

C_3H_4

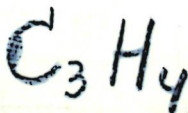
7372 - IV

1953



Boyd D.R.J., Thompson H.W.
Trans. Faraday Soc., 1953, 49, N 2,
141-142

The rotational ...



1956
 C_2H_2 , C_2HCH_3 (J)

Тибя Аоно
Буссэйрон кэнкю, 1956, № 94,
24-31
Гиперкон'югация ...

C_3H_4

От.

C_3H_4

($CH \equiv C - CH_2$)
($CH_3 - C \equiv CH$)

р.

Кордес, Гюнцлер

1959

Cordes, Johann F., Günzler H.

Chem. Ber., 1959, 92, N 5,

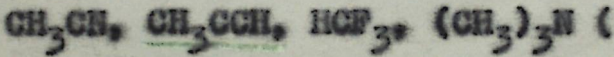
1055-1062.

Равновесие пропин - пропа
диен.

X-60-6-21434.

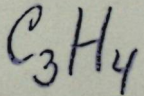
1960

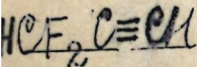
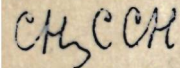
5153 - IV



Robinson D.W., McQuarrie D.A. Врат.
Пост./
J.Chem.Phys., 1960, 32, N2, 556-559

Спектры некоторых молекул...





08678v) Mass spectrometric study of compounds containing fluorine. I. Comparative study of methylacetylene and difluoromethylacetylene. M. M. Gil'burd, B. G. Syrvatka, V. U. Shevchuk, A. L. Bel'ferman, and F. B. Moin. *Khim. Vys. Energ.* 1(5), 411-16(1967)(Russ). Mass spectra of methylacetylene (I) and difluoromethylacetylene (II) were studied and the appearance potentials of M^+ and fragment ions were measured. The comparison of mass spectra with the quant. calcs. based on the measured appearance potentials shows a decrease of C-C bond energy during a substitution of H by F in the Me group of I. For II, the energy of C-C was 100 kcal./mole. The following values for heats of formation of the ions were obtained (in kcal./mole): $\Delta H(C_3F_2H^+) = 194$, $\Delta H(C_3FH_2^+) = 257$, and $\Delta H(C_3FH^+) = 303$. The heat of formation of II was 51.3 kcal./mole and the bond energy of C-C in II was 100 kcal./mole. The mass spectrometer MI-1305 was modified to give ionizing voltage readings with an 0.1 v. accuracy. The mass spectra were registered at room temp., 70 v. ionizing potential, 2 kv. accelerating potential, and 1.5 ma. emission current.

Z. M. Zochowski

C.A. 1968. 68. 24

+1



1967

 H_3CCCH

Р

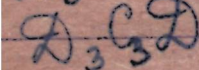
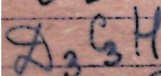
24 Б576. Давления паров метилацетиленов: H_3CCCH , H_3CCCD , D_3CCCH и D_3CCCD . Van Hook W. Alexander. Vapor pressures of the methylacetylenes, H_3CCCH , H_3CCCD , D_3CCCH and D_3CCCD . «J. Chem. Phys.», 1967, 46, № 5, 1907—1918 (англ.)

С помощью ртутного манометра в интервале t -р 167—255° К измерены давления паров метилацетилена и его дейтерозамещенных. Давление паров обычного метилацетилена использовалось в качестве первичного термометра. Результаты измерений для D_3CCCH , H_3CCCD и D_3CCCD приведены в таблицах относительно давления пара H_3CCCH . Полученные результаты обсуждены с помощью статистич. теории изотопных эффектов в конденсированных системах. Расчеты проводились в гармо-

2. 1967. 24

нич. приближении с использованием разумных силовых полей. Найдено, что дейтерирование в метильной группе приводит к обратному изотопному эффекту. Чтобы объяснить этот эффект, необходимо принять ангармоничность в частотах решетки, как и в случае этана. Дейтерирование метина ведет к нормальному изотопному эффекту, обнаруживающему переход вблизи 226°K . Показано, что в этом случае данные указывают на значительную мол. ассоциацию в конденсированной фазе и что степень этой ассоциации зависит от t -ры. Этот вывод согласуется с результатами независимых исследований ЯМР в жидкой фазе и спектроскопич. исследований.

