

C₂H₃

C_2H_3 (2)
(ΔfH)

~~1974~~
43-IV-ТХВ

Медведев В.А.

Энтальпия образования радикала C_2H_3 /г/,
8 с.

1946

Je-82 Al C_2H_5 , C_2H_3

Stearie E. W. R.,

"Atomic and Free Radical
Reactions", New York, 1946

Me-88

Dist C_2H_3

1847

Laidler K. Y.,

J. Chem. Phys., 1947, 15, 712

C_2H_3 (ΔF_f , S) 524-V

1951

Bryant W.M.

J. Polymer Sci., 1951, 6, 359-70

Free energies of formation of
hydrocarbon free radicals. I. Application
to the mechanism of polythene synthesis

C.A., 1951, 5015h

W.M.

Me-81

1851

Alf C₂H₃
Stevenson D.P.,

Disc. Faraday Soc., 1951, 10, 113

(Ducray)

I

ΔH_f (SH, CH₃C, C₂H₅S) 672^a - 1403 1952

Franklin J.L., Lumpkin H.E.

J. Am. Chem. Soc. 1952, 74, 1023-6.

"Some C-S, H-S, and S-S bond strengths
by the electron-impact method".

C.A., 1952, 5379C

M, W

C₂H₃

0
✓p

4040 - IV - BP

1953

$C_2H_3^+$, C_2H_3 (Hf), C_2H_4 (Do), C_2H_3 (I)

Field F.H.

J.Chem.Phys., 1953, 21, 1506-10

Electron-impact studies ...

J, M

4040

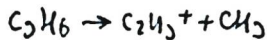
Alt C_2H_2 ^{coll.} IV 1953.
 $D(C_2H_3 - H) = 122$

Field F.H.,

J. Chem. Phys., 1953, 21, 1506

Углеводороды с-цепей вольфрам-углерод

У 8 с-с углевод. А. Р. Оуэнс-Уолл Phys. Rev., 153, 561, 256



13,82 ± 0,1

14,6 ± 0,2

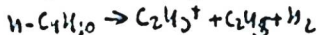
Zeigler, Rieckner



14,04 ± 0,1

14,2 ± 0,1

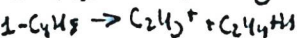
Kusch, Kusch, Tate, Phys. Rev. 152, 52, 87



14,61 ± 0,1

14,2 ± 0,2

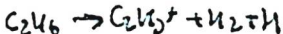
Stevenson, Kippel JACS, 1942, 64, 1589



~~15,34 ± 0,1~~ 15,34 ± 0,1

~~14,2 ± 0,2~~ 14,2 ± 0,2

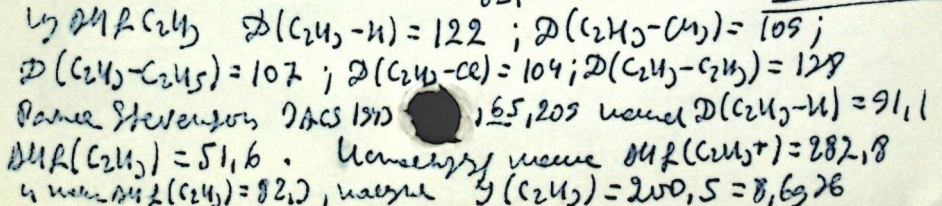
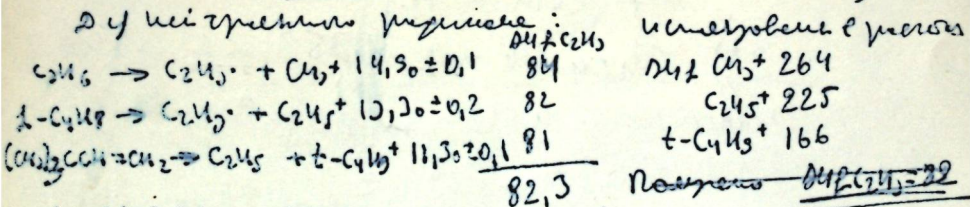
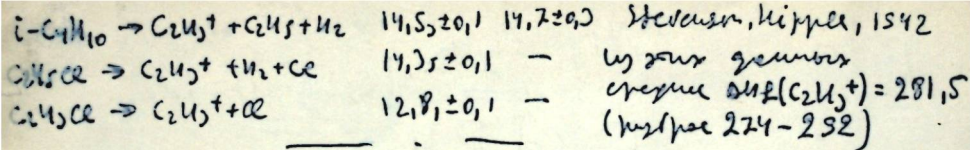
Stevenson JACS, 1942, 65, 203



