

C_5H_{12}

C_5H_{12}

1951.

Beattie J. A.

"J. Chem. Phys"

1951, 19 N 7

948-9

p;
Кратчайш.
ностр.

5-
7495-
chq1

Бранд и др.

1953

C_5H_{12}
ПЕНТАН

Bryden J.W.; Walen N., Canjar L.N.
Chem. Eng. Progr. Symposium Ser. 49,
No. 7; Appl. Thermodynamics 1953, 151
Термодинамические свойства
пентана

Термод.
свойства

Таблицы Терм. свойств углерода
и водородного пентана
100 - 570 °F и 10 - 3000 lb/sq. in.

C. A. 1954-20808

Опр
Изопентан

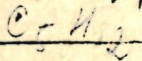
C₅H₁₂
t° кип.

Вохра, Роб. | 1959

Vohra Surinder Pal,
Robt Kenneth A.
J. Chem. and Engng Data,
1959, 4, N°4, 329-330.

Объемные свойства и
критические констан-
ты изопентана.

Х-60-19-76427.



D_0

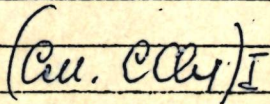
Chikara H.

1964

Shinoda M.

"Bull. Chem. Soc. Japan,"

1964, 37, N1, 125-131



C₅H₁₂
(CH₃)₂CHCH₂CH₃

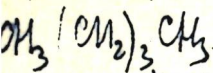
1967

8 Б736. Термодинамические свойства углеводородов. Часть III. Изопентан. Das T. R., Kuloor N. R. Thermodynamic properties of hydrocarbons: part III — isopentane. «Indian J. Technol.», 1967, 5, № 2, 46—51 (англ.)

Критический обзор работ по определению термодинамич. св-в изопентана. На основании литературных данных выбраны наиболее надежные значения критич. постоянных и вычислены термодинамич. св-ва изопентана. В интервале t -р 298,16—460,40° K табулированы давление паров и уд. объемы (V), энтропии (S) и энтальпии (H) насыщ. жидкости и пара. В интервале t -р 298,16—600° K для давлений от 0,9 до 300 атм табулированы V , H и S изопентана. Приведена T — S -диаграмма. Указывается, что имеется хорошее согласие между вычисленными и экспериментальными P — V — T -данными. Библ. 31. Часть II см. пред. реф. 8Б735.

В. Байбуз

X. 1968 - 8



1967

 $\Delta H, \Delta S$

26452g Thermodynamic properties of hydrocarbons. III. Isopentane. T. R. Das and N. R. Kuloor (Indian Inst. Sci., Bangalore). *Indian J. Technol.* 5(2), 46-51(1967)(Eng); cf. preceding abstrs. The entropy and enthalpy of isopentane have been computed for the temp. range 298.16-1500.0°K. and for the pressure range 0.9-1000 atm. A temp.-entropy diagram based on the data is presented. 31 references. RCFW

C.A. 1967 67 6

C_5H_{12}
 C_nH_{2n+2} C_nH_{2n+2}

17 Б796. Измерения теплоты сгорания в калориметре для сожжения газов. Часть 4. n-пентан, изопентан, неопентан. Pilcher G., Chadwick J. D. M. Measurements of heats of combustion by flame calorimetry. Part 4. n-Pentane, isoPentane, neoPentane. «Trans. Faraday Soc.», 1967, 63, № 10, 2357—2361 (англ.)

В калориметре, описанном ранее (РЖХим, 1964, 18Б367) определены теплоты сгорания ΔH^0 (сгор.), газообразных изомеров пентана при $t = 25^\circ$ и давл. в 1 атм. Найдено, что для n-пентана (I) (чистота 99,87%), изопентана (II) (чистота 99,99%) и неопентана III (чистота $99,982 \pm 0,012\%$) ΔH^0 (сгор.) составляет $844,99 \pm 0,23$, $-843,31 \pm 0,22$ и $-839,88 \pm 0,23$ ккал/моль соответственно. Из найденных значений ΔH (сгор.) вычислены стандартные теплоты образования ΔH (обр.), I, II, III, равные $-35,16 \pm 0,24$; $-36,84 \pm 0,23$ и $-40,27 \pm 0,24$ ккал/моль соответственно. Приводится обсуждение теплоты изомеризации по методу энергий связи Аллена. Часть III см. РЖХим, 1965, 23Б475. Н. Илларионов

2. 1968. 17

пентан,
изопентан,

1964

103332x Measurements of heats of combustion by flame calorimetry. IV. n-Pentane, isopentane, neopentane. G. Pilcher and J. D. M. Chadwick (Univ. Manchester, Engl.). *Trans. Faraday. Soc.* 63(10), 2357-61(1967)(Eng); cf. *CA* 62: 13937c. The heats of combustion of the isomeric pentanes have been measured in the gaseous state at 25° and 1 atm. in a flame calorimeter: ΔH_c° (pentane, g) = -844.99 ± 0.23 , ΔH_c° (isopentane, g) = -843.31 ± 0.22 , and ΔH_c° (neopentane, g) = -839.88 ± 0.23 kcal./mole. These results were used to derive the heats of formation of each of the pentanes. The heats of isomerization of the pentanes have been discussed in terms of the Allen bond-energy scheme. 17 references. RCTD

ΔH_c

C.A. 1964. 67. 22

1968

 C_5H_{12}

2 Б696. Термодинамические свойства углеводородов. Часть XII. Неопентан. Das T. R., Kuloor N. R. Thermodynamic properties of hydrocarbons. Part XII. Neopentane. «Indian J. Technol.», 1968, 6, № 3, 65—69 (англ.)

 C_5H_{12}

р, ср
(обзор)

Дан краткий обзор работ по исследованию термодинамич. св-в неопентана. Приведены крит. постоянные и ур-ния давления паров и теплоемкости перегретого пара. Вычислены, в интервале т-р 282, 66—600° К для давл. от 1 до 400 атм табулированы уд. объемы, энтропия и энтальпия жидкого и газообразного неопентана. На основании полученных данных построена и приведена $T-S$ -диаграмма. Часть XI см. РЖХим, 1968, 16Б797. В. Ф. Байбуз

2. 1969. 2

C_5H_{12}
(неопентан)

крист.
суп-ра

Ruedman R.,
Post B.

1968

Molec. Crystals,

5, N1, 95

(Lit. CCl₄) I

1969

C₅H₁₂
Neopentane

61820j. Thermodynamic properties of neopentane from 4°K to the melting point and comparison with spectroscopic data.

T. Chiba

Di

Cp

Enokido, Hisae; Shinoda, Takako; Mashiko, Yoichiro (Ind. Res. Inst., Tokyo, Japan). Bull. Chem. Soc. Jap. 1969, 42 (1), 84-91 (Eng). Heat capacities, latent heats, and vapor pressures of solid and liq. neopentane were measured and the following values were obtained; heat of transition = 628.7 ± 0.3 cal./mole, T (transition point) = $140.498 \pm 0.05^\circ\text{K.}$, heat of fusion = 740.0 ± 0.3 cal./mole, T (triple point) = 256.750°K. and P

C.A. 1969. 70. 1

(triple point) = 268.47 ± 0.13 torr. The amt. of impurity in the sample after purification was estd. from a plot of the equil. temp. vs. the reciprocal of the fraction melted. From the result the impurity present was found to be 0.003₂ mole %. Despite the high purity, C_p value in the region below the m.p. increases unexpectedly with temp. This is interpreted as an effect of formation of vacancies in the crystals. The enthalpy required to form vacancies was estd. to be 3240 ± 220 cal./mole from the anal. of the heat capacity curve in the region below the m.p. The molal entropy of the ideal gas at the b.p., calcd. from the calorimetric data, was 71.24 ± 0.3 e.u. To bring this value into agreement with the value calcd. from the ir and Raman frequencies and the moments of inertia, the assumption of 3 equal potential energy max. of 4.4 kcal./mole for hindered internal rotation of the Me groups is required.

