

CH.

282-16

I952

H, H₂, Cl, Cl₂, O, O₂, N, N₂, S₂, OH, NO, CO, H₂S,
CS₂, HCN, COS, NH₃, C₂N₂, H₂O, CO₂, NO₂, CH₂, CH₃, SO₂,
SO₃, N₂O, H₂O₂, C, β -C, CH, COH, CHO, CH₄, C₂H₆,
C₂H₄, C₂H₂, C CH₃OH, C₂H₅OH, CH₃NHNH₂ (Cp, H-H, S)

Ribaud G.

Publ.sci.et tech.ministere air (France),
I952, No.266, I69pp.

Thermodynamic constants gases at high tem-
peratures. Ch.A., I953, 6722c

10

2097-11

$C_2H, CH, C_2H_2^+, C_2H^+, C_2^+, CH^+, C^+(CH_3)$ 1957

C_2H_2, C_2H, CH, C_2 (D)

Coats F.H., Anderson R.C.

J. Amer. Chem. Soc., 1957, 79, n 6,
1340-1344

Термодинамические величины,

...

M, J

CH

BP-142-IV; 2043 IV

I957

Kp (H_2 , C_2 , N_2 , O_2 , CH, CN, CO, NH,
NO, OH)

Pecker J.C., Peuchot M.

Mém.Soc.roy.sci.Liége, I957, I8, Fasc.
uniqu., 352-356 ()

Les constantes de dissociation des
molécules diatomiques d'intérêt astro-
physique.

PX, I958, 66532

Берг г. н.

CH.

Вар - 5439 - III

1957

Pecker J.C.

Peuchot M.

КАВ.

Конеч. гуссы. 2^х амол. молк.

$\Delta Z / K_p$ (H, H₂, CH, CH₂, CH₃, CH₄, C₂H₂, C, C₂)

1958

498-IV

Kroepelin H., Neumann Kl.-K., Winter E.

Abhandl. Braunschw. wiss. Ges., 1958,
10, 166-194 (Hem.)

Thermodynamische Funktionen und Hilfswerte zu
ihrer Berechnung für Kohlenstoff und Wasserstoff
sowie einige ihrer Verbindungen für den Tempera-

PM Xiii., 1959

10, M 48204

p-1

zur Bezeichnung 1000 bis 500000k

499-IV

F. Kp (CH , CH_2 , CH_3 , CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4)

1959)

Kroepelin H., Winter E.

Thermodyn. and Transp. Properties of Gases, Liquids and Solids. N.Y.-
Toronto-London, McGraw-Hill Book Co., Inc., 1959, 438-452 (arrn.)Equilibria in $\text{C}+\text{H}_2$ and $\text{C}+2\text{H}_2$ systems at temperatures
between 1000 °K and 6000 °K.PIH Sum., 1960.
25675 M

Vap

CH (ΔH_f)

564-IV

1962

Bernstein H.J.

Trans. Faraday Soc., 1962, 58, N 12,
2285-2306 (ann.)

Bond energies in hydrocarbons

Pp ., 1963, 8D39

M, 10

7539 - IV

1962

, Hf (CH, CH₂, CH₃, C₂H)

Cowperthwaite M., Bauer S.H.
J. Chem. Phys., 1962, 36, N 7,
1743-1753
Estimation of molecular ...

J, M

1962

IV-3816

CH₃; CH₂; CH; C; Cl; Br; J; NH₂;
NH; O; CO; CN; CO₂; HCOO; COOH; OH (P)

Moritz P.
Magy.Kem.Lapja, 1962, 12, 452-5
Approximation of vapor ...

K

CH

Mortimer C.T.

1962

ΔH Oxford - London - New York - Paris,
Pergamon Press, 1962, XII (annex.)

Reaction heats and bond strengths.

Based on a series of lectures given to
postgraduate students at a Univer-
sity of Keele, 1960.

~~XXXXXXXXXXXX~~



CH

Pedley J.B.

1962

(см. CH₂) I Trans. Faraday Soc., 58, v1, 23.

CH₂

Механизм образования и
важнейшие цепи в моле-
кулах и радикалах. Часть I
Радикалы углеводородов.

1964

~~4009~~

CN, CH, NH (Kp, t.d.f.)

Bouvier A.

Compt.rend., 1964, 258(21),
5210-12

Determination of free energy of the
dissociation constants of the CN ...

J,M

CA, 1964, 61, N 7.

7775a - IV

Е С Т Ь Ф. Н.

