α -аланина в воде и растворах некоторых хлоридов щелочных металлов при 298,15 K. The enthalpies of solution of α -alanine in water and in some alkali metal chloride solutions at 298.15 K /Lu Yan, Xie Wei, Lu Jinsuo //Thermochim. acta .—1994 .—246 ,№ 1 .—С. 49—55 .—Англ. ;рез. Англ.

Измерены энтальпии р-рения α -аланина (I) в воде и р-рах LiCl, NaCl и KCl при 298,15 K, а также оценены энтальпийные параметры взаимодействия h_{xy} , h_{xyx} и h_{xyy} α -аланина с этими солями. Обсуждена зависимость энтальпийных параметров взаимодействия от размера иона в электролите в пределах концепции электростатич. и структурных взаимодействий. Б. Г. Коршунов

ΔH_{aq}

X. 1995, N 11

Унверситет

1994

Morgan D. L., Kobayashi R;

Fluid Phase Equil., 1994,

P,

94; N1-3, c. 57-87

ВУ

Распространение
соответствующих
Питцера где

магнетит прижизненных
состояний
давлений паров

и телот испарение на електро-
цепотение утврдување.

$C_{60} \cdot x(C_6H_{12})$

1994

14 Б39. **Стехиометрия и термодинамические свойства** массивного C_{60} сольватированного циклогексаном. Stoichiometry and thermodynamic property of massively cyclohexane-solvated C_{60} / Nagano Y., Tamura T., Kiyobayashi T. // Chem. Phys. Lett. — 1994. — 228, № 3. — С. 125—130. — Англ.

Методом ДСК (скорость нагрева 10 К/мин) исследовано фазовое поведение кристаллов C_{60} , сольватир. циклогексаном. Обнаружено две стехиометрич. крист. фазы $C_{60}(C_6H_{12})_{13,6}$ (I) и $C_{60}(C_6H_{12})_2$ (II). I проявляет аномалию в уд. теплоемкости при -160°C , а после отжига при комн. т-ре в цикле нагрева проявляется резкий пик при -153°C с $\Delta_f H = 20$ кДж/моль. В II имеется аномалия при $-122,5^\circ\text{C}$. Фаза I имеет крист. структуру типа AB_{13} , составленную из бинарных сфер. I является incongruently melting compound с точкой перитектики при 77°C .

В. А. Ступников

$(T_{t2}, \Delta H_{t2})$

X. 1995, N 14

C_6H_2

1994

Natterer Johannes, Koch
Wolfram, et al.,

ΔH_f , Chem. Phys. Lett., 1994,
80 229, N4-5, p. 429-434.

PA.X.N23, 1995, 235356

CGH

1994

Natterer Johannes, Loch
Wolfram, et al.,

SHf,
Do

Chem. Phys. Lett., 1994,
229, N4-5, C. 429-434

P.M.X.N 23, 1995, 235 356

H-alkane

1994

Piacente Vincenzo, et al.,

P, ΔH J. Chem. and Eng. Data,
1994, 39, N2, C.231-237

P.21.X. N2, 1994, 215 3023

Алкилбензолы

1994

14 БЗ19. Давления паров для группы высококипящих алкилбензолов при условиях окружающей среды. Vapor pressures for a group of high-boiling alkylbenzenes under environmental conditions / Růžicka Vlastimil (Jr), Záborský Milan, Růžicka Květoslav, Majer Vladimír // Thermochim. acta .— 1994 .— 245 .— С. 121—144 .— Англ.

На основе лит. эксперим. данных по давл. паров (как правило, полученных при давл. от 1 до 100 кПа) и связанных с ними термич. св-в (таких как теплоты фазовых переходов и теплоемкости), измеренных при низких давл., с использованием точных термодинамич. соотношений, дающих согласованные данные, описывающие линии насыщения пар—жидкость или пар—тв. тело при условиях окружающей среды, для группы из 20 алкилбензолов, нормальные т-ры кипения к-рых лежат выше 423К, определены наиболее надежные значения давл.