RCQC

C₅H₁₂

Ср,
Р, ΔH_m

ж. 1969. 15

1969

15 Б822. Термодинамические свойства неопентана от 4° К до точки плавления и сравнения их со спектроскопическими данными. Enokido Hisae, Shinoda Takako, Mashiko Yo-ichiro. Thermodynamic properties of neopentane from 4° K to the melting point and comparison with spectroscopic data. «Bull. Chem. Soc. Japan», 1969, 42, № 1, 84—91 (англ.)

Измерены теплоемкость, скрытые теплоты и давление пара твердого и жидкого неопентана. Получены значения: теплота превращения $628,7 \pm 0,3$ кал/моль; т-ра превращения $140,1498 \pm 0,05^\circ \text{K}$; теплота плавления $740,0 \pm 0,3$ кал/моль; т-ра тройной точки $-256,750^\circ \text{K}$; давление пара в тройной точке 268,47 мм. Количество загрязнений, определенное из зависимости т-ры плавления

ния от доли расплавленного в-ва, составляло 0,0032 мол.%. Наблюдалась аномалия C_p вблизи точки плавления, интерпретированная как образование вакансий с теплотой образования 3240 ± 220 кал/моль; концентрация вакансий в тройной точке равна 0,69 мол.%. Энтропия в тройной точке, из калориметрич. данных, составляет $71,24 \pm 0,3$ энтр. ед. Для согласования этого значения с вычисленным из ИК- и Романовских частот и момента инерции необходимо предположить существование трех максимумов потенциала (4,4 ккал/моль), препятствующего свободному вращению метильных групп.

Резюме

1969

 $(CH_3)_4C$

(p)

64410g Vapor pressure-isotope effect in neopentane. Hoepfner, Arno; Parekh, N. (Univ. Heidelberg, Heidelberg, Ger.). *Naturwissenschaften* 1969, 56(7), 369 (Ger). The vapor pressure of Me_4C was compared to that of Me_3CD_3C , prepd. from *tert*-BuCl and CD_3MgBr . A reverse vapor pressure isotope effect was shown (W. A. van Hook, 1966). Its value was 10% higher immediately below the triple point of Me_3CD_3C (-16.9° at 238.4 mm. Hg) as compared to its value immediately above the triple point of Me_4C (-16.34° at 266.9 mm. Hg). The shape of the vapor pressure isotope effect curve was in accord with the significant structure theory (H. Eyring and R. P. Marchi, 1963).
BTJG

C.A. 1969. 71. 14

1969

C_5H_{12}

Siedler R.,
Bittlich H. Y.

p

J. prakt. Chem.,

311, ~5, 721

$[Cu (C_2H_5)_2 NH] I$

N 576

1970

 $C(CH_3)_4$

22 Б842. Теплоемкости и термодинамические свойства глобулярных молекул. XV. Бинарная система тетраметилметан — тетрахлорметан. Chang, Elfreda T., Westrum Edgar F., Jr. Heat capacities and thermodynamic properties of globular molecules. XV. The binary system tetramethylmethane-tetrachloromethane. «J. Phys. Chem.», 1970, 74, № 12, 2528—2538 (англ.)

Методом адиабатич. калориметрии при т-рах 5—300° К измерены теплоемкости смесей $C(CH_3)_4$ — CCl_4 , содержащих 0,200; 0,334; 0,501; 0,666 и 0,826 мол. долей CCl_4 . По значениям теплоемкости рассчитаны величины S_0^0 и H_0^0 — H_0^0 . Для всех составов определены термодинамич. характеристики фазовых превращений, включая плавление. Построена фазовая диаграмма системы $C(CH_3)_4$ — CCl_4 для 120—260° К. Сообщ. XIV см. РЖХим, 1966, 5Б670.

Н. А. Попов

Cp

X-1970

22

+1

X

17 Б674. Энтальпии сгорания и образования изомер-
ных пентанов. Good W. D. The enthalpies of combusti-
on and formation of the isomeric pentanes. «J. Chem.
Thermodyn.», 1970, 2, № 2, 237—244 (англ.)

В калориметре с платинированной бомбой при 25° из-
мерены энтальпии сгорания ΔH_1 жидк. n-пентана (I),
2-метилбутана (II) и 2,2-диметилпропана (III). I сжи-
гали в тонкостенных стеклянных ампулах (ТА), III в
жестких ампулах (ЖА), II в ТА и ЖА. Массу образца
определяли по кол-ву CO_2 , поглощенного LiOH. Кол-во
примесей в образцах I, II и III 0,05; 0,05 и 0,003 мол.%,
соотв. ΔH_1 каждого соединения определяли в серии из
7 опытов. Вычислены энтальпии образования I, II и III
в жидк. (ΔH_2) и газ. (ΔH_3) состоянии. Результаты сопо-
ставлены с лит. данными, полученными методом пламен-
ной калориметрии. Вычислены наиболее достоверные
значения энтальпий сгорания жидк. (ΔH_4) и газ. (ΔH_5)
I, II и III, а также энтальпий образования этих соедине-
ний в жидк. (ΔH_6) и газ. (ΔH_7) состоянии. Далее приве-

C_5H_{12}

(исследования)

$\Delta H_{\text{сгор.}}$

ΔH_f

X. 1970. 17

дены: соединение, ΔH_1 , ΔH_2 , ΔH_3 , ΔH_4 , ΔH_5 , ΔH_6 , ΔH_7 в ккал/моль: I; $-838,69 \pm 0,16$; $-41,46 \pm 0,18$; $-35,07 \pm 0,18$; $-838,68 \pm 0,11$; $-845,07 \pm 0,11$; $-41,47 \pm 0,14$; $-35,08 \pm 0,14$; II; $-837,57 \pm 0,20$; $-42,58 \pm 0,20$; $-36,55 \pm 0,20$; $-837,39 \pm 0,11$; $-843,42 \pm 0,11$; $-42,76 \pm 0,14$; $-36,73 \pm 0,14$; III; $-834,71 \pm 0,14$; $-45,44 \pm 0,16$; $-40,09 \pm 0,16$; $-834,66 \pm 0,12$; $-840,01 \pm 0,12$; $-45,49 \pm 0,15$; $-40,14 \pm 0,15$. Полученные результаты сопоставлены с энтальпиями образования газ. I, II и III, вычисленными по методу Аллена (ΔH_8). Отмечено хорошее согласование ΔH_8 с ΔH_7 и, особенно, с ΔH_3 . Справочные данные Американского Нефтяного института хуже согласуются с ΔH_8 .

