

C - O

8147 -IV

1938

C<sub>3</sub>O<sub>2</sub>, C<sub>2</sub> (g, Hf, D)

Klemenc, Wagner

Z. anorgan. und allgem. Chem.,  
1938, 239, 1-13

J, M

$C_3 O_2$  ( $K_{cc}$ ;  $K_{co}$ ;  $K_{24}$ ;  $K_{13}$ )  $\tilde{\nu}$  +937 5425

Thompson H. W., Linnett J. W.

Nature 1937, 140, 1065

"Force constants and molecular  
structure." 2

10

C.A., 1938, 1529<sup>8</sup>

8134 - IV

1939



204. Kistiakowski, Rice  
J. Chem. Phys., 1939, 2, 281-88

J

9103 - IV

1941

Thompson

5. Trans. Faraday Soc. 37, 249 (1941)

$C_3O_2$  ( S, Cp, H, K )

"Thermodynamic functions of ...

Circ. 500 J

1965

M-221-1D

$C_3O_2$  ( $C_p, T_m, \Delta H_m, \alpha, \Delta H_v, S, \beta$ )

Mc Dougall L.A., Kilpatrick J.S.

J. Chem. Phys., 1965, 42, N<sup>7</sup>,  
2311-21

Entropy and related thermo-  
dynamic properties...

PX, 1965, 15397

540 orig.

С-О соедин.

1983

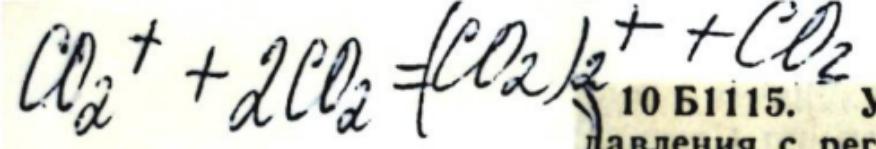
Фомичев Е. Р., Кацакан  
Чук А. А., и др.

перлит. Тр. 8. Вес. кокс. го

св-ва, перло. агрег., Куйбышев,  
Tm;

1982. Куйбышев, 1983,

70-73. (сост.  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; I)



1983

10 Б1115. Улучшенный ионный источник высокого давления с регулируемой температурой и коаксиальным расположением электронного пучка и выходной щели для ионов. An improved high-pressure, temperature-variable ion source with coaxial electron beam/ion exit slit. Коррен Петра А. М. van, Кемпег Паул Р., Ильес Андреас J., Борерс Майкл Т. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Process.» [formerly «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.»], 1983, 54, № 3, 263—282 (англ.)

Описана улучшенная конструкция ионного источника высокого давления (0,3—1,0 Торр) с регулируемой т-рой (80—525 К, неоднородность до 5°), коаксиальным расположением электронного и ионного пучков и цилиндрически симметричным источником. С помощью кольцевых электродов внутри источника создано параллельное оси однородное электрич. поле, движущее ионы к выходной щели. Источник позволяет создавать импульсы электронного тока длительностью 500 нс; с помощью системы регистрации осуществляется измерение зависи-

14, 15;

X. 1984, 19, N 10

мости ионного тока от времени. Из этих зависимостей определены подвижности  $\text{Ne}^+$  в  $\text{Ne}$ ,  $\text{Ar}^+$  в  $\text{Ne}$ ,  $\text{Ar}^+$  в  $\text{Ar}$  и коэф. диффузии, совпадающие с лит. данными в пределах 5%. По зависимости степени завершенности р-ции

от времени измерена скорость р-ции  $\text{N}_2^+ + 2\text{N}_2 \xrightarrow{k} \text{N}_4^+ + \text{N}_2$ . [ $k = (5,5 \pm 0,3) \cdot 10^{-29}$  см<sup>6</sup>/с,  $d\ln k/dT = -1,67 \pm 0,08$  при  $T = 300$  К], обсуждена зависимость константы скорости от энергии ионизирующих электронов. Обсуждены влияние дрейфа ионов в электрич. поле на эффективную т-ру р-ции, влияние разности коэф. диффузии на эффективность вытягивания ионов из источника. С высокой точностью измерены энталпия и энтропия р-ции  $\text{CO}_2^+ + 2\text{CO}_2 \xrightarrow{k} (\text{CO}_2)_2^+ + \text{CO}_2$  ( $15,8 \pm 0,1$  ккал/моль и  $19,5 \pm 0,3$  кал/моль К, т-рный интервал 415—520 К), согласующиеся с лит. данными. Обсуждены критерии наличия термодинамич. равновесия при таких измерениях.

Д. В. Чеховской

Г. А  
Э

C-O

1983

Payboe  
Publ. Spec.