C-M

ΔA_0

(в см³ и
C₂H₆)

х. 1968. 14

1987

14 Б937. Конкурирующий мономолекулярный распад в химически активированных радикальных системах. Larson C. W., Rabinovitch B. S., Tardy D. C. Competitive unimolecular decomposition in chemically activated radical systems. «J. Chem. Phys.», 1967, 47, № 11, 4570—4594 (англ.)

Исследован конкурирующий мономолекулярный распад химически активированных радикалов. Измерены абсолютные и относительные скорости распада радикалов 3-метил-бутил-2, 3-метил-пентил-2, 3-этил-пентил-2, 2-метил-пентил-3, 2-метил-пентил-3 и 3-метил-гексил-3, каждый из к-рых имеет от двух до четырех каналов распада с разрывом связи C—C. Теоретическая интерпретация результатов дана в рамках статистической теории мономолекулярных р-ций. Сравнение с экспериментом позволяет оценить возможные границы разности

+1

12

энергий активации для распадов по различным каналам, а также существенно сузить возможные модели для построения активированного комплекса (в частности, ограничить возможные вариации частот активированного комплекса). Для величины разности энергий $D(\text{CH}_3-\text{H})$ и $D(\text{C}_2\text{H}_5-\text{H})$ получено 5,7 ккал/моль. Разность между теплотами присоединения метильного и этильного радикалов к олефинам систематически изменяется от $-0,2$ до $0,9$ ккал/моль.

Е. Никитин

71225.4339

Ph, Ch, A

CH (Do, ΔVf)

40892

1967

XIV-9844

Linevsky Milton J. Relative oscillator strengths of CH. The heat of dissociation of CH. "J.Chem. Phys.", 1967, 47, N 9, 3485-3490 (англ.)

ВНИИТО

10

605 ВИНТИ

8 Б15. Энергия разрыва связей углерод — галоген и углерод — водород в молекулах галогенопроизводных парафиновых углеводородов. Витвицкий А. И. «Ж. орган. химии», 1967, 3, № 12, 2081—2083

Показано, что энергия диссоциации связи $C-X$ и $C-H$ в галогенопроизводных предельных углеводородов расходуется на разрыв ковалентной связи $C-X$ и $C-H$, на преодоление электростатического взаимодействия атомов X и H с атомом C и на перевод валентной оболочки реагирующего атома углерода из sp^3 гибридного состояния орбит в sp^2 -форму. Рассчитанные величины энергии диссоциации связей $C-X$ и $C-H$ сравниваются с литературными данными. Объясняется некоторое отличие закономерностей разрыва связей во фторпроизводных углеводородах от других галогенопроизводных.

Автореферат

1. 1968. 8

+1 C-Gal



[CH]₈

ΔH_f

1941
9 Б50. Теплоты образования и энергии напряжения
изомеров [CH]₈, рассчитанные полуэмпирическим мето-
дом ССП МО с учетом всех валентных электронов.
Iwamura Hiizu, Morio, Kazuhiko, Kunii
Tosiyasu L. Heats of formation and strain energies
for [CH]₈ isomers calculated by all—valence—electron
semi—empirical SCF—MO theories. «Chem. Commun»,
1971, № 21, 1408—1409 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении
МЧПДП/1 (J. Amer. Chem. Soc., 1970, 92, 3854), рассчи-
таны теплоты образования и энергии напряжения всех
возможных изомеров состава [CH]₈. Полученные ре-
зультаты хорошо согласуются с эксперим. данными и
относит. устойчивостью рассмотренных углеводородов,
оцененной по данным термич. интерконверсии. Резуль-
таты расчета методами ППДП/2 и МЧПДП/2 хуже со-
гласуются с эксперим. данными. По резюме

РЖХ, 1972, ~9

CH

Kim, Hojung,
Kim Hie-joon.

1972

(ces. no. 1) "Doehan Hwahak Hwoeje,"
1972, 16, no. 4, 214-218.

(ces. Lit., III)

CH

1973

Boenger, Ilka. et al.
Chem. Tech. (Leipzig)
1973, 25(3), 152-6.

P; Cp;

H_T - H₀

(cell. H; I)

СН

1973

- 6 Б663. Масс-спектрометрическое определение теплоты образования свободных радикалов. Sharma D. K. Sen, Franklin J. L. Heats of formation of free radicals by mass spectrometry. «J. Amer. Chem. Soc.», 1973, 95, № 20, 6562—6566 (англ.)

