

C4H6

$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$ Aston γ. G. и др.

1946

238

C_4H_6

J. Chem. Phys.

14, N2, 67-79

Kp,
 ΔH_f

термодинамические св-ва
газообразного 1,3-бутади-
ена и н-бутенов выше
 25°C .



C_8H_6
Стирен
Бутадиен

Ирина
Ирина Т. McCoskey, King | 1953
J. Research NBS, 50, № 16, 1953,
стр. 357

$t_p < 298,16$

Термические свойства
некоторых соединений
бутадиена - стирена
 $CH_2 = CH - CH = CH_2$

Бутадиен (90%) - Стирен (10%) X - 454

Т°К С Нг-Н₀ S-S₀ (абс. энтропия / ОК, град)

5° 0,0033 0,0041 0,0011

100 0,6432 32,86 0,5845

298,16 1,931 315,2 1,968

C_4H_6 (5)

Brehm B.

1966

Z. Naturforsch., 1966, 21a,
N 3, 196.

масс-спектрометричес-
кое излучение фотопони-
зации молекулы.

(соед. O_2)

С 4 И 6

Р, Сп.
(обзор)

Л. 1969. 2

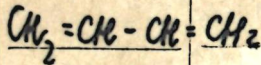
1968

2 Б697. Термодинамические свойства углеводородов. Часть XIII. 1,3-Бутадиен. Das T. R., Kulog N. R. Thermodynamic properties of hydrocarbons. Part XIII. 1,3-butadiene. «Indian J. Technol.», 1968, 6, № 3, 70—74 (англ.)

Дан краткий обзор работ по исследованию термодинамич. св-в 1,3-бутадиена. Приведены крит. постоянные и ур-ния для давления паров и теплоемкости перегретого пара. Вычислены, и в интервале t -р 268, 75—1000° К для давлений от 1 до 100 атм табулированы уд. объемы, энтропия и энтальпия насыщ. пара, насыщ. жидкости и перегретого пара 1,3-бутадиена. На основании полученных данных построена и приведена $T-S$ -диаграмма. Часть XII см. РЖХим, пред. реф. 2Б696. В. Ф. Байбуз

C_4H_6

1968



Кр

р-цис

1 Б855. Термодинамика реакций гидроформилирования, гидрокарбоксилирования и гидрокарбометоксилирования бутадиена. Куваев Б. Е., Имянитов Н. С., Рудковский Д. М. В сб. «Карбонилирование ненасыщ. углеводородов». Л., «Химия», 1968, 222—224

С целью выяснения возможности использования сопряженных диолефинов в кач-ве исходного сырья для получения карбонильных и карбоксильных соединений методом оксосинтеза, произведен термодинамич. расчет р-ций гидроформилирования, гидрокарбоксилирования и гидрокарбометоксилирования одной двойной связи моле-

ж. 1969. 1

кулы дивинила в диапазоне t -р $25-250^\circ$. Величины термодинамич. функций (ΔH , ΔS и ΔZ) продуктов р-ций находились расчетным путем по методу Андерсена, Байера и Ватсона. Константы равновесия (K_p) для перечисленных р-ций при увеличении t -ры меняются соотв. от $3,7 \cdot 10^8$ до 0,3; от $8,3 \cdot 10^{11}$ до 8 и от $6,3 \cdot 10^{26}$ до $8 \cdot 10^9$. Аналогичное соотношение величин K_p описано в литературе для C_2H_4 . С. Огородников

1968

 C_4H_6

3 Б660. Теплоты образования углеводородов C_4H_6 .
Wiberg Kenneth B., Fenoglio Richard A.
Heats of formation of C_4H_6 hydrocarbons. «J. Amer. chem.
Soc.», 1968, 90, № 13, 3395—3397 (англ.)

Методом пламенной калориметрии измерены теплоты
образования 1-метилциклопропена, метиленциклопропа-
на, циклобутена и дициклобутана. Рассмотрено влияние
изменения угла связи на теплоту образования соеди-
нений. Резюме

 ΔH_f°

x. 1969. 3

C_4H_6
бутадиен

Babb S.E.,

1969

J. Chem. Phys.,
50, N2, 5271

крупное
плавление

$(C_{10}H_8)_I$

С4 №6

(DM. 31715)

1989

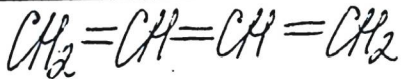
Илибаев А.Ю., Бугаев Ю.В.,

(ДМ+)

ж. ф.и.з. х.м.и.и.и., 1989,

63, №4, 888-891.