(P)

Х. 1995, № 14

паров. Для восьми полиметилбензолов, четырех алкилметилбензолов и восьми моноалкилбензолов, к-рые обычно рассматриваются как в-ва, загрязняющие окружающую среду, при т-рах 223,15—323,15K приведены рекомендованные данные для давл. пара, теплоты испарения, теплоты сублимации и разностей теплоемкостей в тройной точке и при температуре 298,15K. Библ. 59.

В. Ф. Байбуз

C₂₀H₄₂ Růžicka K., Růžicka V.,¹⁹⁹⁴
et al.

13th IUPAC Conf. Chem. Thermodyn.: 7th Meet. 25th AFCAT
P, Cp Conf., Clermont-Ferrand, July
17-22, 1994: Programme and
Abstr. [Clermont-Ferrand]

1994.C. 305.

(corr. — C₁₈H₃₈; I)

C₂₈ H₅₈

1994

Růžicka K., Růžicka V.,
et al.

13 th IUPAC Conf. Chem. Thermodyn.: Jt Meet. 25th AFCAT
Conf., Clermont-Ferrand, July
17-22, 1994: Programme and
Abstr. [Clermont-Ferrand]

1994. C. 305. (see C₁₈ H₃₈ ; I)

P, Cp.

C₂₂H₄₆ Ružička K., Ružička V., 1994
et al.

P, Cp 13th IUPAC Conf. Chem Thermodyn.: 7th Meet. 25th AFCAT
Conf., clermont-Ferrand, July
17-22, 1994: Programme and
Abstr. [clermont-Ferrand]
1994. C. 305.
(cur. C₁₈H₃₈; I)

H- C₂₇H₅₆ Saruyama Y, Takamiza¹⁹⁹⁴-
wa K., et al.,

CF Netsu sokutei = Calorim.
and Therm. Anal. - 1994,
21, N 2, C. 61-67

Исследования термической стабильности
пластмассы кристалла • метилом H-ла-
Р.д.х. N 6, 1995, 66 2166

рафика: измерение [летом]
калориметром на пересектом
тоже для теплокосака (K-27H56)

(H - C₇H₅B)

1994

Saruyama Y., Takamizawa K.,
et al.,

Gr J. Chem. Phys., 1994, 101, N3,
C-2365-71.

P.M. X. N1, 1995,

153025

Yutopogor

1994

/ 122: 17994n A new method for estimation of heat of combustion of hydrocarbons and their mixtures. Zong, Hanxing; Yu, Qingsen; Xu, Su; Lin, Ruisen (Department Chemistry, Zhejiang University, Hangzhou, Peop. Rep. China). *Shiyou Xuebao, Shiyou Jiagong* 1994, 10(2), 95-9 (Ch). A new correlation between the heat of combustion (gross or net) of hydrocarbons or their mixts. and their refraction index n , d ., and av. mol. wt. M has been established from the group addn. property of mol. refraction index. This model has been verified exptl. and the parameters in this model have been obtained from the data of eighteen fractions of Daqing crude oil. This model can be conveniently used to est. the heat of combustion of pure hydrocarbons or their mixt. from their n , d . and M values.

(A comb H)

C.A. 1995, 122, 72

Yue Rogorogk (a)

1995

123: 323398p Heat capacities of liquid polycyclic aromatic hydrocarbons. Durupt, N.; Aoulmi, A.; Bouroukba, M.; Rogalski, M. (Laboratoire de Thermodynamique Chimique et Appliquee, INPL-ENSIC, BP 421, 54001 Nancy, Fr.). *Thermochim. Acta* 1995, 260, 87-94 (Eng). Liq. heat capacities of 14 arom. hydrocarbons were measured by using a DSC calorimeter. The measurements were performed in the temp. range 100 K above the melting temp. of each hydrocarbon. The lowest and highest temps. considered were resp. 303 and 692 K. Exptl. results were correlated using Benson's group contribution approach. The group parameters detd. allow the exptl. results to be represented to within 2%.