И. Васильев

C₅H₁₂

H₀^o - H

Lenoir J. M., et al. 1970

J. Chem. Eng. Data,
1970, 15, 1, 23.

(Cu. H₂O) I

C₅H₁₂

1971

CH₃(CH₂)₃CH₃

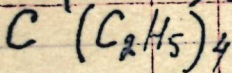
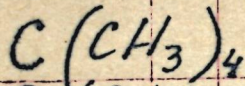
19 Б762. Изохорная теплоемкость n-пентана в гетерогенной области. Амирханов Х. И., Алибеков Б. Г., Вихров Д. И., Мирская В. А., Левина Л. Н., Антонов В. А. «Газ. дело. Науч.-техн. сб.», 1971, № 5, 31—35

Получены т-рные кривые зависимости теплоемкости n-пентана в двухфазной области от т-ры при различных уд. объемах, даны эмпирич. ф-лы, описывающие ход теплоемкости на линии насыщения с точностью до 1%.

Резюме

Ср

X. 1971. 19



Ср

Маслова В. А.

Рабинювич И. В.

"Пр. по физики и хим.
технол." (горючий)

1974, вып. 1(36) 40-63

(см $\text{Cd}(\text{CH}_3)_2$; 7)

1974

$C(CH_3)_4$

Маслова В. А.

1974

Период. ф. хим.

$T_{вз}$, $\Delta H_{вз}$ —

ΔH_v

„Теплоемкость, фазовые переходы и термодинамические функции. Алканы и их соединения в переходных состояниях.“

Труды по хим. и хим. технологии. 1974, кн. 1 (36)

C₅H₁₂

1973

✓ 2 Б777. Теплоты испарения некоторых дейтерированных неопентанов. Höpfer A., Papekh N., Höpfer Ch. Heats of vaporization of some deuterated neopentanes. В сб. «Шестая Всес. конф. по калориметрии, 1973. Расшир. тезисы докл.» Тбилиси. «Мецниереба», 1973, 180 (англ.)

Теплоты испарения ΔH (исп.) жидк. и тв. неопента-

ΔH_v

2. 1974

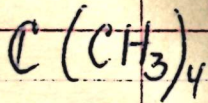
N2



нов CMe_4 , $\text{CMe}_3\text{CH}_2\text{D}$, CMe_3CD_3 , $\text{CMe}_2(\text{CD}_3)_2$, $\text{CMe}(\text{CD}_3)_3$ и $\text{C}(\text{CD}_3)_4$ определены из измерений давл. пара и изотопного эффекта в области t -р от -60 до 20° . Установлены типичные различия для жидк. и тв. неопентанов. ΔH (исп.) жидк. неопентанов зависит от t -ры, и изотопный эффект пропорционален содержанию дейтерия. Тв. фаза подвержена сильному влиянию симметрии молекул. Изотопный сдвиг теплоты испарения тв. неопентанов, в отличие от жидк. образцов, не имеет линейной зависимости вдоль указанной серии, проявляя максимум для $(\text{CH}_3)_3\text{CD}_3\text{C}$. Этот изотоп имеет максим. асимметрию по сравнению с другими частично дейтерированными неопентанами. Эта асимметрия не влияет на термодинамич. св-ва жидкости, вследствие возможной компенсации за счет расширения квазирешетки. В тв. фазе размеры решетки определяются ср. диаметрами вращающихся молекул. Поэтому термодинамич. изотопный эффект, вызванный заторможенным вращением, будет сильнее для асимм. частиц в тв. состоянии.

И. Васильев

7975



(p)

16 Б880. Давление пара и изотопный эффект дейтерированных неопентанов. Höpfer A., Parekh N., Hörner Ch., Abdel-Hamid A. Der Dampfdruck—Isotopie—Effekt von deuterierten Neopentanen. «Ber. Bunsenges. phys. Chem.»; 1975, 79, № 2, 216—222 (нем.; рез. англ.)

В области т-р от -60 до $+20^\circ$ измерены давл. насыщ. пара неопентана (I) и шести дейтерированных неопентанов: $C(CD_3)_4$ (II), $C(CH_3)(CD_3)_3$ (III), $C(CH_3)_2(CD_3)_2$ (IV), $C(CH_2D)_4$ (V), $C(CH_3)_3(CD_3)$ (VI), $C(CH_3)_3(CH_2D)$ (VII). Значения т-р тройных точек составили $-16,46 \pm 0,02^\circ$, $-18,66$, $-18,06$, $-17,52$, $-17,17$, $-17,06$ и $-16,64^\circ$ для I—VII соотв. Давл. пара I выше и ниже тройной точки описано уравнениями: $\lg P_I = -1479,5678/T + 8,316096 + 0,3050606 \lg T - 0,003356855T$

X 1975 N 16

и $\lg P_I = -804,9409/T - 21,872223 + 12,578140 \lg T - 0,01187659 T$. Изотопный эффект II—VII описан двух-параметровым уравнением $\ln Q = \ln(P_d/P_I) = A/T + B/T^2$, коэф. к-рого A и B для тв. II—VII составили соотв.: 31,08 и —1343, 23,53 и —1040, 17,16 и —1129, —3,25 и 2944, 11,66 и —1343, 2,55 и —163; для жидк. II—VII соотв. 16,61 и 1511, 13,00 и 996, 8,81 и 626, 4,73 и 716, 4,18 и 383, 1,03 и 195. Во всей области исследованных т-р II—VII проявляют обращенный изотопный эффект ($P_d > P_I$). Обсуждается зависимость давл. пара и энтальпии испарения от степени дейтерирования I.

Ж. Василенко

C5 H₁₂

1975

14 Б831. Некоторые термодинамические свойства жидкого н-пентана. Кирьяков Б. С., Мельников Ю. Ф. «Науч. тр. Курск. гос. пед. ин-т», 1975, 57(150), 191—195

С использованием методов сравнительного расчета и эксперим. измерений скорости звука как функции давл. и плотности вычислены термодинамич. св-ва (плотность ρ , изотермич. β_T и адиабатич. β_S сжимаемости и отношение теплоемкостей γ) жидк. н-пентана в интервале давл. 0—2000 атм при т-рах 30, 40, 60, 80, 100 и 120°. Результаты вычислений табулированы с шагом в 100 атм. Отмечено, что точность вычисления ρ , β_T , β_S и γ составляет 0,2; 2,0; 0,6 и 2,0% соотв. Установлено, что полученные результаты хорошо согласуются с лит. данными.

П. М. Чукуров

т. г. св-ва

X1976 N14

С 5 Н 12

1975

13 Б898. Термодинамические свойства циклопентана в состоянии насыщения. Лагуткин О. Д., Куропаткин Е. И., Соколова Л. А. «Изв. высш. учеб. заведений. Нефть и газ», 1975, № 12, 56, 64

Произведен расчет мол. объема насыщ. пара V'' циклопентана (I) с помощью известной зависимости коэф. сжимаемости от приведенной t -ры для дифтордихлорметана, к-рый выбран в кач-ве эталонного в-ва. Найдены также отсутствующие в лит-ре значения плотности кипящей жидкости ρ' на линии насыщения. Зависимости ρ' I от t -ры и давл. пара от приведенной t -ры описаны интерполяц. ур-ниями. Расчет произведен в интервале t -р от -10 до $+238,6^\circ$ и давл. от 0,08 до 46,2 ат. Проверка точности использованного метода расчета ρ' сделана по значениям теплот парообразования I, к-рые вычисляли по ур-нию Клапейрона — Клаузиуса. Показана надежность примененного метода расчета V'' I с помощью эталонного вещества.

