

С-другие_соединения

Органическое
соединение

1965

9 Б573. Приближенное вычисление теплот образования органических соединений. Vergma K. K., Doraiswamy L. K. Estimation of heats of formation of organic compounds. «Industr. and Engng Chem. Fundament.», 1965, 4, № 4, 389—396 (англ.)

ΔH_f

Предложен метод, основанный на суммировании групповых вкладов и сходный с методами Франклина (Franklin J. L., Ind. Eng. Chem., 1949, 41, 1070), Андерсона (Anderson J. W. и др. Natl. Petrol. News, 1944, 36, R476) и др., позволяющий вычислять энтальпии образования ($\Delta H_{(обр.)}^0$) как углеводородов, так и многих соединений с функциональными группами в интервале 300—1500° К. Вклады различных групп в $\Delta H_{(обр.)}^0$ представлены в виде линейной функции T ; интервал 300—1500° при этом разбивается на 2 части. Это позволяет получить $\Delta H_{(обр.)}$ как непрерывную ф-цию T . В работе табулированы по-

X. 1966 J

стоянные для вычисления групповых вкладов углеводородных групп, включая соединения с двойной и тройной связью, циклические и ароматические. Метод учитывает эффект разветвления цепи в различных классах углеводов и *цис-транс*-изомерию. Приведены также константы для вычисления $\Delta H_{(обр.)}^0$ многих классов кислород-, азот-, серу- и хлорсодержащих соединений. Метод неприменим для расчета $\Delta H_{(обр.)}^0$ эфиров, ангидридов, фторидов, бромидов, йодидов и соединений, в молекулах к-рых имеется сопряжение. Сравнение величин $\Delta H_{(обр.)}^0$, вычисленных по предложенному методу при 300, 600, 1000, 1200 и 1500° К с экспер. данными, проведенное для 32 углеводов и 26 соединений, содержащих и другие атомы, показало, что ср. погрешность расчета составляет 0,35 ккал/моль для углеводов и 0,26 ккал/моль для соединения с функциональными группами.

В. Колесов

опрацювання
середнього

1968

ΔH_f
(агрегат)

Estimation of heats of formation of organic compounds. K. K. Verma and L. K. Doraiswamy (Natl. Chem. Lab., Poona, India). *Ind. Eng. Chem., Fundamentals* 4(4), 389-96(1965)(Eng). A procedure based on group contributions was developed for estg. the heat of formation of org. compds. as a function of temp. The temp. dependence of any group can be expressed as a straight-line relation, and 2 such equations are required to cover the entire temp. range of 300-1500°K. The values of the 2 consts. appearing in these equations for the 2 regions of temp. were tabulated for a variety of hydrocarbon and nonhydrocarbon groups. At 300-1500°K. the proposed method predicts the heat of formation of hydrocarbons with an av. error of 0.35 kcal./g. mole and of nonhydrocarbon compds. with an av. error of 0.26 kcal./g.-mole.
RCHD

C. A. 1965. 63. 13

17921/9

Органич.
соединения

К. образ.
кабин.

1987
✓ 6 Б181. Определение термодинамических параметров, характеризующих образование через водородную связь комплексов между молекулой акцептора и одной или двумя молекулами донора протона, методом инфракрасной спектроскопии. Cruege Francis, Pigneau Paul, Lascombe Jean. Determination par spectroscopie infrarouge des grandeurs thermodynamiques caractérisant la formation de complexes par liaison hydrogène entre une molécule d'accepteur et une ou deux molécules de donneur de proton. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1967, 64 № 7—8, 1161—1164 (франц.; рез. англ.)

С помощью ИК-спектроскопии графическим методом определены константы K_{1-1} и K_{1-2} комплексообразования *n*-хлорфенола, *o*-крезола, 2,6-ксиленола пиррола с тетраметилмочевинной, триэтиламино и некоторыми

X. 1968. 6

окисями эфирного типа в разб. р-рах CCl_4 в интервале
т-р от -10 до $+35^\circ$. Между K_{1-1} и K_{1-2} отмечена взаи-
мосвязь, заключающаяся в увеличении основности атома
Х донора протона и довольно значительной величине
 K_{1-2} , если Н-связь в комплексе $\text{A} \dots \text{H}-\text{X}$ сильна и
константа K_{1-1} велика. Е. И. Визен

1968

Органические
соед. (жидк.)