(G)

C-A. 1995, 123, N24

1995

F: C13H10

P: 1

8Б322. Стеклование в устойчивых кристаллических состояниях дибензофурана и флуорена. Glass transitions in the stable crystalline states of dibenzofuran and fluorene / Fujita Hiroaki, Fujimori Hiroki, Oguni Masaharu // J. Chem. Thermodyn. - 1995. - 27, N 8. - С. 927-938. - Англ.

В адиабатическом калориметре измерены теплоемкости дибензофурана при t -рах 245-375K и флуорена при t -рах 200-419K. В обоих соедин. в устойчивом крист. состоянии обнаружено стеклование при t -ре $T[s]=316K$, к-рое обусловлено замораживанием реориентац. движений псевдоплоских молекул. В дибензофуране скачок теплоемкости при $T[s]$ оценен равным $6,8' \pm 0,2 \text{ Дж} \cdot \text{моль}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Энтальпийная релаксация, сопровождающая стеклование, имела почти экспоненц. форму с энергией активации реориентации,

X. 1996, N 8.

равной 98 ± 5 кДж*моль⁻¹. В флуорене скачок теплоемкости при $T[s]$ равен $7,0 \pm 0,3$ Дж*моль⁻¹*К⁻¹, а энтальпийная релаксация как ф-ция времени показывает заметную экспоненциальность. Эта неэкспоненциальность, по-видимому, связана с непланарностью молекул.. Ср, 200-400К.

А. Кернос

1995

Herndon W.C.

Chem. Phys. Lett.

(4fH)

1995, 234(1,2,3), 82-6.

(ссылка на Углероды; I)

Алкамы

1995

Herndon W. C.

Chem. Phys. Lett. 1995,
234 (1, 2, 3), 82-6.

(А+М)

(см. Умерозы; I)

Алкери

1995

Herndon W.C.

($\Delta_f H$) Chem. Phys. Lett. 1995,
234 (1, 2, 3), 82-6.

(см. Углерод; I)

Удмурт

1995

122: 198193u Hydrocarbon enthalpies of formation and ab initio calculations. Herndon, William C. (Department of Chemistry, University of Texas at El Paso, El Paso, TX 79968 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1995, 234(1,2,3), 82-6 (Eng). Simple protocols to convert calcd. HF ab initio energies for hydrocarbons to accurate heats of formation are described. The optimum procedures use the nos. of carbon and hydrogen atoms, and 6-31G* energies as independent variables. The 6-31G* energies are calcd. at either 6-31G* or STO-3G optimized geometries. The data set of 65 compds. includes planar and nonplanar polycyclic aroms., alkyl-substituted benzenes, highly strained alkenes and alkanes, and alkynes. The exptl. $\Delta H_f^\circ(g)$ cover a range of -50 to +150 kcal/mol. The mean deviation between exptl. and calcd. $\Delta H_f^\circ(g)$ is 1.1 kcal, and the correlation coeff. is 0.9998 for the 6-31G*//STO-3G calcn.

($\Delta_f H$)

(+3)

17

1) алкен

2) алкан

3) алкин

C. A. 1995, 122, N 16

Омакека
 $C_{11}H_{14}$

(M.X.)