99: 94474b Chemical and electrochemical equilibria in the presence of a gaseous phase. 8. Oxygen-carbon. Pourbaix, Matcel; Yang, Xi Zhen; Zhang, He Ming (Belg. Cent. Corros. Study, Brussels, Belg.). *Rapp. Tech. - Cent. Belge Etude Corros.* 1983, 144(265-266), RT.266/1-RT.266/87 (Eng). Phase equil. in the C-O system were calcd. from published thermodn. data. Solid substances considered include O<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, graphite, diamond, CO, CO<sub>2</sub>, and C<sub>3</sub>O<sub>2</sub>. Liqs. considered were O<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, and C<sub>3</sub>O<sub>2</sub>. Gaseous species considered were O, O<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, C, C<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>, C<sub>4</sub>, C<sub>5</sub>, C<sub>2</sub>O, C<sub>3</sub>O<sub>2</sub>, CO, and CO<sub>2</sub>.

C.A. 1983, 99, N/2

C<sub>3</sub>O

1984

Brown Ronald D.,  
Rice E. H. N.

$\Delta H_f$ ;

J. Amer. Chem. Soc.,  
1984, 106, N<sub>22</sub>, 6475-  
-6478.

(see. C<sub>3</sub>O; ?)

Kraemer's  $\text{Cl}_2$

1985

DUBOV D. YU., Predte-  
chensky M. R., et al.

X Int. Symp. Mol. Beam

$\text{I}_f \text{H}$ ; Carres, June 3-7, 1985.

S. I., [1985], 1-3.

(see. Kraemer's  $\text{N}_2\text{O}$ ; 1)



1985  
7

104: 40706g Determination of the dissociation constant of molten lithium carbonate/sodium carbonate/potassium carbonate using a stabilized zirconia oxide-ion indicator. Ito, Yasuhiko; Tsuru, Kiyoshi; Oishi, Jun; Miyazaki, Yoshinori; Kodama, Teruo (Fac. Eng., Kyoto Univ., Kyoto, Japan 606). *J. Power Sources* 1985, 16(1), 75-82 (Eng). The dissociation const. of the reaction  $\text{CO}_3^{2-}(l) \rightarrow \text{CO}_2(g) + \text{O}^2(l)$  in the title melt was detd. by using a stabilized zirconia oxide-ion indicator. The dissociation const.,  $K_d = 4.03 \times 10^{-3}$  Pa at 873 K.

K grcc.

c.A.1986, 104, N6

*C<sub>8</sub>O<sub>2</sub>*

1988

18 Б2025. Новая структурная модель оксида графита. A new structure model of graphite oxide. Nakajima T., Mabuchi A., Hagiwara R. «Carbon», 1988, 26, № 3, 357—361 (англ.)

Для оксида графита (I), полученного методом Хуммерса—Оффемана (Hummers et. al. «J. Am. Chem. Soc.», 1958, 80, 1339), предложена новая модель строения, характеризующаяся сверхструктурным упорядочением вдоль оси *c*. Основу I составляют спаренные С-слои, связанные друг с другом *sp*<sup>3</sup> связями атомов С. Над и под слоями находятся карбонильные и гидроксильные группы. Симметрия слоев гексагон., точечная группа *6m2*. Предложенная модель является промежуточной между двумя идеализированными:  $\text{C}_8(\text{OH})_4$  ( $c_0=8,22 \cdot 2 \text{ \AA}$ ) и  $\text{C}_8\text{O}_2$  ( $c_0=5,52 \cdot 2 \text{ \AA}$ ). По данным хим. анализа состав м. б. записан в виде  $\text{C}_8\text{O}_{2-x}(\text{OH})_{2x}$ ,  $x=0—2$ . Методы исследования: порошковая рентгенография и ИК-спектроскопия.

Г. Д. Илюшин

*Х. 1988, 19, N 18*

ГО

1990

(n=3-6)

М.Н.

ЗБ1041. Синтез молекул  $C_4O$  и  $C_6O$  и их структура / Исиакава Кэндзи // Кагаку то коге = Chem. and Chem. Ind.— 1990.— 43, № 4.— С. 675—676.— Яп.

Сообщается о возможности получения молекулы  $C_4O(^3\Sigma^-)$  в результате ее фотовозбуждения молекулы  $C_3$  и дальнейшей р-ции с CO при 4 К. Аналогичным образом получены и другие молекулы  $C_nO$  ( $n=3-6$ ). Неэмпирич. методом ССП с использованием двухэкспонентного базисного набора, дополненного поляризаци-ф-циями, проведены расчеты электронного и геометрич. строения молекул  $C_nO$  ( $n=3-6$ ) и с учетом эффектов электронной корреляции по теории возмущений Меллера — Плессета 4-го порядка оценена энергетика их диссоциации на составляющие фрагменты.