12031 Determination of the thermodynamic properties of slightly studied organic liquids. Aksel'band, B. A.: Nedostup, V. I. (USSR). *Teplofiz. Svoistva Zhidk., Mater. Vses. Teplofiz. Konf. Svoistvam Veshchestv Vys. Temp.*, 3rd 1968 (Pub. 1970), 41-2 (Russ). Edited by Abas-Zade, A. K. "Nauka": Moscow, USSR. The vapor pressure data of thoroughly studied materials are used as stds. for the calcn. of the thermodynamic properties of slightly studied org. liqs.

Abol-hassan K. Abdel-aziz

непрел
сб-ба

C.A. 1391.75.6

Органич.
Комплексн

С-соед

1969

10 Б903. О составе комплексов в водных растворах.
III. Gorski N. Über die Zusammensetzung von Kom-
plexen in wäßriger Lösung. III. «Z. Naturforsch.», 1969,
24 b, № 9, 1075—1080 (нем.)

Из величин изменения энтропии при р-циях типа
 $[M(H_2O)_n]^{2+} + Y \rightleftharpoons [M(H_2O)_xY]^{2+} + (n-x)H_2O$ опреде-
лены кол-ва молекул H_2O , к-рые освобождаются при
образовании комплексов между ионами металлов и эти-
лендиамином, триэтилентетраамином, три-(3-аминоэтил)-
амином, глицином, α , β -аланином, ацетилацетоном. Рас-
смотрены комплексы двухвалентных катионов Mn, Fe,
Co, Ni, Cu и Zn. А. Н. Генкин

ΔS

Х. 1970 . 10

Органич.
Комплексы

C-соед.

ΔH

X. 1970. 10

10 Б904: Калориметрическое обнаружение коротко-
живущих промежуточных соединений при образовании
комплексов Майзенхаймера. Larsen John W.,
Fendler J. H., Fendler E. J. Calorimetric detection
of transient intermediates in the formation of Meisenhei-
mer complexes. «J. Amer. Chem. Soc.», 1969, 91, № 21,
5903—5904 (англ.)

Калориметрическим методом впервые обнаружены в
разб. р-рах промежуточные соединения, возникающие
раньше, чем образуются 2,4,6-замещенные 1,1-диметокси-
циклогексациденилидные ионы (I) при р-ции соотв-щих
ароматич. эфиров с CH_3ONa . Промежуточным соедине-
ниям приписывается структура 2,4,6-замещенных 1,3-ди-
метоксидициклогексациденилидных ионов. Изучены р-ции
2,4,6-замещенных анизолов с замещающими группами

6961
1969

—NO₂ и —CN. Из сравнения изменения t -ры во времени в калориметре при вливании 2,4,6-замещенных анизолов в метанол и в метанольные р-ры CH₃ONa определены ΔH для I и из известных констант устойчивости этих комплексов оценены ΔG и ΔS . Наблюдается линейная зависимость между ΔH и ΔS комплексообразования.

А. Н. Генкин

1969

Органич.
соед-ния

И. Н. (расчет)

✓ 22 Б754. Сочетание аддитивной схемы с ЛСЭ для расчета энтальпий образования органических соединений. II. Учет индукционной составляющей и определения значения универсальной постоянной индукционного взаимодействия. Лебедева Н. Д., Пальм В. А., Гутнер Н. М. В сб. «Реакц. способность орган. соедин. Т. 6. Вып. I». Тарту, 1969, 84—113 (рез. англ.)

X. 1969. 22

$\text{Et}_4\text{NCl} \cdot n\text{CHCl}_3$, XIV-73 1970
 $\text{Et}_4\text{NBr} \cdot n\text{CHCl}_3$
(Kp, ΔG, ΔSf, ΔHf)

Boule P.,

C. r. Acad. Sci., 1970, C270
n° 17, 1433-1435



B, M.

1970

Органические
соед.