1995

123: 19156k Thermodynamic properties of pentacyclo[5.4.0.0^{2,8}.0^{3,10}.0^{4,9}]undecane, $C_{11}H_{14}$. Kabo, G. J.; Kozyro, A. A.; Diky, V. V.; Simirsky, V. V.; Ivashkevich, L. S.; Krasulin, A. P.; Sevruk, V. M.; Marchand, A. P.; Frenkel, Michael (Chem. Dep., Belarussian State Univ., Minsk, Belarus 220080). *J. Chem. Thermodyn.* 1995, 27(6), 707-20 (Eng). Thermodyn. properties of pentacyclo[5.4.0.0^{2,8}.0^{3,10}.0^{4,9}]undecane were detd. The heat capacity was measured by vacuum adiabatic calorimetry (5.0-320.6 K) and by the triple heat-bridge method (300-480 K). One solid-to-solid transition was discovered at 164.4 K with molar enthalpy of transition: $\Delta_{tr}H_m^\circ = (4.861 \pm 0.038)$ kJ/mol. The fusion temp. is 475.8 K, and the molar enthalpy of fusion is $\Delta_{fm}H_m^\circ = (6.38 \pm 0.12)$ kJ/mol. Std. molar thermodyn. functions of the crystal obtained from the exptl. heat capacity at 298.15 K are $C_{p,m}^\circ = (184.4 \pm 0.7)$ J/K·mol; $\Delta_0TS_m^\circ = (212.1 \pm 0.9)$ J/K·mol; and $\Phi_m^\circ = \Delta_0TS_m^\circ - \Delta_0TH_m^\circ/T = (102.7 \pm 0.4)$ J/K·mol. Comparison of the thermodyn. characteristics of fusion and solid-to-solid transition confirms the existence of a plastic cryst. state in the range 164.4-475.8 K. The entropy of the solid-to-solid transition at 164.4 K is about 25% of the free-rotation entropy of isolated mols. The enthalpy of sublimation was measured with a heat-conduction differential microcalorimeter: $\Delta_{sub}H_m^\circ(336.86 \text{ K}) = (54.71 \pm 0.94)$ kJ/mol.

C.A. 1995, 123, N2

kJ/mol. The vapor pressure, measured by means of the integral effusion Knudsen method in the range 273.21–323.40 K, can be expressed by the equation: $\ln(p/\text{Pa}) = (25.74 \pm 0.44) - (6598 \pm 131) \cdot (K/T)$. The wt.-averaged value of the molar sublimation enthalpy: $\Delta_{\text{sub}}H_m^\circ(298.15 \text{ K}) = (55.85 \pm 1.00) \text{ kJ/mol}$, was obtained using $\Delta_{\text{cr}}C_{p,m} = 49 \text{ J/K}\cdot\text{mol}$. The third-law std. molar entropy at the pressure $p = 101\,325 \text{ Pa}$ is $(333.6 \pm 3.4) \text{ J/K}\cdot\text{mol}$, based upon the wt.-averaged value of the molar sublimation enthalpy. The mass energy of combustion in oxygen: $\Delta_c u^\circ = -(43332.2 \pm 31.3) \text{ J/g}$, and the molar enthalpy of combustion: $\Delta_c H_m^\circ = -(6345.2 \pm 4.8) \text{ kJ/mol}$, were detd. from the results of five expts. The std. molar enthalpy of formation in the cryst. state: $\Delta_f H_m^\circ(\text{cr}, 298.15 \text{ K}) = (15.8 \pm 4.9) \text{ kJ/mol}$. The std. molar enthalpy of formation in the gas state (obtained by using the wt.-averaged sublimation enthalpy) is $\Delta_f H_m^\circ(\text{g}, 298.15 \text{ K}) = (71.7 \pm 5.0) \text{ kJ/mol}$. It was shown that the total strain energy simply reflects the sum of the strain energies in the independent rings which comprise the compd. IR and Raman spectra were recorded, and a vibrational anal. was performed on the spectral quantities. The std. thermodyn. properties in the ideal-gas state were calcd. in the temp. range 100–1000 K. The calcd. std. molar entropy at $T = 298.15 \text{ K}$: $\Delta_0^\circ TS_m^\circ(T, \text{g}) = 330.77 \text{ J/K}\cdot\text{mol}$, is in satisfactory agreement with the exptl. value.