И. Н. Сенченя

X.1991, №3

*C<sub>2</sub>D<sub>6</sub>*

*1990*

112: 186378d Physicochemical properties of chlorine oxides.  
I. Composition, ultraviolet spectrum, and kinetics of the thermolysis of gaseous dichlorine hexoxide. Lopez, Maria I.; Siere, Juan E. (Fac. Cienc. Exactas, Univ. Nac. La Plata, 1900 La Plata, Argent.). *J. Phys. Chem.* 1990, 94(9), 3860-3 (Eng). The exptl. evidence presented here shows that gaseous Cl<sub>2</sub>O<sub>6</sub> at room temp. has essentially the compn. Cl<sub>2</sub>O<sub>6</sub> and not ClO<sub>3</sub> as currently accepted. Vapor pressure measurements of liq. Cl<sub>2</sub>O<sub>6</sub> were made at 5-45°. The absorption cross section values of gaseous Cl<sub>2</sub>O<sub>6</sub> are ~3 times higher than those assigned to ClO<sub>3</sub> by other authors. The products of the thermal decompr. of gaseous Cl<sub>2</sub>O<sub>6</sub> are mainly chlorine perchlorate and O. The kinetics of the decompr. over the Cl<sub>2</sub>O<sub>6</sub> pressure range 0.5-1.2 Torr at 20-30° follows a 1st-order rate equation and is independent of the total pressure. A unimol. process, namely, Cl<sub>2</sub>O<sub>6</sub> → Cl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> + O<sub>2</sub>, proceeding at the high-pressure limit through a complex fission reaction is postulated. The rate const.  $k = 10(11.4 \pm 1.2)\exp[-10370 \pm 800]/T$  s<sup>-1</sup> is ded.

*gabrielle  
rapa,  
yq okucne  
xropa*

*C.A. 1990, 112; n20*

*(all. open)*

$(CO_2)_2^-$

1992

117: 221134h Multimolecular clusters and their isomerism  
LVI. Temperature mobility of isomeric cluster equilibria  
maximizing the effects in the dimeric carbon dioxide ( $((CO_2)_2)$ ) (g) isomeric system. Slanina, Zdenek (Max-Planck Inst. Chem., Mainz, Germany). *Thermochim. Acta* 1992, 205, 1-10 (Eng). Theor. studies indicate that isomerism in mol. clusters is a typical feature of the species, having substantial effects on the thermodyn. and particularly on the heat capacity term. The latter term can be enhanced considerably by isomeric interplay, esp. if the temp. interchange of relative stability of the isomeric structures takes place. By using the example of the  $((CO_2)_2$  (g) isomeric cluster system, it is shown how the overall heat capacity enhancement can be maximized with respect to the isomeric energy sepn. It is shown that the max. enhancement amts. to about 136 J/K.mol for the energy sepn. of about 53 kJ/mol.

(A H gungunayal)

C.A. 1992, 117, N22

СДЗ

1996

17Б32. Конформационная динамика комплексов CO:CO<sub>2</sub> в аргоновых матрицах. I. Результаты термодинамических рассмотрений, полученные из экспериментальных кинетических данных. Conformational dynamics of the CO:CO<sub>2</sub> complex in argon matrices. I. Thermodynamical considerations derived from the observed kinetics / Raducu V., Gauthier-Roy B., Dahoo R., Abouaf-Marguin L., Langlet J., Caillet J., Allavena M. // J. Chem. Phys.—1996.—105, № 22.—С. 10092–10098.—Англ.

(kp)

X. 1997, N 17

1997

$(CO_2)_{13}$

128: 106603a The melting phase transition in small carbon dioxide clusters. Maillet, Jean-Bernard; Boutin, Anne; Fuchs, Alain H. (Laboratoire de Chimie-Physique des Materiaux Amorphes, Department of Physical, Universite Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *Mol. Simul.* 1997, 19(5-6), 285-299 (Eng), Gordon & Breach Science Publishers. Small isolated carbon dioxide clusters have been studied by canonical and microcanonical mol. dynamics simulation. The phenomenon of "dynamical coexistence" between solidlike and liquidlike forms of the  $(CO_2)_{13}$  cluster was found, in a finite energy range. An animation of this phenomenon is shown. Coexistence is assocd. with bimodality in the probability distribution of the short-time averaged internal kinetic energy of the system in the microcanonical ensemble. This phenomenon has also been obsd. in  $(CO_2)_{12,14}$ . It is interpreted in terms of the energy distribution of the potential energy surface min. This statistical mechanics tool enables one to understand why dynamical coexistence has also been obsd. in previous works on  $(Ar)_{13}$  and  $(N_2)_{13}$  but not in the case of  $(Ar)_{8,14}$  and  $(SF_6)_{13}$ .