134487e Calculation of the thermal parameters of organic vapors and liquids by a group equation method. Lehmann, Hubert (VEB Leuna-Werke "Walter Ulbricht," Ger.). *Chem. Tech. (Leipzig)* 1970, 22(8), 489-92 (Ger). Group equations were developed for 34 org. liq. compds. representing normal and branched alkanes, normal and branched alkenes, alicyclics, aromatics, and org. O and S compds. The applicability of the equations was tested by calcg. the heats of formation, ΔH_f° , the free enthalpy, ΔG_f° , and the enthalpy, $H^\circ - H_0$, of the various compds. at 298 and 600°K. The agreement with literature data was good. G. F. Goethel

 ΔH_f° ΔG_f°

C.A. 1970.73.26

1977

Нефть

24 Б886. Экспериментальные значения энтальпии легкой нефти. Lenoir J. M., Hipkin H. G. Light naphtha enthalpy measured. «Hydrocarbon Process.», 1971, 50, № 5, 95—96 (англ.)

ДН

На проточном калориметре измерены величины энтальпий легкой нефти в интервале т-р $48,9—315,5^{\circ}$ и давл. $0—9\,640\,000$ н/м², а также в интервале т-р $271,0—315,5^{\circ}$ и давл. $3\,720\,000—6\,895\,000$ н/м². Найдено, что средн. погрешность измерений составила $85,4$ ккал/г-моль. Полученные данные табулированы. Приведены график зависимости энтальпий от т-ры около крит. точки и таблицы измеренных св-в нефти.

Т. С. Шаховцова

X. 1977.24

2076 Вектор

C-соединения

1971

23 Б94. Исследование связей соединений бора и элементов IV группы. VI. Масс-спектрометрическое изучение соединений Me_4M и $\text{Me}_3\text{M}-\text{M}'\text{Me}_3$ (M и M' = C, Si, Ge, Sn и Pb): Lappert M. F., Pedley J. B., Simpson J., Spalding T. R. Bonding studies of compounds of boron and the group iv elements. VI. Mass spectrometric studies on compounds Me_4M and $\text{Me}_3\text{M}-\text{M}'\text{Me}_3$ (M and M' = C, Si, Ge, Sn, and Pb): thermochemical data. «J. Organometal. Chem.», 1971, 29, № 2, 195—208 (англ.)

Масс-спектры тетра (I) и гекса-метилпроизвольных соединений элементов IV группы изучены при энергии ионизирующих электронов 50 эв, ускоряющем напряжении



Ж. 1971. 23

8 кв и т-ре источника ионов $80-100^\circ$. В изученных спектрах строение наиболее интенсивных ионов типа $C_3H_9M^+$ аналогично *трет*-бутилкарбониевому иону. Для 14 соединений, измерены потенциалы ионизации и появления. Полученные данные использованы для вычисления стандартных значений энтальпий образования (ΔH_f°) 27 молекул, радикалов и ионов, величин энергий диссоциации (D) связей C^+-C , M^+-C и $M-C$ и средней термодим. энергий связей ($\bar{E}$). Значения $\bar{E}$ для I, по сравнению с $(CH_3)_3M^\ominus$, медленно возрастают в ряду $Si < Ge < Sn \simeq Pb$. С увеличением атомного веса элемента в ионе $(CH_3)_3M^+$ эффект сверхсопряжения уменьшается. Величина $\bar{E}$ ($M-C$) в $(CH_3)_3M-C(CH_3)_3$ больше, чем в I [для $M=Pb$ $\bar{E}_1=41,6$ ккал/моль, $\bar{E}_2=32,9$ ккал/моль]. Отмечено уменьшение $\bar{E}$ в ряду $(C-C) > (C-Si) > (C-Ge) > (C-Sn) > (C-Pb)$.

М. Туркина

органические соединения

1971

УЗ Б67. Расчет конформации и теплот образования органических молекул в минимальном базисе функций слеитеровского типа. Radom L., Hehre W. J., Pople J. A. Conformations and heats of formation of organic molecules by use of a minimal slater type basis. «J. Chem. Soc.», 1971, A, № 14, 2299—2303 (англ.)