1995

F: C25H52

P: 1

9Б387. Фазовые превращения твердое - твердое в n-алканах C[23]H[48] и C[25]H[52]. Исследование методом порошковой рентгенографии новой слоевой упаковки в фазе V. Solid-solid phase transitions in n-alkanes C[23]H[48] and C[25]H[52]: X-ray power diffraction study on new layer stacking in phase V / Nozaki K., Higashitani N., Yamamoto T., Hara T. // J. Chem. Phys. - 1995. - 103, N 13. - С. 5762-5766. - Англ.

В диапазоне т-р 16-48 °С методом порошкового РСТА исследовано фазовое поведение нечетных n-алканов - n-трикозана и n-пентакозана. аблюдались фазовые переходы I-V-RJ для n-C[23]H[48] и I-V-IV-RJ для n-C[25]H[52], где I, V и IV являются низкот-рными упорядоченными фазами и RJ - это фаза ротатора. Методом Ритвельда определена крист. структура фазы V для n-C[25]H[52], к-рая имеет ромбич. симметрию (пр. гр. Rbmm, a 4,985, b 7,525, c 67,399 Å). В фазе V появляется новая молек. слоевая упаковка, тогда как структура сохраняется аналогичная фазе I (ромбич., пр. гр. Rbcm, a 4,971, b 7,463, c 67,250 Å).. Ttr.

X.1996,
N9

1995

F: C₂₃H₄₈

P: 1

9Б387. Фазовые превращения твердое - твердое в н-алканах C[23]H[48] и C[25]H[52]. Исследование методом порошковой рентгенографии новой слоевой упаковки в фазе V. Solid-solid phase transitions in n-alkanes C[23]H[48] and C[25]H[52]: X-ray power diffraction study on new layer stacking in phase V / Nozaki K., Higashitani N., Yamamoto T., Hara T. // J. Chem. Phys. - 1995. - 103, N 13. - С. 5762-5766. - Англ.

В диапазоне т-р 16-48 °С методом порошкового РСТА исследовано фазовое поведение нечетных н-алканов - н-трикозана и н-пентакозана. аблюдались фазовые переходы I-V-RJ для н-C[23]H[48] и I-V-IV-RJ для н-C[25]H[52], где I, V и IV являются низкот-рными упорядоченными фазами и RJ - это фаза ротатора. Методом Ритвельда определена крист. структура фазы V для н-C[25]H[52], к-рая имеет ромбич. симметрию (пр. гр. Pbnm, а 4,985, б 7,525, с 67,399 А). В фазе V появляется новая молек. слоевая упаковка, тогда как структура сохраняется аналогичная фазе I (ромбич., пр. гр. Pbcm, а 4,971, б 7,463, с 67,250 А).. Ttr.

X.1996, № 9

1995

Н-алканы

16 Б390. Критические температуры и плотности н-алканонов. Critical temperatures and densities of n-alkanones / Pulliam Mathlon K., Gude Michael T., Teja Aryn S. // J. Chem. and Eng. Data .— 1995 .— 40 , № 2 .— С. 455—458 .— Англ.

Измерены крит. т-ры и крит. плотности 24 н-алканонов, содержащих от 10 до 14 атомов углерода. Найдено, что исследованные н-алканоны термически неустойчивы при т-рах ниже их крит. т-р. Исследованы зависимости крит. т-р и крит. плотностей н-алканонов от числа атомов углерода, а также влияние положения карбонильной группы на крит. св-ва. Крит. т-ры изомерных н-алканонов возрастают, а крит. плотности уменьшаются с увеличением числа атомов углерода. Значения обоих крит. св-в н-алканонов с ростом числа атомов углерода приближаются к значениям крит. св-в соотв-щих н-алканов. Кроме того найдено, что крит. т-ры н-алканонов уменьшаются по мере перемещения положения карбонильной группы к центру углеродной цепи, в то время как крит. плотности фактически остаются постоянными. Предложены новые корреляции для крит. т-р и крит. плотностей н-алканонов. В. Ф. Байбуз