$(T_m, T_{t2})$

C.A. 1998, 128, N9



1998

129: 294532u, Solubility of  $CO_2$  in the molten  $Li_2CO_3 + Na_2CO_3 + K_2CO_3$  eutectic mixture at 973 K. Moyaux, D.; Peeters, D.; Claes, P. (Laboratory of Inorganic and Analytical Chemistry, Catholic University of Louvain, B-1348 Louvain-la-Neuve, Belg.). *Molten Salt Forum 1998, 5-6(Molten Salt Chemistry and Technology 5)*, 131-134 (Eng), Trans Tech Publications Ltd.. The solv. of  $CO_2$  in molten  $Li_2CO_3-Na_2CO_3-K_2CO_3$  eutectic mixt. at 973 K was detd. by potentiometric titrn. of samples of the melt satd. with  $CO_2$  at 1 atm. The solv. value deduced in this way was  $10^{-1}$  mol/L, which was surprisingly high if it is compared with the low current densities obsd. for the electrochem. redn. of  $CO_2$  in satd. melts. In order to explain this situation, it was proposed that  $CO_2$  dissolves in molten carbonates principally as the dicarbonate ion,  $C_2O_5^{2-}$ . This assumption was strengthened by a theor. investigation that calcd. a free enthalpy value of -142 kJ/mol for the prodn. of  $C_2O_5^{2-}$  by reaction of  $CO_2$  with  $CO_3^{2-}$ .

 $(\Delta H_f)$ 

C.A. 1998, 129, N 22

C<sub>60</sub>

1999

C<sub>60</sub>

(C<sub>p</sub>, 4-350K)

F: C<sub>60</sub>  
P: 1

C<sub>60</sub> (C<sub>p</sub>, 4-350K, ΔS)

ΔS

01.20-19Б2.292. Колебания решетки и термодинамическая стабильность полимеризованного фуллерита C[60], рассчитанные из теплоемкости. Lattice vibrations and thermodynamic stability of polymerized C[60] deduced from capacities / Inaba Akira, Matsuo Takasuke, Fransson Ake, Sundqvist Bertil J. Chem. Phys. - 1999. - 110, N 24. - С. 12226-12232. - Англ.

В диапазоне температур от 4 до 350 К измерены теплоемкости одномерно-(1D) двумерно-(2D) полимеризованных воздействием давления фаз C[60], и также термически деполимеризованного C[60]. Полученные данные использованы для анализа колебаний решетки и термодинамич. стабильности фаз C[60]. Из

теплоемкости (m>100 K) установлено

что: 1) как трансляционные, так и ротационные колебания решетки полимеризованных фаз довольно жесткие, 2) анизотропия проявляется в характеристиках фаз более низкой размерности и 3) ангармоничность полимеризованных фаз такая же, ка исходного фуллерита. Нормальный фуллерит С[60] имеет при 300 К избыточную энтропию 67,8 и 99,4 Дж/К\*моль относительно 1D- и 2D-фаз соответственно. Термодинамич. стабильность рассмотрена исходя из двух возможных фазовых диаграмм С[60]. Библ. 19.

C60

1999

F: C60 C<sub>60</sub> (q, 6-350K, T<sub>tr</sub>, ΔH<sub>tr</sub>)  
P: 1

01.20-19Б2.283. Теплоемкость гигантского монокристалла C[60]. Heat capacity of a giant single crystal of C[60] / Miyazaki Yuji, Sorai Michio, Lin Ruisen Dworkin Ary, Szwarc Henri, Godard Jean // Chem. Phys. Lett. - 1999. - 305 3-4. - С. 293-297.  
- Англ.

Т<sub>tr</sub>  
ΔH<sub>tr</sub>

Теплоемкость монокристалла C[60] размером 8\*6\*6 мм{3} измерена в интервал 6-350 К в адиабатич. калориметре с точностью 'ЭКВИВ' 1% ниже 30 К, 0,5% в интервале 30-60 К и 0,3% выше 60 К. Фазовый переход порядок - беспорядок, связанный с ориентационным упорядочением молекул, обнаружен при 260 К, 'ДЕЛЬТА'[trs]H=10,4'+-'0,1 кДж/моль, 'ДЕЛЬТА'[trs]S=45,4 Дж/К\*моль вычисл. по аномальной части теплоемкости. C[p](T) в области T[trs] подобна зависи C[p] других шарообразных молекул адамантана и кубана. Библ. 29.