15,34 ± 0,1

15,2 ± 0,2

Stevenson, Kippel 1942



4038 - IV - BP

~~4038~~

1959

C₂H₃ (HF), C₂H₄ (D)

Lampe F.W., Field F.H.,

J. Amer. Chem. Soc., 1959, 81,

N 13, 3238-3241

Распад неопентана под ...

M, J

В 90 - 4039 - IV

1960

C_2H_3
винил

ΔH_f

1Б75. Исследование свободных радикалов с помощью масс-спектрометра. XVII. Ионизационный потенциал и теплота образования радикала винила. Harrison A. G., Lossing F. P. Free radicals by mass spectrometry. XVII. Ionization potential and heat of formation of vinyl radical. «J. Amer. Chem. Soc.», 1960, 82, № 3, 519—521 (англ.).—На масс-спектрометре определен потенциал ионизации (ПИ) радикала винила (C_2H_3), а также потенциал появления (ПП) ионов $C_2H_3^+$, образующихся при ионизации этилена. Радикалы C_2H_3 получались при термич. разложении метилвинилтрет-бутила и направлялись в ионизационную камеру ионного источника. ПИ и ПП определялись методом

см. и/об

х.1961.1

экстраполяции разностей энергии электронов, соответствующих одному значению ионных токов, определенных при сравнении кривых появления ионов $C_2H_3^+$ и Kr^+ . ПИ C_2H_3 , равен $9,45 \pm 0,05$ эв. ПП $C_2H_3^+$ равен $14,00 \pm 0,10$ эв. Если ион $C_2H_3^+$ из C_2H_4 не возбужден, то из полученных данных и $\Delta H_f(C_2H_4) = 12,5$ ккал/моль следует, что $\Delta H_f(C_2H_3) = 65 \pm 3$ ккал/моль и $\Delta H_f(C_2H_3^+) = 283 \pm 3$ ккал/моль. На основании последней величины вычислены следующие энергии диссоциации (в ккал/моль, с точностью ± 3 ккал/моль): $D(C_2H_3-H) = 105$, $D(C_2H_3-CH_3) = 92,5$, $D(C_2H_3-C_2H_3) = 104(\pm 6)$, $D(C_2H_3-Cl) = 85,5$, $D(C_2H_3-Br) = 73,4$, $D(C_2H_2-H) = 41$. Полученные величины $\Delta H_f(C_2H_3)$, $D(C_2H_3-H)$ и $D(C_2H_3-Cl)$ подтверждают оценки этих величин Шварцем (Szwarc M., Chem. Revs, 1950, 47, 75). Указаны возможные причины получения рядом авторов высоких значений $D(C_2H_3-H)$ (вплоть до 122 ккал/моль). Сообщение XVI см. РЖХим, 1960, № 15, 60640. Е. Франкевич

C_2H_3
(ΔH_f)

Collin 7 8

1962

Bull. Soc. Chim. Belg, 1962, 71, 15-2
15:31

Покуп и диноу мох-а моковод-
гермекими оаекроном

V Азедилет и дрилен.

C_2H_2 III

7617-IV

1962

C , C_2 , CH , C_2H , CH_3 , C_2H_3 , CH_4 , C_2H_4 ,

C_2H_6 , CH_2 , C_2H_2 (t.d.f.)

Duff R.E., Bauer S.H.

J.Chem.Phys., 1962, 36, 117,
1754-1767

Equilibrium composition ...

J.M.

C_2H_3

Mortimer C. T.

1962

ΔH

Oxford - London - New York - Paris,
Pergamon Press, 1962, XII (ann.)

Reaction. heats and bond strengths.

Based on a series of lectures given to
postgraduate students at a Uni-
versity of Keele, 1960.

(see CH_3)

C_2H_3

Wada G.