Кратитическ.
тем-ры

Х. 1995, N 16

C₃ ynefopopgr

1995

122: 144055g G2 ab Initio Calculations of the Enthalpies of Formation of C₃ Hydrocarbons. Rogers, Donald W.; McLafferty, Frank (Chemistry Department, Long Island University, Brooklyn, NY 11201 USA). *J. Phys. Chem.* 1995, 99(5), 1375-6 (Eng). The enthalpies of formation (ΔH_f°) of cyclopropatriene, cyclopropadiene, cyclopropene, cyclopropane, allene, and propyne are calcd. by the G2 method of J. A. Pople and co-workers (1989, 1991). The results are presented here in conjunction with recently published G2 values of ΔH_f° for propene and propane. The values of ΔH_f° for all eight compds. are 180.6, 120.8, 68.6, 13.2, 45.5, 44.9, 5.3, and -25.4 kcal mol⁻¹, resp. These results are discussed in light of exptl. measured ΔH_f° results, drawn from enthalpies of combustion and of hydrogenation, for all but the first two of the compds. named.

($\Delta_f H^\circ$)
propane

C.A. 1995; 122, N 12

Yuzefovych

1995

122: 223973h Ab-Initio Calculations and Semiempirical Corrections to Obtain Enthalpies of Formation of Hydrocarbons through Isodesmic Reactions. Selmi, Massimo; Tomasi, Jacopo (Scuola Normale Superiore, I-56100 Pisa, Italy). *J. Phys. Chem.* 1995, 99(16), 5894-8 (Eng). Problems are considered which arise in the application of ab initio methods on isodesmic reactions to obtain enthalpies of formation. The fraction of the correlation energy which is not conserved in isodesmic reactions is evaluated at second order in perturbation theory. This value may be approximated with interorbital pair contributions calcd. empirically as functionals of Hartree-Fock interorbital Coulomb interaction energies. The procedure proposed in this paper is based on a localized orbital picture and uses a few empirical parameters which are calcd. from an orbital invariant formulation of Moller-Plesset perturbation theory. The final results are in agreement with exptl. enthalpies of formation, the av. abs. error being <1.5 kcal/mol.

(A₁H)

ab initio
param

C.A. 1995, 122, N18

Углеродистые
и их галогенизированные

1995

(C_p/C_v)

125-286172d C_p/C_v ratio for hydrocarbons and their halogenated derivatives in a wide range of parameters of state. Verveiko, V. N.; Mel'nikov, G. A.; Melikhov, Yu. F.; Verveiko, M. V. (Kursk. Gos. Pedagog. Inst., Kursk, Russia). *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Energ. Ob'edin. SNG, Energ.* 1995, (3-4), 92-95 (Russ). The ratio $\gamma = C_p/C_v$ for some hydrocarbons and halo hydrocarbons was measured as a function of temp. and pressure in the temp. range 20 -150° and at pressures up to 600 MPa using acoustic techniques.

C. A. 1996, 125, n 22

Гнебгогогггг

1996

126: 298146g Analysis of a validation process for an empirical protocol to calculate the heats of formation of hydrocarbons. Castro, Eduardo A. (Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional La Plata, 1900 La Plata, Argent.). *Bol. Soc. Quim. Peru* 1996, 62(4), 239-243 (Span), Sociedad Quimica del Peru. A validation process for an simple empirical protocol to predict hydrocarbon enthalpies of formation from total electronic energies calcd. at an ab initio level is discussed. The anal. made with four reduced sets enables one to conclude that such a procedure is not totally satisfactory and it would be desirable to perform some sort of more general validation. The usefulness of these reduced fits to predict enthalpies of formation with a discrepancy degree similar to the exptl. uncertainties is pointed out.

