

C₃



C.3

G. Glockler

1954

J. Chem Phys 1954, 22, 159

Расчет по I приближ. молекулярной
модели

$$\omega_1 = 1071, \quad \omega_2 = 353, \quad \omega_3 = 1980$$
$$P = 5, \quad C-C = 1,29 \text{ \AA}$$

Значения функций не
приводятся

11956

C3

mp 99 g/cm³
90 3000°K

Still D.R. Since G.C.
The Thermodynamic Properties
of the Elements.

Расчет проведен по оценкам
молекулярных постоянных
взятых у Глоккера (1954)

$T^{\circ}K$	$H_T^{\circ} - H_{298,15}^{\circ}$	S_T	ϕ_T	$H_{298}^{\circ} - H_0^{\circ} = 2541$
298	0	55,18	46,657	
500	2249	60,91	53,330	
1000	8650	69,71	58,519	
1500	15610	75,34	63,239	
2000	22780	79,47	66,809	
2500	30070	82,72	69,676	
3000	37400	85,39	72,076	

$$\phi_T = S - \frac{H_T^{\circ} - H_{298,15}^{\circ} + 2541}{T}$$

$C_1, C_2,$
 C_3

Pitzer K.S., Clement E 1959

J. Am. Chem. Soc., 1959, 81, 4477

Большие молекулы в парах
углерода.

и.ф. C взят у Rossini 1953, C_2 - Гордон 1937
с наибольшими поправками в Σ , 3Σ и Π ,
эти энергии недавно были определены.

C_3 - в работе Flockler 1954, но авторы пере-
считали, изменив $r=5$ на $r=1$; $\nu_1=1300$, $\nu_2=500$,
 $\nu_3=2200$, $\nu_4=1281$

Ошибки в C_3 - 0,5 ккал/моль.град. Все ост. C_4 , C_5 и т.д.
интерполированы

T°K	$\frac{C_p}{T}$		
	C_1	C_2	C_3
2000	42,215	56,39	61,82
2500	43,334	58,27	64,59
3000	44,251	59,82	66,93
3500	45,029	61,22	68,95
4000	45,707	63,35	70,73

$\frac{C_p}{T}$	$\frac{C_p}{T}$		
	C_1	C_2	C_3
47,223	64,532	71,03	
48,353	66,470	72,25	
49,287	68,147	73,89	
50,090	69,569	82,18	
50,798	70,764	84,14	

T°K	$\frac{H^\circ - H^\circ_0}{T}$			
	C_1	C_2	C_3	
2000	4,39	5,014	8,14	12,21
2500	4,74	5,019	8,20	12,66
3000	5,01	5,036	8,33	12,95
3500	5,22	5,062	8,35	13,23
4000	5,40	5,092	8,41	13,41

C₃

из рун
до 1000°K
до 1000°K

Wachman H., Utevsky M.,
Lyon R.

1960

J. Chem. Eng. Data, 1960, 5, 456
Равновесный хим. состав
и к-д. св-ва смеси углерод-
воздух при высоких темп.

Ост. сист. X^1Z по Mulliken
(гаст. сообщ. 1959) по аналогии
с CO_2 . Угнетение
возбужд. взаимодейств со сист.

1960

С₃ Wachman H., Unevsky M., Lyon R.

Т.Ф.

J. Chem. Eng. Date, 1960, 5, 456

4000-10000°K

Р

равновесный хим. состав и термодинамические свойства смеси углерод-воздух при высоких температурах.

см. N

1961

 $C_3(g)$

Lewis G., Randall M.,
Pitzer K., Brewer L

T. p.
vapor

Thermodynamics, Vol II

Zweites $G_f = H_0 / T$

quer $T = 298, 75, 500, 1000, 1500, 2000 K$

$H_{298} - H_0 \quad \Delta H_0$

1962

С₃

Цурьев Н.В. и др.

наз

Москва, 1962

т. ф.

Периодическое издание
А-ва индивидуальных
вещей.

| B90-5192-III | 1962

C₃

Kroepelin H., Kipping D. E.,
Pietruck H.,

(P)

(ср. $\underline{\underline{II}}$ e_1, e_2)

C3(293)

McBride B. u.g.p.

1963

Thermodynamic properties...
NASA SP-3008, Washington, 1963

$M = 36,033$; $\sigma = 2$; $p_u = 1$
 $V_i(d_i): 1300, 550(2), 2200$

$I_A = -$

$I_B = 6,539 \cdot 10^{-39}$

$I_C = -$

	CP	4-H	SI
298.15	9,3883	2319,0	50,6880
3000	14,6438	38941,1	79,8412
60.00	14,8372	83256,0	90,0729

is

energy

Weltner W., McLeod D.