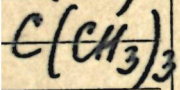
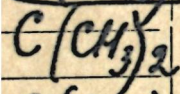
1965

D-5

Фиссертауи.

(NHf)

Масс спектрометрич.
исследование



ΔH_f



Панулов Ю. Т.

1967

М. Общ. Химии,

1967, 34, 26, 1191.

(см. все) I

ВФ - 8371 - XIV

1968

 C_2H_3 ΔH_f
S

21 Б864. Изучение пиролиза пропилена методом ударных волн. Кинетика разрыва винил-метильной связи. Chappel G. A., Shaw H. A shock tube study of the pyrolysis of propylene. Kinetics of the vinyl-methyl bond rupture. «J. Phys. Chem.», 1968, 72, № 13, 4672—4675 (англ.)

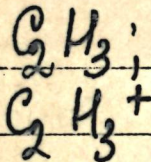
Исследовался пиролиз пропилена при 1100—1650° К за время р-ции ~1 мсек в ударной волне. Определена константа скорости мономол. распада по винил-метильной связи $k = 10^{16,1} \exp(-85,800/RT)$ сек⁻¹. Для определения этой величины были вычислены начальные концентрации метил- и винил-радикалов (ВР) из спектроскопич. данных. Энергия диссоциации винил-метильной связи при 298° К равна 88 ± 2 ккал. Энтальпия образования ВР при 298° К равна 61 ± 2 ккал/моль. Если принять, что константа скорости взаимодействия CH_3 с ВР 10^{10} л·моль⁻¹·сек⁻¹, энтропия ВР при 298° К равна 55 ± 4 кал·моль⁻¹·град⁻¹.

Резюме

X. 1969. 21

XIV-359

1971



y,

 ΔH_f

(91338h) Free radicals by mass spectrometry. XLIII. Ionization potentials and ionic heats of formation for vinyl, allyl, and benzyl radicals. Lossing, Frederick P. (Div. Chem., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, Ont.). *Can. J. Chem.* 1971, 49(3), 357-62 (Eng).



(+3) III

(+1) I

C.A., 1971, 44, 18.



1981

 C_2H_3

8 Д315. Масс-спектрометрия свободных радикалов. XLIII. Потенциалы ионизации и теплоты образования винил-, аллил- и бензилрадикалов. Lossing E. P. Free radicals by mass spectrometry. XLIII. Ionization potentials and ionic heats of formation for vinyl, allyl, and benzyl radicals. «Can. J. Chem.»; 1971, 49, № 3, 357—362 (англ.)

(y)

Кривые эффективности ионизации свободных радикалов, образующихся в результате пиролиза подходящих соединений, получены на установке, включающей электростатич. селектор для монокинетизации электронного пучка и масс-фильтр для регистрации выхода ионов. Получены потенциалы ионизации радикалов (в эв): 8,95 — винил; 8,07 — аллил и 7,27 — бензил, что заметно ниже известных значений и соответствует теплотам образования (в ккал/моль): 266 и 59,6 ($C_2H_3^+$ и C_2H_3); 226 и 40 ($C_3H_5^+$ и C_3H_5); 213 ($C_7H_7^+$). Г. А. Вомпе

685-11X

ф. 1971. 82

+2 I

+2 II

X

$C_2H_3; C_2H_3^+$

XIV-359

1971

17 B713. Масс-спектрометрия свободных радикалов.
XLIII. Потенциалы ионизации и теплоты образования
ионов винильного, аллильного и бензильного радикалов.
Lossing F. P. Free radicals by mass spectrometry.
XLIII. Ionization potentials and ionic heats of formation
for vinyl, allyl, and benzyl radicals. «Can. J. Chem.»,
1971, 49, № 3, 357—362 (англ.)