(A+H)

C. A. 1997, 126, N 22

C₂₀H₄₂

1996

12Б372. Температурная зависимость структурных изменений в β_0 -фазе системы н-эйкозан/н-докозан. Вращательные переходы. Structural evolution versus temperature of the β_0 phase of the n-eicosane/n-docosane system: rotator transitions / Dirand M., Achour-Boudjema Z. // J. Mol. Struct.— 1996 .— 375, № 3 .— С. 243—248 .— Англ.

Орторомбическая фаза β_0 [н-C₂₀H₄₂/н-C₂₂H₄₆] (Fmmm) изоструктурна с орторомбической вращательной фазой β -RI (Fmmm), наблюдаемой в н-трикозане (н-C₂₀H₄₂), н-пентакозане (н-C₂₅H₅₂) и в двух бинарных системах: [н-C₂₂H₄₆/н-C₂₄H₅₀] и [н-C₂₄H₅₀/н-C₂₆H₅₄]. При росте т-ры соотношение b/a изменяется от 1,51 при 293К до 1,73 при 309К. Затем происходит переход к ромбоэдрической вращательной фазе α -RII (R $\bar{3}$ m) сразу под кривой солидуса. Эти наблюдения позволяют обобщить структурное поведение смесей двух н-алканов ($19 < n < 27$), с разницей в числе атомов углерода 1 или 2.

А. Н. Якушенко

(T_{±2})

X. 1997, № 12

Алканы

1996

16Б36. Термохимическая стандартная окружающая среда и аддитивность химических эксергий алканов / Кабо Г. Я., Говин О. В., Козыро А. А. // Докл. АН Беларуси. — 1996. — 40, № 6. — С. 67—71, 124—125. — Рус.; рез. англ.

Сформулированы принципы выбора параметров стандартной окружающей среды при расчетах хим. эксергии и предложено в качестве в-в отсчета использовать продукты сгорания в калориметрических опытах по определению энтальпии сгорания. На основе предложенной модели окружающей среды рассчитаны хим. эксергии алканов в различных агрегатных состояниях и изучена возможность аддитивных расчетов хим. эксергии по различным аддитивным схемам: с классификацией по типам связей и по групповым инкрементам и взаимодействиям. Приведенные аддитивные постоянные позволяют получить удовлетворительное согласование с экспериментальными величинами эксергий. Показано, что при аддитивных расчетах эксергий нет необходимости в специальном учете чисел симметрии молекул.

Х, 1997, № 16.

Угнетогорода

1996

126: 268699x Molecular connectivity in the determination of physical properties. Semwal, R. P.; Balodi, J. P. (Dep. Chem., SGR-R(PG) College Dehradun, Dehra Dun, 248001 India). *MATCH* 1996, 34, 207-214 (Eng), Max-Planck-Institut fuer Strahlenchemie. The mol. connectivity was used to develop polynomials of the form $y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n$ for the predicting boiling and m.p., densities, and refractive indexes of normal hydrocarbons. These properties of the systems detd. by the polynomials were very close to their exptl. values. For the correlations corresponding to each phys. property the statistical parameters, correlation coeffs., std. errors, F values, and sums of squares of residues were detd. Except the m.ps. of small mols., in most cases the error was less than 1%.

(T_b , T_m
прекраснее)

С. А. 1997, 126, N 20

Угневоегодо

1996

Теплодир /
cf. 6a

125: 231753p Use of the theory of graphs for calculating the thermodynamic properties of hydrocarbons. Smolyakov, V. M.; Papulov, Yu. G.; Polyakov, M. N.; Vinogradova, M. G.; Talyzin, I. V.; Saltykova, M. N.; Lantseva, O. V. (Tverskoi Gosudarstvennyi Universitet, Tver, Russia). *Zh. Fiz. Khim.* 1996, 70(5), 795-800 (Russ). The principles of constructing topol. indexes (graph invariants) and their use in quant. structure-property correlations are discussed. A graph-theoretic interpretation of the Platt scheme is given, and new formulas for calcg. the thermodyn. properties of alkanes are suggested. The enthalpies of formation are calcd. in various approxns.