J. Chem. Phys., 1964, 40, 1305 (N.5)

Спектроскопия паров углерода,

состоящего из молекул в магнитном

поле при 4° и 20°K. II.

С помощью метода C^{13} полученынекоторые значения ν_2 для изотопов ^{12}C $\nu_1' = 1125 \text{ см}^{-1}$ $\nu_2' = 505 \text{ см}^{-1}$ $\nu_3' = ?$ (^{13}C) $\nu_1'' = 1325$ $\nu_2'' \approx 40 \text{ см}^{-1} (?)$ $\nu_3'' = 2040 \text{ см}^{-1}$ Для молекул $O-O$ определено $f = 7.10^{-4} (\text{кг})$

2 мб.

Т.е. C_2 , температура при осн. давлении 70, 1235
и 2200, и поперечный сечение, р. к. с
самым высоким осн. масс. спектром. C_2 сечение
Дробовика - 17. 54% (C_2 , осн.) = 205 и сечение,
 C_2 по сечению осн. и C_2 сечение по сечению: 186,7 ± 1,5.
Всё поперечное сечение по сечению осн.,
и C_2 $V_2 \approx 500$ (кач. с сечением осн.)

C_3 (ray)

YANAF

1965

T. ϕ .

100 - 6000°K

C₃

[BФ-M 1200]

1966

Nagarajan G.

(T.g.φ.) Z. Naturforsch., 1966, 21a,
N3, 244-51.

1966

10 Д110. Молекулярные постоянные и термодинамические функции некоторых линейных симметричных молекул. Nagajan G. Molecular constants and thermodynamic functions of some linear symmetrical molecules. «Acta phys. austriaca», 1966, 21, № 4, 355—365 (англ.)

Проведен анализ колебательной структуры линейных трехатомных молекул C₃, Si₃, Ge₃ и XeF₂. Молекулярные константы этих молекул известны из расчетов электронных волн. ф-ций, а также из спектральных данных. Ряд колебательных характеристик молекул (средне-квадратич. амплитуды колебаний связанных и непосредственно не связанных атомов) рассчитан для т-р 0,298 и 500° К. Для тех же самых т-р рассчитаны величины укорочения связей; обусловленного наличием деформаций колебаний (эффект укорочения Бастиансена—Морино). Для 4 изученных молекул на основании полученных данных вычислены стандартные термодинамич. ф-ции, при этом молекула моделировалась колеблющимся ротором.

159 - 11945

ф. 1966. 107

X

1966

C₃
 (g)
 S

Third-law entropy of C₃. A. G. Robiette and H. L. Strauss (Univ. of California, Berkeley). *J. Chem. Phys.* 44(7), 2826-7 (1966)(Eng). The third-law entropy of C₃ was calcd. using the more recently observed bending frequency of $\sim 60 \text{ cm}^{-1}$ instead of the previously assumed value of 550 cm^{-1} . This detailed calcn. takes into account the considerable quartic anharmonicity of the bending vibration. The total entropy predicted is $S_{2400^\circ} = 82.1 \text{ e.u.}$, which differs from pressure measurements by 5 or 6 e.u. This discrepancy is much larger than the expected exptl. errors.

R. M. Rutledge

C.A. 1966. 64. 13
 18519g - 18520a

7Б658. Энтропия C_3 найденная по третьему закону.
Robiette A. G., Strauss H. L. Third-law entropy of
 C_3 . «J. Chem. Phys.», 1966, 44, № 7, 2826—2827 (англ.)

C_3
энтропия

Проведенный ранее (РЖХим, 1960, № 16, 64229) расчет термодинамич. функций углерода в парах при использовании частоты изгибающих колебаний $\omega = 550 \text{ см}^{-1}$ привел к согласованию рассчитанной по 3-му закону величины энтропии S для C_3 с эксперим. данными. Новое эксперим. определение, $\omega = 60 \text{ см}^{-1}$ приводит к большому расхождению термодинамич. функций, вычисленных из спектроскопич. данных, с экспериментальными. В работе приведены результаты уточненного расчета $S(C_3)$ при 2400° K с учетом ангармоничности колебаний; получено по 3-му закону $S_{2400}^0 = 82,1$ энтр. ед., что на 5—6 энтр. ед. выше величины S_{2400}^0 , найденных из измерения p методом Кнудсена (РЖХим, 1957, 17, 56 780) и из масс-спектрометрич. измерений (РЖХим, 1960, № 17, 68 350). Учет ангармоничности колебаний сближает эксперим. и рассчитанные величины S_{2400}^0 на $\sim 3,5$ энтр. ед.