С использованием метода и аппаратуры, описанных
ранее (Maeda K. и др., Intern. J. Mass. Spectry. Ion.
Phys., 1968, 1, 395), определены потенциалы ионизации
свободных радикалов: винильного (8,95), аллильного
(8,07) и бензильного (7,27 эв). Определены также потен-

ΔH_f

X. 1971. 17.

● (+1) I (+3) III



циалы появления ионов $C_2H_3^+$ и $C_3H_5^+$. Из полученных данных найдены теплоты образования: $\Delta H^{\circ}(\text{обр.}, C_2H_3^+) = -266$, $\Delta H^{\circ}(\text{обр.}, C_3H_5^+) = 226$, $\Delta H^{\circ}(\text{обр.}, C_2H_3) = 59,6$ и $\Delta H^{\circ}(\text{обр.}, C_3H_5) = 40$ ккал/моль. Полученное в данной работе значение потенциала ионизации для бензильного радикала отличается от значения, найденного методом фотоионизации (7,63 эв). Обсуждены возможные причины расхождений. С использованием лит. значения $\Delta H^{\circ}(\text{обр.}, C_6H_5-CH_2) = 45$ ккал/моль и значения потенциала ионизации 7,27 эв найдено $\Delta H^{\circ}(\text{обр.}, C_6H_5-CH_2^+) = 213$ ккал/моль. Пред. сообщ. см. РЖХим, 1970, 22Б138.

М. Туркина

24 Б1473. Фотореакции небольших органических молекул. I. Масс-спектрометрическое изучение винилхлорида, винилфторида и 1,1-дифторэтилена в вакуумной ультрафиолетовой области. Reinke D., Kraessig R., Baumgärtel H. Photoreactions of small organic molecules. I. Mass-spectrometric study of vinylchloride, vinylfluoride and 1,1-difluoroethylene in the vacuum ultraviolet. «Z. Naturforsch.», 1973, 28a, № 6, 1021—1031 (англ.)

На установке, состоящей из электронного синхротрона (источник вакуумного УФ-света), вакуумного монохроматора и квадрупольного масс-спектрометра, зарегистрированы кривые эффективности ионизации (КЭИ) винилхлорида (I), винилфторида (II) и 1,1-дифторэтилена (III) с образованием молек. и основных осколочных ионов в интервале энергий фотонов 10—23 эв. Работа проводилась на германском электронном синхротроне DESY (Гамбург) с энергией электронов 7,5 Гэв. При электронном токе 30 ма интенсивность светового излучения 600 А составляла 10^7 фотон/сек·А. На основании КЭИ определены Пт ионизации (ПИ) I—III и Пт появления осколочных ионов. Эти данные использованы для расчета теплот образования ΔH (ккал/моль), энергий связи D (ккал/моль) и ПИ (эв) свободных радикалов. Благодаря применению синхротронного излучения с непрерывным спектром удалось

получить лучшее разрешение КЭИ по сравнению с лит. кулы N_3 . Приведены значения интенсивностей, оцененных по десятибалльной шкале, длины волн, волновые числа и отнесение квантов спектра молекулы N_3 . Проведено отнесение полос к колебательным компонентам электронных переходов ${}^2\Sigma \rightarrow {}^2\Pi$, ${}^2\Delta \rightarrow {}^2\Pi$ и ${}^2\Phi \rightarrow {}^2\Delta$. Впервые рассчитаны молек. постоянные состояний: ${}^2\Sigma$: X_{22} ($-4,9 \pm 0,5$ см $^{-1}$), ω_2 (297 ± 20 см $^{-1}$) и ω_2'' (205 ± 20 см $^{-1}$).

24 Б1468. Кинетическое исследование основного состояния атомов серы с помощью методики импульсного фотолиза в сочетании с регистрацией резонансной флуоресценции. IV. Константы скорости реакций $S(^3P)$ с пропеном и 1-бутеном. Klemm R. B., Davis D. D. A flash photolysis-resonance fluorescence kinetics study of ground-state sulfur atoms. IV. Rate parameters for reaction of $S(^3P)$ with propene and 1-butene. «Int. J. Chem. Kinet.», 1973, 5, № 3, 375—384 (англ.)

Методика импульсного фотолиза ($1640 < \lambda < 2600$ А) с регистрацией резонансной флуоресценции используется для измерения абс. констант скорости реакций атомов $S(^3P)$ с пропеном (I) и 1-бутеном (II). Источником резонансного излучения (λ 1826, 1820 и 1807 А) служит СВЧ-разряд в смеси 1% $H_2S + 99\%$ He. Под воздействием фотоимпульса в смеси $COS + I$ (или II) + Ag возникает $10^{10} - 10^{11}$ см $^{-3}$ атомов $S(^3P)$. Флуоресценция атомов, возбужденных источником, регистрируется фотодетектором в режиме счета.