В. Байбуз



p

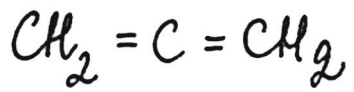


1967

79865e Vapor pressures of the methacetylenes, H_3CCCH , H_3CCCD , D_3CCCH , and D_3CCCD . W. Alexander Van Hook (Univ. of Tennessee, Knoxville). *J. Chem. Phys.* 46(5), 1907-18(1967)(Eng). The vapor pressures of the four deuterio-isomers of methylacetylene of C_{3v} symmetry have been measured at 167°-255°K. (~1 mm. C_3H_4 to ~1000 mm. C_3H_4) by Hg manometry. $D_3CC:CH$ shows an inverse vapor-pressure isotope effect which amts. to about 1.6% per D atom at 167°K. falling to 1.2% per D atom at 255°K., while $MeC:CD$ displays a normal effect of about 2.0% at 167°K. which falls to an inverse effect of 0.2% at 255°K. The cross-over temp. is near 226°K. The effect observed for $D_3CC:CD$ is slightly less than the sum of the effects of $D_3CO:CH$ and $H_3CC:CD$. The data are interpreted in the light of the statistical theory of isotope effects in condensed systems. A model calcn. is made in the framework of this theory in the harmonic-cell approxn. by using reasonable force fields. As with ethane, anharmonicities in the lattice fre-

C.A. 1967. 66-18

quencies must be postulated in order to rationalize the vapor-pressure effects observed for the deuterio methyl compds. The vapor pressure of the deuterio methynic compd. appears unusual, and the data indicate considerable mol. assocn. in the condensed phase, and the amt. of this assocn. is temp. dependent. This last point is in agreement with the results of an independent N.M.R. investigation and with spectroscopic studies. RCJO



1930

Haselbach &

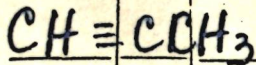
ΔH_f
7

Chem. Phys. Lett.,
7(4), 428

(coll. C_2H_6) I



1973



4H₇

Sharma, D.K.Sen., et al;

J. Amer. Chem. Soc.;

1973, 95(20), 6562-6.

(see CH_3^+ ; III)

C₃H₄

1974

9 Б815. Термодинамические свойства пропилена из калориметрических измерений. Bier K., Ernst G., Kunze J., Maurer G. Thermodynamic properties of propylene from calorimetric measurements. «J. Chem. Thermodyn.»; 1974, 6, № 11, 1039—1052 (англ.)

В проточном калориметре измерены теплоемкости и коэф. Джоуля — Томсона (μ) газ. пропилена в интервалах т-р от 298° К до 473° К и от 298° К до 498° К соотв. и давл. до 12 МПа. Экстраполяцией к значению давл., равному 0, получены величины C_p и μ в идеальном газ. состоянии. Далее после указания т-ры следуют величины давл. (МПа), соотв-щих им C_p (дж/г·град) и коэф. Джоуля — Томсона (град·МПа): 298,15° К 0, 1,516, 16,90; 0,5, 1,639, 18,47; 1,0, 1,850, 20,93; 365,15° К 0, 1,770, 9,46; 6,0, 4,287, 2,23; 12,0, 2,958, 0,55; 398, 15° К 0, 1,898, 7,59; 6,0, 4,020, 9,81; 12,0, 3,429, 1,57; 473,15° К 0, 2,167, —; 6,0, 2,566, —; 12,0, 3,182, —. Полученные значения теплоемкостей сравнены с лит. данными, рассчитанными из спектроскопич. измерений и с эксперим. лит. значениями. Рассчитаны фактор сжимаемости, уд. энтальпия, энтропия и второй вириальный коэф. (b). Значения $-b$ (см³/г) при т-рах 348,15, 373,15 и 423,15° К составили 5,949, 5,140, 3,868 соотв. Далее следуют значения т-р, давл. МПа и соотв-щих величин h (дж/г) и s (дж/г·град): 25°, 1,0 —30,89, —0,5297; 100°, 1,0, 107,29.

м.г.ев.вс

х. 1975
19

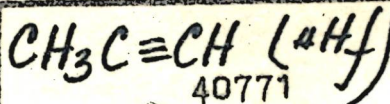
—0,1162; 200°, 1,0, 312,89, 0,3706; 200°, 10,0, 198,64,
—0,2710. Из сравнения полученных значений с лит.
данными сделан вывод о возможности определения
термодинамич. параметров реальных газов как из ка-
лориметрич. так и из $p-V-T$ -измерений.