И. Е. Филич

расчет
объема
насыщ.
пара

X 1976 N 13

C5M12

1975

Paudey J. D., et al.

Indian J. Phys., 1975,
49, N11, 869-72.

(cp)

(encl. C4, I)

C_5H_{12}

1975

C_6H_{14}

11 Б1178. Дифференциальный термический анализ при высоком давлении. IV. Низкотемпературный ДТА переходов в твердой фазе и переходов твердая фаза — жидкость некоторых углеводородов до 3 кбар. Würflinger A. Differential thermal analysis under high pressure IV: Lowtemperature DTA of solid—solid and solid—liquid transitions of several hydrocarbons up to 3 kbar. «Ber. Bunsenges. phys. Chem.», 1975, 79, № 12, 1195—1201 (англ.; рез. нем.)

Описан прибор для изучения термич. св-в в-в методом ДТА в интервалах т-р от -200 до $+150^\circ$ и давл. до 3000 бар. В указанных интервалах определены т-ры фазовых переходов углеводородов в зависимости от давления. Полученные значения т-р табулированы с шагом 500 бар. Далее следуют отриц. значения ($^\circ C$) т. пл. и имеющихся переходов в тв. фазе при давл. 1 бар: изопентан 160° , пентан 130° , гексан 96° , гептан $90,5^\circ$, октан 57° , нонан $53,5^\circ$, $55,5^\circ$, декан 30° , метил-

метод
ДТА
(Тм)

X 1986 n 11

циклогексан 126°, циклопентан 95°, 135°, 151°, 2,2-диметилбутан 99,5°, 131,5°, 147°, циклогексан —6,5°, 87°, 2,3-диметилбутан (I) 129°, 138°, 140°, 160°, 169°. Указано, что I имеет эндо- и экзотермич. переходы. Отмечено влияние четности кол-ва атомов С алкана на его т. пл. С использованием уравнения Клапейрона—Клаузиуса и лит. данных определены и табулированы величины dT/dp и изменения объема ΔV при фазовых переходах изученных углеводородов. Последние величины сравнены с лит. данными. Сообщ. III см. РЖХим, 1975, 15Б1022. Ж. Василенко

60210.1267

41197

1975

Ch, Ph, TC

 C_5H_{12} (кнп) ΔH_s

2778

Shipman Lester L., Burgess Antony W.,
Scheraga Harold A. Lattice energies
and heats of sublimation at 0 K for n-
pentane, n-hexane, n-octane, and ammonia.
"J. Phys. Chem.", 1976, 80, N1, 52-54

(англ.) (ссыл. NH_3 ; I)

531

533

1 3

0547 пмк ВИНТИ

C5H12

1977.

11 Б599. PVT-поверхность и термодинамические свойства изопентана. Das Tagun R., Reed Charles O., Jr, Eubank Philip T. PVT surface and thermodynamic properties of isopentane. «J. Chem. and Eng. Data», 1977, 22, № 1, 9—15 (англ.)

т. дин.
св-ва

На основании крит. анализа лит. данных выбраны рекомендованные значения теплофиз. св-в жидк. изопентана (I) и его паров в интервале т-р от т. кип. 301,025° К до крит. т-ры. Крит. параметры I: 460,39° К, 33,37 атм., 0,236 г/см³, 306 см³/моль; тройная точка 113,25° К. Давл. пара I описано ур-нием $\lg P(\text{атм}) = -22,67065 - 2152,74/T - 6,26784 \lg T + 1401,44 P/T^2$. Плотность насыщ. жидкости ρ_{SL} г/см³ описана ур-нием вида (1) (см. пред. реф.), константы к-рого ρ_L , A, B и T_L составили ниже 313,15° К соотв.: 0,436608, -222,67908 · 10⁻³, 174,07786 · 10⁻³ и 393,15; выше 313,15° К: 0,236, 177,23429 · 10⁻³, -368,34325 · 10⁻⁴ и 460,39. Плотность насыщ. пара I ρ_{SV} г/см³ описана ур-нием $(\rho_{SL} + \rho_{SV}) = 0,4733 + 0,5478 (\rho_{SL} - \rho_{SV})^3$. Для этого же т-рного интервала рассчитаны и табулированы с шагом 10° теплоты испарения I, уд. объемы, энтальпии и энтропии обеих фаз в насыщ. состоянии. Вычислены коэф. ур-ния состояния I. Рассчитаны и табулированы в интервале т-р 310—600° К и давл. до 300 атм коэф. сжимаемости и термодинамич. функции I.

А. Кисилевский

х. 1977. № 11

C-H (неопентан)

1977

C₅H₁₂

11 Б600. PVT-поверхность и термодинамические свойства неопентана. Das Tarun R., Reed Charles O., Jr, Eubank Philip T. PVT surface and thermodynamic properties of neopentane. «J. Chem. and Eng. Data», 1977, 22, № 1, 16—21 (англ.)

P-V-T

На основании крит. анализа лит. данных выбраны рекомендованные значения теплофиз. св-в жидк. неопентана (I) и его пара в интервале т-р от т. кип. 282,628° К до крит. точки. Крит. параметры I: 433,75° К, 31,545 атм, 0,232 г/см³, 311 см³/моль; тройная точка 256,6° К. В указанном интервале т-р давл. пара I аппроксимировано ур-нием $\lg P(\text{атм}) = 19,91110 - 1882,58/T - 5,41156 \lg T + 1191,74 P/T^2$. Плотность насыщ. жид-



X. 1977. № 11

жости ρ_{SL} описана ур-нием $\rho_{SL} = (\rho_L + A\theta + B\theta^2) (1,0 + 1,0\theta + 0,25\theta^3)$, где $\theta = (1 - T/T_L)^{1/3}$, коэф. к-рого ρ_L , A , B и T_L ниже $333,15^\circ \text{K}$ равны $0,36846$, $-150,25991 \cdot 10^{-3}$, $174,35930 \cdot 10^{-3}$ и $403,15$; выше $333,15^\circ \text{K}$ соотв.: $0,232$, $168,87266 \cdot 10^{-3}$, $-295,71804 \cdot 10^{-4}$ и $433,75$. Плотность насыщ. пара I $\rho_{sv} \text{ г/см}^3$ рассчитывалась по ур-нию $(\rho_{SL} + \rho_{sv}) = 0,4629 + 0,702 (\rho_{SL} - \rho_{sv})^3$. Для этого же т-рного интервала рассчитаны и табулированы с шагом 10° теплоты испарения I, уд. объемы, энтальпии и энтропии обеих фаз в состоянии насыщения. Вычислены коэф. ур-ния состояния I. Коэф. сжимаемости и термодинамич. функции газ. I табулированы в интервале т-р $290-600^\circ \text{K}$ и давл. до 400 атм.

А. Кисилевский

C₅H₁₂

1977

7 11 Б598. PVT-поверхность и термодинамические свойства н-пентана. Das Tarun R., Reed Charles O., Jr, Eubank Philip T. PVT surface and thermodynamic properties of n-pentane. «J. Chem. and Eng. Data», 1977, 22, № 1, 3—9 (англ.)