CA 1996, 125, w18

Угневорож

1996

125: 97270y Enthalpies of vaporization of some mono- and polycyclic hydrocarbons. Varushchenko, R. M.; Pashchenko, L. L.; Druzhinina, A. I. (Moskovskii Gosudarstvennyi Universitet, Moscow, Russia). *Zh. Fiz. Khim.* 1996, 70(2), 228-231 (Russ). Enthalpies of vaporization (VE) of 1,1,4-trimethylcycloheptane, cis, cis-cyclooctadiene-1,5, 1-ethylnortri-cyclo(2,2,1,0^{2,6})heptane, spirocyclopropane-1,6-tricyclo(3,2,1,0^{2,4})octane, and tetracyclo(6,2,1,0^{2,7},0^{3,5})undecane were detd. calorimetrically. Temp. dependence of the satd. vapor pressure of trans-1,2-divinylcyclobutane was detd. ebulliometrically, and the VE, std. boiling temp., and crit. parameters were calcd.

(Dr H)

C. A. 1996, 125, N 8

Циклические
углеводороды

Om. 39401

1997

David W. Ball[†]

A+H g. mol. struct. (Theochem)
1997, 417, 107-115

Density functional calculations on the heats of formation of cyclic hydrocarbons.

Yrnelopogon

1997

(ab initio
param
 $\Delta_f H$)

128: 159470m Improved simple protocols to calculate hydrocarbon enthalpies of formation from ab initio total energies. Castro, Eduardo A. (Dep. de Quim. Fac. de Ciencias Exactas, CEQUINOR, UNLP, 1900 La Plata, Argent.). *Comput. Chem. (Oxford)* 1997, 21(5), 305-308 (Eng), Elsevier Science Ltd.. An extension of previous simple protocols to convert Hartree-Fock ab initio electronic energies for hydrocarbons to precise enthalpies of formation is given. The multilinear regression procedure resorts to the use of quadratic relations involving the no. of carbon and hydrogen atoms and mol. total energies calcd. at the 6-31 G* basis set level as independent variables. Results are somewhat better than those obtained via linear equations. Some special features regarding the energy range comprising the $\Delta_f H^\circ(g)$ values and the very different nature of the chosen set of 65 compds. are discussed in order to assess the value of these improved simple protocols.

CA. 1998, 128, NB

ARKER

1997

128: 145954k Application of an improved simplified scheme of atom equivalents to calculate heats of formation of alkenes. Castro, Eduardo A.; Gavernet, Luciana; Firpo, Mariano (Departamento de Quimica, CEQUINOR Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, C.C. 962, 1900 La Plata, Argent.). *Acta Chim. Slov.* 1997, 44(3), 327-333 (Eng), Slovenian Chemical Society. An improved simplified scheme of atom equiv. to calc. heats of formation is applied to a set of 35 alkenes. Theor. results are compared with available exptl. data and a satisfactory enough agreement is found. This finding makes up a valid support of the method and stimulates new applications for other types of mols.

($\Delta_f H$)

C.A. 1998, 128, N12

$C_{24}H_{50}$

1997

Chickos J.S.,
Wilson J.A.

(ΔHr) J. Chem. and Eng. Data
1997, 42, N 1. C. 190-197.

(see. ● $C_{21}H_{44}$; 1)

$C_{25}H_{52}$

1997

Chickos J. S.,
Wilson J. A.

(ΔH_v) J. Chem. and Eng. Data
1997, 42, N1.C. 190-197.

(cell  $C_{21}H_{44}$; I)

C₂₃H₈

1997

Chickos J. S.,
Wilson J. A.

(ATHv) J. Chem. and Eng. Data
1997, 42, N1. C. 190-197.

(cell, ● C₂₁H₄₄; I)