1989

1 Б1025. О спектре поглощения $1A_g \rightarrow 1B_u$ четырех изотопомеров бутадиена. On the $1A_g \rightarrow 1B_u$ absorption spectrum of four butadiene isotopomers / Zerbetto F., Zgierski M. Z. // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 157, № 6. — С. 515—520.— Англ.

Полуэмпирическим методом QCFF/PI модифицированным авторами (// J. Chem. Phys.— 1988.— 89.— С. 3681), рассчитаны силовые постоянные транс-бутадиена-1,3, $\text{CH}_2=\text{CH}=\text{CH}=\text{CH}_2$ (I) для основного ($1A_g$) и возбужденного ($1B_u$) состояний. С полученным силовым полем решены прямые задачи для колебаний типа A_g молекул I $\text{CH}_2=\text{CD}-\text{CD}=\text{CH}_2$ (II), $\text{CD}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CD}_2$ (III) и C_4D_6 (IV). Переотнесены две частоты колебаний: эксп. частота 1294 см^{-1} молекулы I отнесена как вал. кол. связи C—C, а 1210 см^{-1} — как веер-

и.п.

X. 1990, N 1

ное колебание связи C—H. Для 6 колебаний типа A_g молекул I—IV рассчитаны параметры смещений для перехода $1A_g \rightarrow 1B_u$. Показано, что сим. вал. кол. связей C=C дает наибольший вклад в колебат. структуру этого перехода. По рассчитанным частотам, параметрам смещений и эксперим. ширинам линий построены теорет. спектры поглощения I—IV. Полученные результаты не подтверждают недавно предложенное переотнесение этих спектров, основанное на измерении расстояний между двумя первыми пиками поглощения в I—IV, и что структура I в возбужденном состоянии $1B_u$ почти плоская: отклонения от плоской структуры должны быть менее 10° .

Ю. Н. Панченко

C4H6

1992

14 Б3019. Экспериментальное и теоретическое исследование уравнения состояния жидкого 2-бутина при температурах от 248 до 293 К для давлений до 104 МПа. Experimental and theoretical studies of the equation of state of liquid 2-butyne from 248 to 293 K and pressures up to 104 MPa / Baonza V. Garcia, Alonso M. Caceres, Delgado J. Nuñez // J. Phys. Chem.— 1992.— 96, № 4. — С. 1932—1938.— Англ.

ур-ие состоян.

С использованием метода расширения измерена плотность 2-бутина (I) вдоль изотерм при t -рах 248—293 К для давл. от давл. насыщ. пара до 104 МПа. Определены также ортобарич. плотности и кривая сосуществования тв. тело—жидкость для давл. до 100 МПа. Эксперим. P — V — T -данные I описаны ур-нием состояния Стробриджа, к-рое использовано для расчета изотермич. сжимаемости и коэф. термич. расширения I как ф-ций t -ры и давл. Из калорич. данных и давл. паров определены энтальпии испарения, теплоемкость и второй вириальный коэф. I. Исследованы и обсуждены возможности др. полуэмпирич. и теор. ур-ний состояния предсказывать плотность и термодинамич. св-ва 2-бутина.

В. Ф. Байбуз

X. 1992, N 14

C4H6

1992

8 И92. Экспериментальные и теоретические исследования уравнения состояния для жидкого 2-бутина в интервале температуры от 248 до 293 К и давлении до 104 МПа. Experimental and Theoretical Studies of the Equation of State of Liquid 2-Butyne from 248 to 293 K and Pressures up to 104 MPa / Baonza V. Garcia, Caceres Alonso M., Nuñez Delgado J. // J. Phys. Chem.— 1992.— 96, № 4.— С. 1932—1938.— Англ.

ур-ие сост.

Для жидкого 2-бутина выполнены измерения плотности (ρ) в интервале т-ры (T) от 248 до 293 К и давлении до $P \simeq 104$ МПа. Определена также кривая сосуществования фаз твердое тело — жидкость при давлении до 100 МПа. Полученные результаты для более чем ста $P\rho T$ точек вдоль семи изотерм проанализированы в рамках ур-ния состояния Стробриджа. Рассчитаны также значения изотермич. сжимаемости и коэф. термич. расширения. Кроме того, построена фазовая диа-

Ф. 1992, №8

грамма исследуемого в-ва и оценены параметры его тройной точки. С использованием данных о давлении паров и калориметрич. данных рассчитаны значения второго вириального коэф. в зависимости от т-ры. Рассмотрена применимость других известных теоретич. ур-ний состояния для описания плотности и термодинамич. свойств данного вещества. Библ. 34.

C_4H_6

1992

Fainar I., Anitescu B., et al.,

An. Univ., Bucuresti Chem.-

1992, 1, C. 91-93.

$C_{10}H_{10}$; I)