теплот.
св-ва

На основании крит. анализа лит. данных выбраны рекомендованные значения теплофиз. св-в жидк. н-пентана (I) и его пара в интервале т-р от т. кип. 309,19° K до крит. точки. Крит. параметры I: 496,65° K, 33,25 атм., 0,237 г/см³ и 304 см³/моль; тройная точка 143,429° K. Давл. пара I в указанном т-рном интервале описано уравнением $\lg P(\text{атм}) = 17,30698 - 1971,73/T - 4,39306 \lg T + 997,021 P/T^2$. Плотность насыщ. жидкости ρ_{SL} г/см³

Х. 1977. № 11

описана ур-нием $\rho_{SL} = (\rho_L + A\theta + B\theta^2) (1,0 + 1,0\theta + 0,25\theta^3)$ (1), где $\theta = (1 - T/T_L)^{1/3}$, константы к-рого ρ_L , A , B и T_L составили ниже $323,15^\circ \text{K}$ соотв.: $0,595813$, $-229,94902 \cdot 10^{-3}$, $184,65129 \cdot 10^{-3}$ и $403,15$; выше $323,15^\circ \text{K}$: $0,237$, $171,98351 \cdot 10^{-3}$, $-312,45442 \cdot 10^{-4}$ и $469,65$. Плотность насыщ. пара I ρ_{sv} г/см³ со станд. отклонением $7 \cdot 10^{-4}$ описана ур-нием $(\rho_{SL} + \rho_{sv}) = 0,4713 + 0,4401 \cdot (\rho_{SL} - \rho_{sv})^3$. Для этого же т-рного интервала рассчитаны и табулированы с шагом 10° энтальпии испарения I, уд. объемы, энтальпии и энтропии обеих фаз в насыщ. состоянии. Рассчитаны коэф. ур-ния состояния I. Коэф. сжимаемости и термодинамич. функции газ. I табулированы в интервале т-р $310-600^\circ \text{K}$ и давл. до 700 атм.

А. Кисилевский

C_5H_{12}

1978

Летухов и др.

p

Рук. деп. ВНИИМЧ, 1978, 18, с.,
исл., библиогр., 10 набв.



(исл. C_4H_{10} ; I)

C_5H_{12} Коммиса 9479 | 1980

(2, насыщ. м.) Paunovic R, et al.

(P, ΔH_v
Vapor) High Temp. - High Press,
1980, 11, 519-528

Пентам (а)

1982

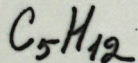
C5 H12

96: 130864c Experimental study of the thermophysical properties of superheated n-pentane. Mulyukov, R. R.; Pavlov, P. A. (Otd. Fiz. Tekh. Probl. Energ., Sverdlovsk, USSR). *Teplofiz. Vys. Temp.* 1982, 20(1), 49-53 (Russ). A method is described for detn. of thermal cond., heat capacity (C_p), and $(\partial T/\partial p)$, of superheated liq. pentane [109-66-0]. In the metastable state, the properties of superheated pentane weakly depend on pressure, the expected anomalous properties near the spinodal are not displayed.

(G)

. C. A. 1982, 96, N16

n - pentane (21)



1982

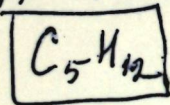
(Cp)

97: 151682c Heat capacity of metastable (superheated) liquids. Pavlov, P. A.; Mulyukov, R. R. (Ural. Nauchn. Tsentr., Sverdlovsk, USSR). *Teplofiz. Vys. Temp.* 1982, 20(4), 785-7 (Russ). A method was developed for the calcn. of the heat capacities of substances with spinodal isochores. Calcd. data for *n*-pentane are compared to the exptl. values.

(panem)

C.A. 1982, 97, N 18.

И - переман



термодинам
сп-ил

1982

197: 12162v Determination of parameters of model potentials of intermolecular interactions of n-alkanes based on experimental data on isochoric heat capacity. Abdulagatov, I. M.; Alibekov, B. G. (Inst. Fiz., Makhachkala, USSR). Zh. Fiz. Khim. 1982, 56(5), 1162-5 (Russ). The potential energy parameters for C_nH_{2n+2} ($n = 5-10$) were detd. from exptl. data on isochoric heat capacity (B. G. A., et al., 1964). By using these parameters, thermophys. properties of alkanes can be calcd. in a wide range of state parameters, i.e., in region where exptl. data are not available. Calcd. values for internal energy, enthalpy, entropy, and heat capacity of n-pentane at 500-700 K and sp. vol. $(1.7-16) \times 10^3 \text{ m}^3/\text{kg}$ are presented.

C. A. 1982, 97, N2.

n-pentane
 $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$

1985

/106: 202844w · Calorific equation of state and thermodynamic properties of n-pentane over a wide range of critical point including a metastable phase. Amirkhanov, Kh. I.; Abdulagatov, I. M.; Alibekov, B. G. (USSR). *Ul'trazvuk Termodin. Svoistva Veshchestva* 1985, 50-7 (Russ). Edited by Otpushchennikov, N. F. Kursk. Gos. Pedagog. Inst.: Kursk, USSR. A method was developed of deviation of thermal equations of state over wide temp. and d. intervals, which include the crit. and metastable region. Exptl. data have to be critically analyzed. Heat capacity at const. vol (C_v) was calcd. for pentane and the values agree well with known data.

метод. сб-ка
(гр-ие эксм.)

C.A. 1987, 106, N24

C5 H12

1985

4 И25. Теплоемкость n-пентана в жидкой и паровой фазах, включая критическую область. Heat capacity of *n*-pentane in liquid and vapour phases including the critical region. Grigor'ev Boris A., Gerasimov Anatoly A., Kharin Vladimir E., Rastorguev Yuri L. «High Temp.-High Pressures», 1985, 17, № 3, 317—324 (англ.).

Измерения изобарной теплоемкости проведены с помощью проточного калориметра в интервале t -р от 293 до 698 К под давл. 0,5—60 МПа. Изученная область состояний охватывает жидкую и газовую фазы, кривую сосуществования, сверхкритич. область и непосредственную окрестность критич. точки. Удалось достичь значений $T/T_k = 1,0014$ и $P/P_k = 1,009$. Погрешность результатов оценена в 0,35—0,5% без учета ошибок отнесения. Значения теплоемкости на линии насыщения согласуются с литературными в пределах 0,2—1%. Эксперим. данные представлены в форме графиков. Сообщается, что результаты измерений описываются соотношениями линейной модели масштабной теории.

Л. П. Ф.

ср. 1986, 18, № 4

ср;

n-C₅H₁₂

1985

102: 191629 Critical constants of n-pentane. Kratzke, H. (Inst. Thermo- und Fluiddyn., Ruhr-Univ. Bochum, D-4630 Bochum, 1 Fed. Rep. Ger.). *AIChE J.* 1985, 31(4), 693-4 (Eng). Comparing the thermal properties of n-C₅H₁₂ with those of the lower n-alkanes, a consistent set of data is recommended for T_c , p_c , and ρ_c (temp., pressure, and d.) of n-C₅H₁₂. The values are: T_c 469.69 K; p_c 3.364 MPa; ρ_c 232.0 kg.m³.

(T_c , p_c)

C.A.-1985, 102, N 22.