Предложен метод вычисления теплоты образования ΔH (обр.) свободных радикалов R в процессе $R_1 R_2 + e \rightarrow R_1 + R_2 + 2e$, по определению потенциалов появления (ПП) одного из радикалов и избыточной энергии (E) образовавшегося иона R_2^+ . Величина E связана с энергией, переносимой ионом (ϵ) выражением $\epsilon = E \alpha N$, где α — эмпирич. константа Хенея и Франклина, равная

расчет
 ΔH_f ;

⑥



X.1974N6

⑦ теплота образ
расчет

0,44; N — число колебательных степеней. Экспериментально ϵ определялось методом отклонения Гауберта. По величине ПП CH_3^+ в р-ции $\text{CH}_3\text{R} + e \rightarrow \text{CH}_3^+ + \text{R} + 2e$ определены ΔH (обр.) для углеводородных $\text{R} = \text{C}_3\text{H}_5$ (I), $\text{CH}_2=\text{CCH}_2$ (II), C_2H_5 , диметил-производных I и II и азотсодержащих $\text{R} = \text{NH}_2$, CH_3NH , $(\text{CH}_3)_2\text{N}$, CH_2NH_2 , $\text{CH}_2\text{N}(\text{C}_2\text{H}_5)\text{H}$, $\text{CH}_2\text{N}(\text{C}_2\text{H}_5)_2$. Значения ΔH (обр.) (I) = 53 ккал/моль и энергии связи D ($\text{R}-\text{H}$) в пропилене 100 ккал/моль; ΔH (обр.) (II) = 40 ккал/моль; ΔH (обр., C_2H_5) = 130 ккал/моль. Значения ΔH (обр.) и D сравниваются с приведенными в литературе.

М. Туркина

40521.7275
A, A-z, TE

CH

38226 02
(K) #

1974

13-4951

Fehsenfeld F.C., Dunkin D.B., Ferguson E.E.

On the association of C+ and COH+
with H₂.

"Astrophys.J.", 1974, 188, N 1, Part 1,
43-44

(англ.) 0 1 1 4 0000 !

092 095-1 0 6

ВИНИТИ

$\ddot{C}H$
paguwa

ORT. 4824

1975

Kerr J. A., et al.

Handbook Chem. Phys.,
55th ed., 1974-75.

~~(D)~~

(ΔH_f)

CH

* 43 15578

1976

Bischof P.

(ΔH_f)

J. Amer. Chem Soc " 1976,
98, 1122, 6844-49.

CH ommu 6725 1978

Kühnel W., et al.

Zeitschrift

H⁰₂₉₈

Z. phys. Chem., 1978,
259 (2), 363-68.

„Bildungswärmen...“

$(CH)_x$ полиацетилен

номер 10688

1980

$(C_2H_2)_x$

(Cp)

✓ 94: 53868m Thermal conductivity and specific heat of pure and iodine-doped polyacetylene $(CH)_x$. Mermilliod, N.; Zuppiroli, L.; Francois, B. (Sect. Etud. Solides Irradies, Cent. Etud. Nucl. Fontenay-aux-Roses, 92260 Fontenay-aux-Roses, Fr.). *J. Phys. (Orsay, Fr.)* 1980, 41(12), 1453-8 (Eng). The thermal conductivities and the sp. heats of pure and I-doped samples of polyacetylene $(CH)_x$ were detd. The thermal cond. of pure $(CH)_x$ is ~ 75 mW/cm-K at room temp. and decreases monotonically to 1.6 mW/cm-K at 25 K. The sp. heat dependence with temp. is roughly linear from about 0.5 J/cm³-K at 300 K down to 0.04 J/cm³-K at 25 K. I doping induces no change in the sp. heat behavior but the thermal cond. increases significantly: ~ 5 mW/cm-K for a 4% doped sample at room temp. which could be attributed to a charge-carrier contribution. The intrinsic elec. cond. may be ~ 700 times higher than the macroscopic measured value.

C.A. 1981, 94, 18

CH

Ommuck 14287

1982

Kühnel W., Gey E.,
et al.

$\Delta H_{298.15}^{\circ}$,
коэффициент

Z. phys. Chem. (DDR),
1982, 263, N3, 641-
- 645.

CH

1982

Rittby Magnus, Elan-
der Nils., et al.

mpgic-
conuayus

Mol. Phys., 1982, 45,
N3, 553 - 572.

(see. HgH ; I)

CH(2)

[Om. 19253]

1984

Böhlend T., Temps F.,

$\Delta_f H;$

Ber. Bunsenges. Phys.
Chem., 1984, 88, N 5,
459-461.

CH

[Am. 20841]

1984

снхтр
лазер-ин-
терпрет.
физичес.