Ж. Василенко



50723.1810

TC, Ch



1975
4068

Benson Sidney W. Luria Menachem. Electrostatics and the chemical bond, II. Unsaturated hydrocarbons.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1975, 97, N 12,
3337-3342

0405 (англ.)

391 392

897

ВИНИТИ

$\text{HCCCH}_2\text{-H}$

Orman 6662

1978

King KD.

Δ Hf

Int. J. Chem. Kinetics,
1978, 10, 545-53

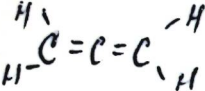
Very Low-Pressure Pyrolysis
(VLPP) of But-1-yne.

1979

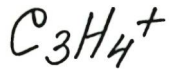
24 Б836. Высокотемпературные превращения аллена. Андрусев М. М., Вдовин В. Н., Яровой С. С., Табер А. М. «Тр. Моск. ин-т инж. ж.-д. трансп.», 1979, № 652, 106—111

Проведен термодинамич. анализ высокот-рных превращений аллена. Определены инкременты энтальпии образования и энергии Гиббса, приходящиеся на двойные связи (сопряженные и несопряженные) и четырехвалентный цикл. Рассчитаны значения энтальпии образования и энергии Гиббса 1,2- и 1,3-диметиленциклобутанов. Определены ΔG_i для 11 реакций в интервале т-р 295,15—1000 К. Для указанных выше р-ций рассчитаны константы равновесия. Результаты представлены на графиках. Автопеперат

X. 1980 № 24

 $\Delta H_f; \Delta G_f;$ 

(аллен)

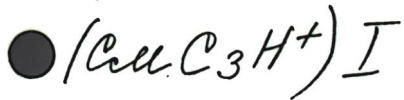


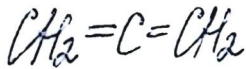
1980

Parr A.C., et al

Adv. Mass. Spectrom. Vol. 8A.

(ΔH_f) Proc. 8th Int. Conf., Oslo,
1979, London, 1980, 62-70.





1985

11 Б1050. Теоретический анализ структуры электронно-возбужденных состояний аллена. Барьер вращения. Determinacion teorica de estructuras electronicamente excitadas en el aleno. Barrera de rotacion. Merchán M., Nebot-Gil I., Tomas F., Gonzalez-Luque R. «An. quim. Real soc. esp. quim.», 1985, A81, № 3, 360—362 (исп.; рез. англ.)

Неэмпирическим методом МО ЛКАО исследованы электронно-возбужденные состояния аллена $\text{CH}_2=\text{C}=\text{CH}_2$ вида 3A_2 , 1A_2 и 1A_1 симметрии D_{2d} , D_{2h} и C_{2v} . Оптимизация геометрии проведена в базисе 6-31ГФ при использовании псевдопотенциала и двухэкспонентного базиса с учетом поляризац. ф-ций для последующего расчета полных энергий. Приведены геометрич. параметры состояний. Низшим по энергии состоянием найдено 1A_1 симметрии D_{2h} , затем с интервалом 47,9 ккал/моль следует состояние $^3A_2(3\pi)$ симметрии C_{2v} с углом $\text{C}-\text{C}-\text{C}$, равным $138,2^\circ$. Далее следуют состояния $^1A_2(3\pi)$ симметрии C_{2v} с относит. энергией 51,1 ккал/моль и $^3A_u(3\pi)$ симметрии D_{2h} с относит. энергией 55,6 ккал/моль.

В. А. Болотин

геометрия,
структура, E

X. 1986, 19, 111

CH₃ C₂H

1985

14 Б1280. Лэмбовские провалы в лазерном штарковском спектре пропина: анализ полосы ν_5 . Lamb-dip laser Stark spectroscopy of propyne: analysis of the ν_5 band. Meyer F., Dupre J., Meyer C., Lahaye J. G., Fayt A. «Can. J. Phys.», 1985, 63, № 9, 1184—1188 (англ.)

Методом лазерной штарковской спектроскопии в режиме насыщ. поглощения с использованием $^{13}\text{CO}_2$ -лазера исследована вращат. структура параллельной ИК-полосы ν_5 молекулы CH₃C₂H. Идентифицированы линии 16 колебательно-вращат. переходов с $K \leq 5$ в обл. 927,3004—932,6052 см⁻¹ и их штарковские компоненты. Определены значения центра полосы ($\nu_5^0 = 930,2753$ см⁻¹), вращат. и центробежных постоянных ($B_5 = 0,283803$, $A_5 - A_0 = -0,00756$, $D_5' = 1,50 \cdot 10^{-8}$, $D_{Jk}' = 5,5 \cdot 10^{-6}$, $D_k' = 9,4 \cdot 10^{-5}$ см⁻¹) и дипольного момента ($\mu_0 = 0,7829$, $\mu_5 = 0,7944$ Д). Е. В. Алиева

Vi, M. N.