C₅H₁₂ (24)

Om. 21136

1985

102: 155206v Thermodynamic properties of saturated and compressed liquid n-pentane. Kratzke, H.; Mueller, S.; Bohn, M.; Kohlen, R. (Inst. Thermo-Fluidodynam., Ruhr-Univ., D-4630 Bochum, Fed. Rep. Ger.). *J. Chem. Thermodyn.* 1985, 17(3), 283-94 (Eng). The results of new isochoric pressure-d.-temp. measurements are reported for n-pentane covering the liq. range of densities from 0.42 to 0.67 g cm⁻³ and pressures up to 60 MPa. Vapor-pressure measurements were carried out at 350-460 K. In addn. new results for the d. of satd. liq. n-pentane are presented at 237-440 K.

(P)

C. A. 1985, 102, N 18.

C₅ H₁₂

(От. 25581).

1986

Григорьев Б.А., Курумов Д.С.
и др.,

ур-не
состояние

Теморцу. внесок. температура,
1986, 24, N 6,

1096 - 1099.

C5 H₁₂

1986

6 И35. Определение вириальных коэффициентов н-пентана. Курумов Д. С., Васильев Ю. Л., Григорьев Б. А. «Ж. физ. химии», 1986, 60, № 2, 286—288

Приведены эксперим. P — ρ — T -данные для н-пентана в интервале 373,15—648,15 К и давл. 0,1—10 МПа, на основании которых определены значения второго и третьего вириальных коэффициентов.

фр. 1986, 18, № 6

$C(CH_3)_4$

1986

Рабинович И. Б., Мистратов В. П. и др.,

Тт, ДНт

ХI Всесоюзная конференция по координетрии и химии. термодинамике, Новосибирск, 1986. Тезисы докладов, т. II, ● 3-4, 141-142.

Cv

C5H12

1988

23 Б3026. Калорические свойства *n*-пентана в широком диапазоне температур и плотностей, включая окологритическую область. Абдулагатов И. М. «Теплофиз. свойства веществ и материалов» (Москва), 1988, № 24, 55—62

На основе экспериментальных данных об изохорной теплоемкости получено новое калорич. уравнение состояния *n*-пентана в широком диапазоне *t*-р и плотностей, включая окологрит. обл. Приведены таблицы калорич. св-в (c_v , S , U , F , H) *n*-пентана в диапазоне уд. объемов 1,6—12 см³/г при *t*-рах от линии насыщения до 650 К. Дана оценка достоверности расчетных значений калорич. свойств. Библ. 27. Автореферат

(Калорические
св-ва)

Х. 1988, № 23



C5H12

(DM-31690)

1988

Biermann Ch.,

ΔH, энтом-
пизация

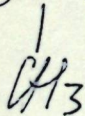
Indian J. Chem. "A",
1988, 27, n 11, 942-946.

C_5H_{12}

[DM. 32337]

1988

$CH_3-CH_2-CH_2-CH_3$ Czarnota I,



J. Chem. Thermodyn.,

Sp, 1988, 20, 457-462.

Heat capacity of 2-methyl-

butane at high pressures.

C_5H_{12}

1988

8 Б3261. Маятниковый метод определения критической температуры / Скрипов В. П., Шутов Д. Т. // Ж. физ. химии.— 1988.— 62, № 12.— С. 3357—3359.— Рус.

Описана установка для измерения крит. т-ры фазового перехода жидкость—пар маятниковым методом. Диапазон измеряемых т-р $20—250^{\circ}C$ при давл. до 17 МПа. Для проверки метода измерена T_c н-пентана. Получено значение $T_c = 196,5^{\circ}C$. Автореферат

$T_{крит.}$

х. 1989, № 8

$C(CH_3)_4$

1989

9 E671. Описание в рамках модели среднего поля ориентационно разупорядоченной фазы неопентана. A mean-field description of the orientational disordered phase of neopentane / Breymann W., Pick R. M. // Europhys. Lett.— 1989.— 8, № 5.— С. 429—434.— Англ.

Сопоставлены ф-ции распределения ориентационной вероятности молекул неопентана $C(CH_3)_4$, полученных двумя расчетными методами: молекулярнодинамич. моделированием пластич. фазы и теорией ориентационного потенциала в рамках модели среднего поля. Получено хорошее согласие между обоими подходами для каждой т-ры из интервала 135—230 К. Успех модели среднего поля обусловлен симметрией молекул $C(CH_3)_4$ и кристаллич. решетки, слабостью связи между переменными, описывающими молекулярную переориентацию, и акустич. фононами. А. И. Коломийцев

ф. 1989, № 9

C5 H12

1989

8 БЗ019. Термофизические свойства алканов, найденные по скорости звука с использованием сферического резонатора. 3. н-Пентан. Thermophysical properties of alkanes from speeds of sound determined using a spherical resonator. 3. n-Pentane / Ewing M. B., Goodwin A. R. H., Trusler J. P. M. // J. Chem. Thermodyn.— 1989.— 21, № 8.— С. 867—888.— Англ.

Из измерений для 5—7 частот радиальных мод сферич. резонатора определены скорости звука в газ. пентане в интервале T -р 270—330 К и давл. 1,5—88 кПа. Рассчитаны теплоемкости C_p , вторые и третьи акустич. вириальные коэф. и времена колебат. релаксации в изученном T -рном интервале с шагом 10 К. Найденны коэф. B и C вириального ур-ния состояния $PV/RT=1 + (B/V) + (C/V_m^2) + \dots$ Эксперим. значения C_p , B и C описаны ур-ниями соотв. $C_{p,m}/R = 4,545 \cdot 10^{-2} (T/K) +$

(Cp)

X.1990, N8

$+2,27 \cdot 10^7 (K/T)^3$; $B(\text{см}^3/\text{моль}) = 377,9 - 237,61 \exp$
 $(560 K/T)$; $C/v^2 = 0,625 - (x/38,1) + (x^2/2250) - (x^3/$
 $/480500)$, $v = 0,0167 \text{ дм}^3/\text{моль}$, $x = \{\exp(2100 K/T) - 1\}$.
 Подробно проанализировано соответствие полученных и
 эксперим. лит. данных. Пред. сообщ. см. // J. Chem.
 Thermodyn.— 1987,— 19,— С. 721. Ж. Г. Василенко

C5 H₁₂

1989
Ewing M.B., Goodwin A.R.H.
et al.,

J. Chem. Thermodyn. 1989,
21 (8), 867-77.

Sp: Thermophysical properties of
alkanes from speeds of

C.A. 1989, 111, N22, 2022747

sound determined using a
spherical resonator. 3.
n-Pentane.

C5 №12

Дм 34393

1990

4 Б3016. Термодинамические свойства *n*-пентана.
Thermodynamic properties of *n*-pentane / Grigoryev B. A.,
Rastorguyev Yu. L., Kurumov D. S., Gerasimov A. A.,
Kharin V. E., Plotnikov S. A. // Int. J. Thermophys.—
1990.— 11, № 3.— С. 487—502.— Англ.

В интервалах *t*-р от тройной точки (173 К) до *t*-ры
диссоциации (700 К) и давл. до 100 МПа с помощью
сферич. пьезометра постоянного объема и адиабатич.
проточного калориметра измерены уд. объемы
(450 значений) и изобарные теплоемкости (500 значе-
ний) пентана (I). Эксперим. данные табулированы.
С использованием лит. значений найдено ур-ние состо-
яния, содержащее 30 констант, к-рое может быть при-
менено для расчета плотности жидк. I и I в состоянии
ид. газа в интервале *t*-р от 280 до 650 К и давл. до
80 МПа, а также для расчета калорич. св-в на линии
насыщения и в критич. области. Библ. 49.