Методом Рутана в миним. базисе ФСТ, аппроксимированных 3 гауссовыми функциями (ГФ), осуществлен расчет всех изомеров большого числа ациклич. молекул, содержащих 1—3 атома C, N, O или F, к-рые могут быть

ΔH_f

(расчет)

2, 1972, 3.

изображены в виде классич. валентных структур. Полученные конформации, отвечающие минимуму энергии, как правило, соответствуют наиболее стабильным формам, найденным экспериментально и расчетным путем в расширенном базисе. Исключение составляют только молекулы, у которых разница в энергиях различных конформаций мала: HCOOH , HNO_2 , CH_3NNH . Вычисленные теплоты образования отличаются от эксперим. значений в среднем на 4,8 ккал/моль.

А. Клягина

1874

 $\text{Et}_3\text{SnOOCMe}$ $\text{Me}_3\text{SiO}_2\text{CMe}_3$

50898p Oxygen-oxygen bond dissociation energy in a series of organometallic peroxides. Rabinovich, I. B.; Kiparisova, E. G.; Aleksandrov, Yu. A. (Nauchno-Issled. Inst. Khim., Gorki, USSR). *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 1971, 200(5), 1116-18 [Chem] (Russ). The std. heats of combustion and formation of $\text{Me}_3\text{SiOOCMe}_3$, $\text{Et}_3\text{GeOOCMe}_3$, $\text{Et}_3\text{SnOOCMe}_3$, $\text{Et}_3\text{SnOOCMe}_2\text{Ph}$, $(\text{Et}_3\text{Ge})_2\text{O}$ and $(\text{Et}_3\text{Sn})_2\text{O}$ were calcd. from combustion bomb data and x-ray detn. of the crystal structure of SiO_2 . The mean O-O bond energies were: $\text{Me}_3\text{SiOOCMe}_3$ 47 kcal/mole; $\text{Et}_3\text{GeOOCMe}_3$ 46; $\text{Et}_3\text{SnOOCMe}_3$ and $\text{Et}_3\text{SnOOCMe}_2\text{Ph}$ 49; M-O bond energies: $(\text{Me}_3\text{Si})_2\text{O}$ 105; $(\text{Et}_3\text{Ge})_2\text{O}$ 91; $(\text{Et}_3\text{Sn})_2\text{O}$ 83.
G. M. Kosolapoff

C.A. 1972. 76. 10

Оправа. соежене
согепеане Кучофог.

1973

46367j Revised group additivity parameters for the enthalpies of formation of oxygen-containing organic compounds. Eigenmann, H. K.; Golden, D. M.; Benson, S. W. (Dep. Thermochem. Chem. Kinet., Stanford Res. Inst., Menlo Park, Calif.). *J. Phys. Chem.* 1973, 77(13), 1687-91 (Eng). Data on ΔH_f° , the std. enthalpies of formation, in the gas phase for over 300 O-contg. compds. are critically examd. Internal consistencies within this set are scrutinized from the viewpoint of group additivity principles. New values for the contributions of groups to ΔH_f° , as well as higher order corrections, are obtained from multilinear regression anal. of the data. For alcs. and ethers obsd. values and group additivity values agree to within ± 1.0 kcal/mole, which is about the exptl. precision. The data on these classes are very self-consistent. Very nearly the same is true of aldehydes and ketones. Major discrepancies exist in the classes of acids and esters and a few key compds. deviate seriously from other members of their class.

ОЗОР
(ΔH_f°)
C. A. 1973. 79 N 8

$\text{Me}_2\text{NOCH}_3 (\Delta H_v)$

XIV 6011 1974

Петров В. М.

Тр. по химии и хим. биологии.

(Торский) 1974, вып ~~1(36)~~, 100-102

Есть оригинал.

Б (Ф)

70923.3611

97222

1974

XIV

Ch

опер. экз.

9164

Ngauv Song Nguon, Sabbah Raphael,
Laffitte Marc. Thermodynamique de compos-
es azotes. III. Etude thermochimique de
la glycine et de la L- α -alanine.

"Thermochim. acta", 1977, 20, N 3, 371-
380 (англ.)

0967 пнк

948 948 9 5 8

ВИНИТИ

NEt₄N₃ (ΔH_{aq}) XIV-9024/1979

Карпенко Г. В., Полторацкий Г. М.