1973

640-5005-11

(+5)

X

X. 1973

N 24

данными. На основании данных для Γ получены след.
 т. е. одинамич. оценки: $\Delta H_f(C_2H_3^+)$ 264 ± 2 ; ПИ
 (C_2H_3) $8,7 \pm 0,1$; $D(C_2H_3-H)$ 104 ± 2 ; $D(C_2H_3-Cl)$ $87 \pm$
 ± 2 ; $\Delta H_f(C_2H_2^+)$ 315 ± 2 . Структура КЭИ и данные
 фотоэлектронной спектроскопии показывают, что фраг-
 ментация $I+h\nu \rightarrow C_2H_3^+ + Cl + e$, начинающаяся в обла-
 сти между 2-м и 3-м ПИ I, происходит не в результа-
 те прямой ионизации, а вследствие автоионизации.
 Совпадение найденной величины $\Delta H_f(C_2H_2^+)$ с
 соотв-щей величиной для иона $C_2H_2^+$, образованного
 из ацетилена, показывает, что в процессе $I+h\nu \rightarrow$
 $C_2H_2^+ + HCl + e$ образуется ион ацетиленовой струк-
 туры, т. е. в переходном состоянии атомы H и Cl от-
 шепляются от соседних атомов C. При изучении II
 получено: $\Delta H_f(CH_2CF^+)$ $232,6$; $\Delta H_f(C_2H_3^+)$ 271 (вели-
 чина, большая — полученной в опытах с I, вероятно,
 из-за колебательного возбуждения ~ 6 ккал/моль иона-
 продукта р-ции $II+h\nu \rightarrow C_2H_3^+ + F + e$; $D(C_2H_3-F)$
 111 ± 3 ; $\Delta H_f(C_2HF^+)$ $288,4$ (ион образуется в процессе
 $II+h\nu \rightarrow C_2HF^+ + H_2 + e$ без энергии возбуждения и име-
 ет, видимо, структуру $HCCF^+$, а не $HFCC^+$); ΔH_f
 $(C_2H_2^+)$ $348,5$ (эта величина выше значения $317,2$, най-
 денного в опытах с I, что объясняется наличием энер-
 гии активации (< 31 ккал/моль) в процессе отщепле-
 ния HF от C_2H_3F). Показано, что в процессе $I+h\nu \rightarrow$
 $C_2H_2F^+ + H + e$ отщепление H происходит из группы
 CHF. Совпадение максимумов $\sim 16,6$ эв на КЭИ для II
 с образованием $C_2H_3F^+$ и $C_2H_2F^+$ показывает, что эти
 ионы образуются путем автоионизации одного и
 того же возбужденного молек. состояния. В опытах с
 III получено: $\Delta H_f(CH_2CF^+)$ равно $235,3$ (совпадает
 с данными для II, что указывает на отсутствие коле-
 бательного возбуждения ионов CH_2CF^+ , обра-
 зующихся из II и III); $\Delta H_f(CH_2CF_2^+) \leq 496,5 \pm 2$;
 $\Delta H_f(C_2H_2^+)$ равно $322,2$ (на 5 ккал/моль выше, чем при
 фотоионизации C_2H_2 ; это можно объяснить тем, что
 ион имеет структуру H_2CC^+ , а не $HCCN^+$; образует-
 ся он путем отщепления атома F из первично образо-
 ванного иона CH_2CF^+); $\Delta H_f(CF_2) = -20,1$; ПИ (CF_2) -
 $9,74$; $D(CH_2=CF_2) \leq 152$; $\Delta H_f(CH_2CF^+) - 312$ (отличает-
 ся на 25 ккал/моль от величин, полученных в опытах с
 I и II, вероятно, из-за необходимости энергии активаци-
 ции для р-ции $III+h\nu \rightarrow CH_2CF^+ + HF + e$; в этой р-ции
 образуется ион CH_2CF^+ ацетиленовой структуры);
 $\Delta H_f(CH_2F^+) - 200$; $\Delta H_f(CH_2F) - 11$; ПИ $(CH_2F) - 9,16 \pm 0,02$;
 ПИ $(CF) - 9,24$. Процессы $III+h\nu \rightarrow CF^+ + CH_2F + e$ и
 $III+h\nu \rightarrow CH_2F^+ + CF + e$, по-видимому, происходят из
 одинаковых переходных состояний. Обсуждается струк-
 тура КЭИ I—III с образованием молек. ионов в связи
 с процессами диссоциативной ионизации. Отмечено, что
 с ростом энергии фотонов в области выше 20 эв про-
 исходит медленный спад сечения фотоионизации. Ана-
 логичный спад полного сечения поглощения наблюдался
 ранее в спектрах поглощения углеводородов.