Ж. Г. Василенко

(Ср)

х.1991, №4

C5H12

DM 34393

1990

113: 30197p 'Thermodynamic properties of n-pentane. Grigor'ev, B. A.; Rastorguev, Yu. L.; Kurumov, D. S.; Gerasimov, A. A.; Kharin, V. E.; Plotnikov, S. A. (Grozny Pet. Inst., 364902 Grozny, USSR). *Int. J. Thermophys.* 1990, 11(3), 487-502 (Eng). Sp. vols. and isobaric heat capacity measurements are reported for n-pentane. The measurements were made in the liq. and vapor phases at temps. ranging from the triple point (173 K) to the onset of dissocn. temp. (700 K) and pressures up to 100 MPa including a wide region around the crit. point. The data were fitted to a single equation of state with 30 consts. This equation yields the d. of pentane in the temp. range from 280 to 650 K at pressures up to 80 MPa and the caloric properties up to 500 K. Addnl. exptl. investigations of the thermodyn. properties are required for temps. above 500 K. Interpolating equations for the caloric properties on the satd. line and in the crit. region are also presented.

(G)

C.A. 1990, 113, n Y

C5H12

от 34393

1990

2 И302. Термодинамические свойства *n*-пентана. Thermodynamic properties of *n*-pentane / Grigoryev B. A., Rastorguyev Yu. L., Kurumov D. S., Gerasimov A. A., Kharin V. E., Plotnikov S. A. // Int. J. Thermophys.— 1990.— 11, № 3.— С. 487—502.— Англ.

Для *n*-пентана в его жидкой и газовой фазе выполнены измерения уд. объема и изобарич. теплоемкости в интервале *t*-ры от тройной точки (173 К) до начала диссоциации (700) К и при давл. до 100 МПа. Исследованный интервал включает широкую область вблизи критич. точки *n*-пентана. Показано, что все полученные данные, а также ряд результатов других авторов могут быть описаны с помощью одного ур-ния состояния с 30 постоянными. Данное ур-ние позволяет получать плотность *n*-пентана в интервале *t*-р 280—650 К при давл. до 80 МПа, а также термич. свойства *n*-пентана при *t*-ре до 500 К. Также приведены интерполяционные ур-ния для термич. свойств *n*-пентана на кривой насыщения и в критич. области. Библ. 49. Б. И. А.

(ф)

ф. 1991, № 2

C5 H12

1991

14 Б3001 К. Термодинамические свойства н-пентана / Абдулагатов И. М., Вихров Д. И., Мирская В. А.— М., 1991.— 55 с.: ил.— (Обз. инф. Сер. Пробл. развития Гос. службы стандарт. справ. данных / ВНИЦ по матер. и веществам).— Рус.; рез. англ.

Обзор публикаций по теплофиз. св-вам н-пентана. Приведены ур-ния состояния и табл. термодинамич. свойств. Библ. 115. По резюме

X. 1991, N 14

С 5 №12

1991

17 Б3084. Динамические свойства н-пентана вблизи критической точки жидкость—газ / Абдулагатов И. М., Расулов С. М., Абдурахманов И. М. // Ж. физ. химии.— 1991.— 65, № 5.— С. 1306—1311.— Рус.

Получены новые эксперим. данные о вязкости н-пентана вблизи крит. точки. Определены значения крит. индекса и крит. амплитуды степенной зависимости вязкости от $t - t_c$ на крит. изохоре. Рассчитаны значения масштабной ф-ции вязкости. Проверены основные положения динамич. масштабной теории крит. явлений. С использованием $p - p - T$ -данных для н-пентана и ур-ния состояния вблизи крит. точки по вязкости рассчитаны значения крит. аномалий теплопроводности.

критическая
точка

х. 1991, № 17

$(C_2H_5)_2CH_2$

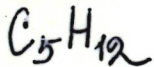
1991

116: 68730g [PEPICO studies of ion dissociations: the structure and heats of formation of ions, molecules, and free radicals]: research report, 1988-1990. Bae: T. (Univ. North Carolina, Chapel Hill, NC USA). Report 1990. DOE/ER/13950-3; Order No. DE91010742, 14 pp. (Eng). Avail. NTIS. From *Energy Res. Abstr.* 1991, 16(7), Abstr. No. 17949. A photoelectron photoion coincidence (PEPICO) app. was constructed and tested by investigating the breakdown diagrams of isobutane and pentane and to study the dissocn. rates of ethylchloride ions.

(ΔH)

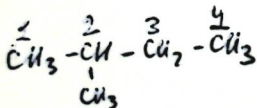
(H) Δ *Uzodyman*

C.A. 1992, 116, N 8



1991

2-метилбутан



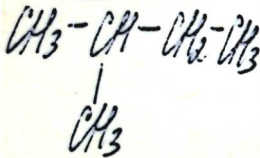
(P)

116: 28533p Vapor pressures of 2-methylbutane determined using comparative ebulliometry. Ewing, M. B.; Goodwin, A. R. H. (Dep. Chem., Univ. Coll. London, London, UK WC1H 0AJ). *J. Chem. Thermodyn.* 1991, 23(12), 1163-8 (Eng). The vapor pressure of 2-methylbutane between 255 and 323 K was obtained from comparative ebulliometric measurements. The results were combined with those already published to obtain a correlation for the vapor pressure from 255 K to the crit. temp.

C.A. 1992, 116, N4

C5 H12

1991

(p, T_{крит.})

19 Б3034. Давление паров 2-метилбутана, определенное с использованием сравнительной эбуллиометрии. Vapour pressures of 2-methylbutane determined using comparative ebulliometry /Ewing M. B., Goodwin A. R. H. //J. Chem. Thermodyn. —1991.—23, № 12.—С. 1163—1168.—Англ.

На основе сравнит. эбуллиометрич. измерений определено давл. паров 2-метилбутана (I) в интервале от 14,8 кПа до 204,8 кПа, что соответствует т-рам кипения от 255,1 К до 323,1 К. В этом интервале давл. паров I описывается ур-нием $\ln p \text{ (кПа)} = 13,67562 - 2376,152 / (T - 38,646)$. На основе сочетания результатов измерений с ранее опубликованными данными др. авторов получено ур-ние, описывающее давл. паров I от 255 К до крит. т-ры ($T_{кр} = 460,95 \text{ К}$): $\ln p \text{ (кПа)} = 8,140 + [-7,33(1 - T_r) + 2,02(1 - T_r)^{1,5} - 2,19 \cdot (1 - T_r)^{2,5} - 2,80(1 - T_r)^5] / T_r$, где $T_r = T / T_{кр}$. Из этого ур-ния рассчитано крит. давл. I, равное 3432 кПа. В. Ф. Байбуз

X. 1992, N 19.

C5-112

1992

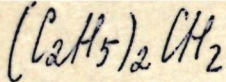
19 Б3019. Изучение ротационной изомерии 2-метилбутана при повышенных давлениях с помощью ультразвуковых и P, V, T-данных. Ultrasonic studies of rotational isomerism and P, V, T data of 2-methylbutane at elevated pressures /Walter T., Bardelmeier U., Wurflinger A. //Ber. Bunsenges. Phys. Chem. .—1992 .—96 ,№ 5 .—С. 717—721 .—Англ.