Майорова Т. Н., Цветкова Н. Н.

8-я Всес. конф. по калориметрии и хим. тер-
модинам., Иваново, 1979. Тез. докл. I-НОР.

Иваново, 1979, 217. Термохимия растворов
органических азидов в смеси с метиловым
спиртом с водой.

РЖ хим., 1980

351456



В (ф)

1980
92: 136286c Prediction of redistribution free enthalpies on Group IV elements based on a bond-energy decomposition scheme. Elkaim, Jean Claude; Pace, Simonne C.; Riess, Jean G. (Lab. Chim. Miner. Mol., 06034 Nice, Fr.): *J. Organomet. Chem.* 1980, 185(3), 335-49 (Fr). A method is described for the prediction of redistribution free energies on, and between, central groups based on Group IVA elements. It is based on a bond-energy decompn. scheme analogous to that of Zahn, using additive 2nd-order parameters assigned to each pair of substituents of the central element. The free energies were calcd. for 90 equil. concerning the exchange of the most usual substituents; these predictions were in 90% of the cases within exptl. error. The free energies corresponding to the exchange of 2 substituents X and Y on a given element are independent of the no. of exchangeable sites of the central atom. The exchange of 2 substituents between distinct centers is also given by a same quantity, but taken a variable no. of times, depending on the relative functionalities of the centers involved. A single exptl. value allows the prediction of numerous equil. The free energies were calcd. for 85 equil. of this type, and are in good agreement with the exptl. values. The anal. of the calcd. values brought to light several general trends concerning the redistribution equil. on the various alkylated Group IV elements.

C.A. 1980.92 N16

Карбонум

1997

127: 255556u The calorimetry studies of carbolite - a new carbon phase. Palnichenko, A. V.; Gurov, A. F.; Kopylov, V. N.; Kusano, K.; Tanuma, S. (Institute of Solid State Physics, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, Russia 142432). *Proc. - Electrochem. Soc.* 1997, 97-14 (Recent Advances in the Chemistry and Physics of Fullerenes and Related Materials), 859-867 (Eng), Electrochemical Society. The sp. heat, $C(T)$, measurements in the temp. ranges $4.5 \text{ K} < T < 30 \text{ K}$ and $130 \text{ K} < T < 730 \text{ K}$ of a new C crystal phase synthesized by condensation of high temp. C gas were performed. For the adequate description of the $C(T)$ dependence, the chain-like crystal structure of the material was considered, and the model of sp. heat for quasi-one-dimensional crystals was used. By x-ray and high temp. sp. heat measurements the material is a metastable phase under the normal conditions, undergoing the irreversible complicated transformations to the amorphous state upon heating above $T \approx 350 \text{ K}$.

Cp

C.A. 1997, 127, 217

Карбоциклы металлов

1955

F: carbonyl

P: 1

131:205262 Fundamental metal carbonyl
equilibria. V: Reinvestigation of t equilibrium
between dicobalt octacarbonyl and cobalt
tetracarbonyl hydrid hydrogen pressure. [Erratum to
document cited in CA

130:29804]. Tannenbaum Rina; Dietler, Urs K.;
Bor, Gyorgy; Ungvary, Ferenc (Department of Chemic
Engineering and Materials Science, University of
Minnesota, Minneapolis, USA). J. Organomet. Chem.,

579(1-2), 409 (English) 1999 The heading to the third column in Table 2 should be .DELTA.S (cal mol⁻¹ K⁻¹), and not .DELTA.H (kcal mol⁻¹). The correct Table 2 is given. errat review equil
cobalt carbonyl hydrogen; review equil cobalt
carbonyl hydro erratum; hydroformylation cobalt
carbonyl hydrogen equil erratum review; carbonyl
hydrogen equil review erratum; hydrogenation heat
cobalt carbonyl review erratum; entropy cobalt
carbonyl hydrogenation review erratum

C - карбиды перех. элементов

Om. 42308

1981

ΔH_f - теоретич. предсказание !!!
Milokozic Adolf

J. Less - Common Metals, 1981, 49,
p. 139 - 143

The heatsst of formation of
stoich. nitrides and carbides.

Om. 42308