C₂H₃

* 15578

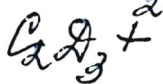
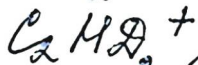
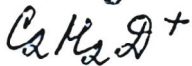
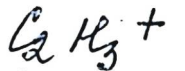
1976

Bischof P.

(ΔHf)

"J. Amer. Chem Soc."
1976, 98, N 22, 6844-49

1977



Rosenstock H. H. et al

J. Phys. Chem. Ref. Data,

1977, 6. Suppl. Vol, p 1-96,
1-99

T. G. CB-ba

C_2H_3

номер 6736

1978

Khalil S. M., et al.

сиринг

ΔH_f

Z. Naturforsch., 1978,
A. 33(6), 722-730

50116.4729
Ex-AR/BAT-z,
Ma, Ch, TC

$C_2H_3^+$ 96559 (K) ₀₂

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.).

249 255

273

0201000

ВИНИТИ

C_2H_3^+

acc. 29132

1988

Zha Q., Nishimura T.,
et al.

AP, ΔH_{298}^0 ; Int. J. Mass. Spectrom.
and Ion. Process.,
1988, ● 83, N 1-2, 1-12.

C_2H_3

1989

Cao J. R., Zhang J. M.,
et al.

Chem. Phys. 1989, 138
(2-3), 377-82.

(ΔH_f)

(corr. C_2H_3T ; I)

C_2H_3 (?)
винилиден

1989

23 Б3056. Модель RRKM для диссоциации C_2H_4 :
теплота образования винилидена. RRKM model of
 C_2H_4 dissociation: heat of formation of vinylidene. /
Kiefer J. H., Sidhu S. S., Kumaran S. S., Irdam E. A. //
Chem. Phys. Lett.— 1989.— 159, № 1.— С. 32—34.—
Англ.

Расчеты с использованием модели RRKM эксперим.
данных для р-ции в ударной трубе $M + C_2H_4 \rightarrow C_2H_2 +$
 $+ H_2 + M$ дали для барьера диссоциации величину $85 \pm$
 ± 2 ккал/моль, из к-рой для синглетного винилидена
получено $\Delta_f H^\circ(298) \leq 99 \pm 2$ ккал/моль. По резюме

$\Delta_f H^\circ$

Х. 1989, № 23

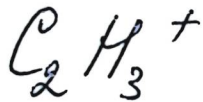
C_2H_3

1989

Wodtke Alec M.,
Hintsa Eric J. et al.

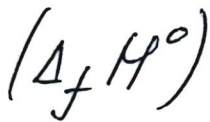
(ΔH_f) *Isr. J. Chem.* 1989, 29(4),
383-91.

($\bullet$ $C_2H_3 - Br$; $\bar{I}$)



1992

Blush Joel A.,
Chen Peter.



J. Phys. Chem. 1992,
96 (11), 4138-40.

(see. C_2H_3 ; II)

C_2H_3

1996

Kaiser E.W., Wallington T.J.,

J. Phys. Chem., 1996, 100,
N 10, C. 4111 - 4119.

Кинетика реакции атомов
хлора с $CaH_2(K)$ и $C_2H_2(K_2)$

Р.А.Х. N 23, 1996,

23-5414

CaH₃

[Om. 39642a¹¹]

1999

(ΔH_f)

Edmond P. F. Lee,
Timothy F. Wright,
J. Phys. Chem. 1999,
A103, 721 - 726