Для 2-метилбутана (I) в интервалах t -р 203—253 К и давл. до 100 МПа импульсным методом измерены скорости ультразвука и релаксационные частоты. P, V, T-данные найдены дилатометрически в интервалах 210—290 К при давл. до 300 МПа. Экспериментальные данные табулированы. Сглаженные значения P, V, T описаны уравнениями: $(V_0 - V)/V_0 = \lg[(B + p)/(B + p_0)]$; $B(T)/\text{МПа} = 238,37 - 0,6299 T$; $C = 0,222$; $p_0 = 1$ атм. По УЗ-данным определены значения изохорных энергий активации изомеризации. Найдены величины энтальпий активации $\Delta H^\ddagger$ и равновесных ΔH° величин ротац. изомеризации I, составившие при 0,1 МПа 20,2 и 8,2; 100 МПа 16,1 и 5,0 кДж/моль. Значения адиабатич. и изотермич. коэф. сжимаемости $\kappa/10^{-10}$ Па равны при 203 К 6,386 и 8,81; при 243 К 9,473 и 12,88. Найденные величины удовлетворительно согласуются с лит. данными.

Ж. Г. Василенко

(PVT данные)

X. 1993, N 19

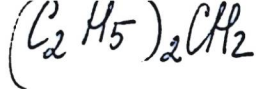


1993

118: 176291q Thermodynamic properties of pentan-3-one at temperatures from 278 K to 338 K and pressures from 0.1 MPa to 380 MPa. Malhotra, R.; Price, W. E.; Woolf, L. A. (Res. Sch. Phys. Sci. Eng., Aust. Natl. Univ., Canberra, 2601 Australia). *J. Chem. Thermodyn.* 1993, 25(3), 361-6 (Eng). A bellows volumometer was used to obtain vol. ratios relative to 0.1 MPa for 3-pentanone at 278.15-338.15 K for pressures up to 400 MPa, or close to the freezing pressure, whichever was the lower. The data were used to evaluate the effects of pressure on isothermal compressibility and thermal expansivity. The correlation of the Tait form, developed previously for normal ketones using results from propanone and 2-butanone, predicts the volumetric properties for 3-pentanone within exptl. error. This correlation is also effective out of temp. and pressure range on which it is based for predicting vol. ratios for 3-pentanone.

MEANINGFUL
Q - III

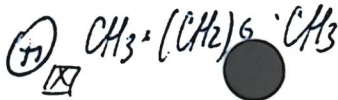
C.A. 1993, 118, N18



1993

 (T_c, P_c)

119: 80759t Vapor-liquid equilibria of model alkanes. Siepmann, J. Ilja; Karaborni, Sami; Smit, Berend (Ko./Shell-Lab., 1003 Amsterdam, Neth.). *J. Am. Chem. Soc.* 1993, 115(14), 6454-5 (Eng). The vapor-liq. coexistence curves of n-pentane and n-octane are calcd. from Gibbs-ensemble Monte Carlo simulations. These simulations were made possible through the development of a novel Monte Carlo technique to simulate directly phase equil. of chain mols. The calcs. were performed for a united-atom model using the Lennard-Jones parameter set of Jorgensen and co-workers (1984). The simulations yield the following crit. properties (with corresponding exptl. results in brackets): $T_c = 481 \pm 5$ K (469.8 K) and $\rho_c = 0.241 \pm 0.007$ gr/cm³ (0.232 gr/cm³) for pentane, and 616 ± 5 K (568.8 K) and $\rho_c = 0.234 \pm 0.008$ gr/cm³ (0.232 gr/cm³) for octane.



C. A. 1993, 119, N 8

C₅H₁₂

1993

3 53010. Равновесия пар—жидкость модельных алканов. Vapor—liquid equilibria of model alkanes /Siepmann J. Ilja, Karaborni Sami, Smit Berend //J. Amer. Chem. Soc. .—1993 .—115 ,№ 14 .—С. 6454—6455 .—Англ.

С использованием модифицир. метода Монте-Карло проведено компьютерное моделирование равновесия пар—жидкость н-пентана и н-октана. Рассчитанные кривые сосуществования пар—жидкость очень хорошо согласуются с эксперим. данными для н-пентана, а в случае н-октана получено разумное согласие. Из данных моделирования определены крит. параметры н-пентана и н-октана, к-рые достаточно хорошо согласуются с экспериментально полученными значениями. В. Ф. Байбуз

(P, T_{кр})

(H) C₈H₁₈

х. 1994, №3 ▣

C_5H_{12}

1996

Gang Jun, Pilling
M. J. et al.

пер. из
сп-ва

J. Chem. Soc. Faraday
Trans. 1996. 92,
N 19, C. 3509-3578.

(см. Бейман C_4H_{10} ; I)

F: C5H12

P: 3

1999

01.11-19Б1.156. Разница в энергии транс-гош-конформеров газообразного пентана из спектра КР. Trans-gauche-energy difference from Raman-spectrum of gaseous pentane / Meier R. J., Koglin E. // Vibr. Spectrosc. - 1999. - 20, N 2. - С. 151-153. - Англ.

С использованием неэмпирически полученных сечений комбинационного рассеяния из спектра КР газообразного пентана получена разница в энергии между транс- и гош-конформерами.

2000

F: C(CH₃)₄

P: 1

134:331893 Thermophysical properties of tetramethylmethane and tetramethylsilane gas calculated by means of an isotropic temperature-dependent potential. Zarkova, L.; Pirgov, P.; Hohm, U.; Chrissanthopoulos, A.; Stefanov, B. B. Institute of Electronics BAS, Sofia, Bulg. Int. J. Thermophys. (2000), 21(6), 1439-1461. Eng

An isotropic temp.-dependent potential (ITDP) is calcd. for the description of binary interactions in gaseous tetramethylmethane, C(CH₃)₄, and tetramethylsilane, Si(CH₃)₄. The potential parameters of C(CH₃)₄ and Si(CH₃)₄ are detd. by solving an inverse problem of minimization of the sum of weighted squared relative deviations between exptl. and calcd. pure gas viscosity (η), second (pVT)-virial coeff. (B), and second acoustic virial coeff. (β) data. At T = 0 K they are obtained for C(CH₃)₄ and Si(CH₃)₄, resp.,

as repulsive parameter $n = 28.02(12)$ and $20.79(11)$, equil. distance $r_m = 5.7790(30) \times 10^{-10}$ and $5.9051(36) \times 10^{-10}$ m, potential well depth $\epsilon/k_B = 586.32(42)$ and $674.75(91)$ K, and the first excited-level enlargement $\delta = 0.0141(3) \times 10^{-10}$ and $0.0188(3) \times 10^{-10}$ m. The influence of the temp. on the potential parameters $r_m(T)$ and $\epsilon(T)$ is implied in the temp. dependence of the effective excited-state enlargement, calcd. via the vibrational partition function. The calcd. complete sets of normal vibrational frequencies for $C(CH_3)_4$ and $Si(CH_3)_4$ are consistent with the available exptl. data. In addn., good agreement is obsd. between the calcns. and new Raman spectroscopic measurements on $C(CH_3)_4$. Tables for recommended thermophys. properties (B , η , and self-diffusion pD) and effective potential parameters (r_m and ϵ) of the two globular gases are given for the temp. range between 250 and 800 K.