X. 1986, 19, № 14

$C_3H_4^+(17)$

(DM. 24284)

1986

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

Δ_5H ,

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

C3H4

1986

9 Б3012. Термодинамические свойства пропина. Thermodynamic properties of propyne. Stamatoudis Michael. «Chem.—Ing.—Techn.», 1986, 58, № 12, 972—975 (англ.)

На основе лит. P — V — T -данных с использованием уравнений BWR, Антуана и известных корреляций рассчитаны энтальпия и энтропия перегретого пара пропина в интервале t -р от -20 до 200°C и давл. 1 — 320 бар и от 20°C до крит. точки для насыщ. жидкости и пара. Данные по зависимости H , S и V жидк. и газ. фаз от T и P представлены в виде табл. и графически.

Р. Г. Сагитов

X. 1987, 19, N 9.

СН4

[Ом. 31715]

1989

Шибает А.Ю., Тузанов Ю.В.,

(СНф) М. жу. химии, 1989,
63, №4, 888-891.

C_3H_6

1995

Zhao Xingmin, Ma Peisheng.

Chin. J. Chem. Eng. 1995,
3, N4. C. 233-239.

P, T_{KP}

(see. $CClF_2H$; ?)

Промислен,
 $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CH}_2$

СЗНб

1996

18Б423. Кинетика и моделирование термической реакции пропилена при 800 К. Часть II. Пропилен в присутствии водорода. Kinetics and modeling of the thermal reaction of propene at 800 K. Part II. Propene in the presence of hydrogen / Barbé P., Martin R., Perrin D., Scacchi G. // Int. J. Chem. Kinet.— 1996.— 28, № 11.— С. 849–863.— Англ.

Методами ГХ и ГХ—МС изучена кинетика термич. разл. пропилена (давл. 300–200 Торр) при низких степенях конверсии в присутствии H_2 (30–260 Торр) при 762–811 К. Влияние H_2 сводится к увеличению среди продуктов р-ции выходов CH_4 , C_2H_4 и C_3H_8 и снижению выходов бутадиена и 2- или 3-метилциклопентенов. Скорости образования аллена (I) и 4-метилпент-1-ена (II) при этом не изменяются. Предложена многостадийная кинетич. модель процесса. Подтвержден молек. механизм образования I и II. Оценен целый ряд значений констант скорости элементарных стадий процесса, удовлетворительно согласующихся с лит. значениями аналогичных параметров. Библ. 26.

В. В. Винц

Х. 1997, N 18

1996

А.А. Барбе
 Пропилен
 C_3H_6

18Б422. Кинетика и моделирование термической реакции пропилена при 800 К. Часть I. Чистый пропилен. Kinetics and modeling of the thermal reaction of propene at 800 K. Part I. Pure propene / Barbe P., Martin R., Perrin D., Scacchi G. // Int. J. Chem. Kinet.— 1996.— 28, № 11.— С. 829–847.— Англ.

Изучено термич. разл. пропилена при низких степенях конверсии, давл. 30–200 Торр и 762–811 К. Среди продуктов р-ции обнаружены H_2 , CH_4 , C_2H_4 , C_2H_6 , аллен, C_3H_8 , бутadiен, бутены, метилциклопентены, диаллил, гексены и др. Установлено, что основная часть продуктов образуется по свободнорадикальному механизму. Однако некоторые продукты образуются по молек. или по бирадикальному механизмам. В частности, показано, что аллен возникает в процессе согласованного четырехцентрового дегидрирования пропилена. Измерены и обсуждены активационные параметры процесса. Представлена многостадийная кинетич. модель процесса. Оценены и сопоставлены с лит. данными значения констант скорости целого ряда стадий конверсии пропилена. Библ. 29.

В. В. Винц

термическая
 разложение.

X. 1997, N 18

C₃H₄

(om. 38846)

1997

John C. Poutsma, John
J. Nash, et al.,

ΔH_f J. Am. Chem. Soc. 1997,
119, N20, 4686-97

$CH_2 = CHCH$

1997

Poutsma John C., Nash John G.
et al.,

D.H.⁰

J. Amer. Chem. Soc. - 1997,
119, N20, C. 4686-97