В. Колесов.

х. 1967. 7

C₃

article 2146

1967

26476t Thermodynamics of C₃. II. General methods for nonrigid molecules at high temperature. Herbert L. Strauss and Everett Thiele (Univ. of California, Berkeley). *J. Chem. Phys.* 46(7), 2473-80(1967)(Eng); cf. *CA* 64:18519g. A classical expression is developed for the partition function of the coupled bending and rotational degrees of freedom of a linear triat. mol. The usual rigid-rotator harmonic-oscillator partition function can be derived as an approxn. to this result. Anal. approxns. to both the bending-rotator and the rigid-rotator partition functions for a mol. with a quadratic-quartic potential are considered and the accuracy of these approxns. is assessed by numerical calcs. Values for the thermodynamic functions for C₃ are calcd. by using the best available spectroscopic data.

C, A: 1967: 67: 6

For the bending and rotational degrees of freedom, quantum corrections are negligible at temps. above a few hundred degrees while anharmonicity and vibration-rotation coupling are quite important. For example, at 2400°K., a quartic term in the potential of C₃ lowers the calcd. value of S^0 by 2.8 entropy units (e.u.), and the vibration-rotation coupling lowers it by another 1.1 e.u. to a computed value of 81.4 eu. A drastic steepening of the potential gives a lower limit, more or less consistent with the spectroscopic data, of 79.8 e.u. The best exptl. values for S^0_{2400} are 76 or 77 e.u.

RCJQ

(C₃)
(Ideal gas)
100-6000°K
(1969) -

JANAF
Thg

1971

$C_3(g)$

1973

Barin I., et al

m.g.p.

more I, emp. 120

298-4000

● 1 cu AgF/I

30511.6133

Ch, TE, Ph

C₃

T. g. p. 35247

15-1188
X

Hansen C. Frederick, Pearson Walter E.

A quantum model for bending vibrations
and thermodynamic properties of C₃.

"Can. J. Phys.", 1973, 51, N 7, 751-
760

(см. C₃; III)

(англ., рез. франц.) в III

85В 860

862 0869 ДИК ВИНТИ

C₃

1973

Franklin, G. G.; Green, J. H. S.

7. gop. Chem. Thermodyn. 1975, 1, 285-316.

Смативен. стеног прачена...

(св. H₂O; II)

C₃

Pearson W.E.

1973

103942f New thermodynamic functions for the C₃ molecule. Pearson, W. E.; Davy, W. C. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, Calif.). AIAA J. 1973, 11(8), 1207-8 (Eng). The values of the thermodyn. functions C_p/R , S/R , H/RT , and G/RT (C_p is heat capacity, S entropy, H total enthalpy, G Gibbs free energy, R gas const.) were calcd. for C₃ [12075-35-3] mol. in gas phase by using a square-well potential and statistical mech. methods. Formulas are given by which these quantities can be calcd. as functions of abs.k temp. T .

C_p/R , S/R , H/RT

G/RT .

Ilkayr.

C.A. 1975. 82 N16

Tyburcy I.B.

C₃(2)

1982

Pan Kratz L.B.

Thermodynamic Properties
(298-3000) of Elements and Oxides
USA Bur. Mines Bull. 672.

● (y Megbegeha)

C₃

1983

Zaitsev A.A., Timoshkin V. S.

непрерыв. Изв. Высш. Учебн.
Физмат. Забл., Физ. 1983, 26
(1), 3-6.

(см. H_2O ; II)

C3

1985

102: 138681d Application of the Bogolyubov inequality to the calculation of thermodynamic functions of molecules with low-frequency anharmonic deformation oscillations. Demin, S. N.; Zaitsev, A. A. (Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Khim. Khim. Tekhnol.* 1985, 28(1), 117-19 (Russ). The Bogolyubov inequality was used to calc. the entropies of C₃ mol. at 400-5000 K. The calcd. values are compared to the literature data.

методика

φ-и

400 - 5000K)

использованы

C.A. 1985, 102, N16.

Термодинам. ф-лы

Мол-л

1985

C_3

13 Б3010. Применение неравенства Боголюбова к расчету термодинамических функций молекул с низкочастотными ангармоническими деформационными колебаниями. Демин С. Н., Зайцев А. А. «Изв. вузов. Химия и хим. технол.», 1985, 28, № 1, 117—119

Предложен вариационный метод расчета термодинамических функций, основанный на использовании неравенства Боголюбова. Проводится сравнение рассчитанной энтропии для молекулы C_3 с лит. данными.

Резюме

Х. 1985, 19, № 13