Cattolica R. F., Stepan-
ski D., et al.,

J. Quant. Spectrosc.
and Radiat. Transfer,
1984, ● 32, N 4, 363-
370.

CH

[Om. 22042]

1985

$\Delta_f H$
(per cent)

Pople J. A., Luke B. T.,
Frisch M. J., et al.,
J. Phys. Chem., 1985, 89,
N11, 2198-2203.

СМ

1987

23 Б4369. Индуцированный столкновениями перенос вращательной энергии в состоянии $A^2\Delta$ CH. Collisionally-induced rotational energy transfer within the $A^2\Delta$ state of CH. Dixon Richard N., Newton David P., Rieley Hugh. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1987, Pt 2, 83, № 4, 675—682 (англ.)

Измерена скорость переноса вращат. энергии в $CH(A^2\Delta)$ при столкновениях в смеси, состоящей преимущественно из He. Радикалы CH получали в быстроточном реакторе (скорость прокачки $660 \text{ дм}^3/\text{мин}$) в р-циях атомов F с CH_4 . Для получения атомов F 5%-ную смесь F_2 с He пропускали через СВЧ-разряд. Эксперим. проводили при давл. CH_4 1 мТорр, $F-F_2$ 10 мТорр и разбавлении He до 200 мТорр. Фл $CH(A-X)$ возбуждали лазером на красителе, в условиях эксперим. столкновит. тушение отсутствовало. Спектры диспергированной Фл наблюдали в обл. $22\,900-23\,500 \text{ см}^{-1}$. Наиболее вероятны переходы с $|\Delta N|=1$ (N — орбитальное квантовое число без учета

спектр

X. 1987, 19, N 23

спина для случая «б» по Хунду). Для описания спектров Фл использована трехпараметрич. модель, константы скорости вращат. переходов в к-рой вычисляются в мгновенном приближении с учетом энергетич. поправок и преобразуются для разных ΔN по степенному закону. Константа скорости релаксации нижних вращат. уровней близка к газокинетич. ($\simeq 0,9 \cdot 10^{-10}$ см³/с).

Л. Ю. Мельников



CH

1989

. 113: 180342w Spectroscopic constants of the methylidyne radical. The $4\Sigma^-$ state. Da Motta Neto, Joaquim Delphino; Nascimento, Marco Antonio Chaer (Dep. Fis.-Quim., Inst. Quim., 21910 Rio de Janeiro, Brazil). *Quim. Nova* 1989, 12(4), 384-5 (Eng). Ab initio calcs. on the $X^2\Pi$ and a $4\Sigma^-$ states of CH radical were performed. Two sets of CI calcs. were considered and self consistent MO calcs. at the MCSCF were used. Potential curves and the spectroscopic consts obtained are compared with available exptl. data.

$4\Sigma^-$, M.N.,
param

C.A. 1990, 113, N 20

1990

СМ

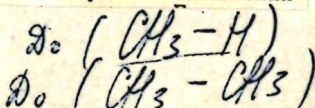
20 Б4008. Теория скорости мономолекулярного разложения в условиях предела при высоких давлениях и ее приложение к диссоциации метанов и этанов. Unimolecular decomposition rate theory at the high pressure limit and its application to the dissociations of methanes and ethanes / Kodama Sukeya // Bull. Chem. Soc. Jap.— 1990.— 63, № 3.— С. 867—876.— Англ.

Предложен новый вариант теории мономолек. разл. молекул в газ. фазе, происходящего за счет разрыва простой хим. связи в условиях предела при высоких давл., основанный на допущениях об адиабатичности перехода активированных молекул к активированному комплексу и о том, что разность нулевых энергий молекулы и комплекса проявляется исключительно в энтропийной составляющей константы скорости $k^\infty_{\text{расп.}}$ не отражаясь на энтальпийной составляющей. С использованием замены колебат. суммы по состояни-

 $\Delta H^\ddagger$ 

(72)

X. 1990, N 20



ям на энтропийный член, на основе модели Горина для активированного комплекса произведены расчеты значений $k^\infty_{\text{расп.}}$ для молекул CH_4 , CD_4 , C_2H_6 и C_2D_6 . Показано, что предложенный вариант теории лучше соответствует имеющимся эксперим. данным, чем теории активированного комплекса и Райса — Рамспергера — Касселя — Маркуса; сопоставление теории и эксперимента позволяет предложить уточненные значения термодим. величин: $\Delta H^\circ_{\text{обр., 298}}(\text{CH}_3, \text{газ}) = 143,2$ кДж/моль, $D_0(\text{CH}_3-\text{CH}_3) = 393,0$ кДж/моль и $D_0(\text{CH}_3-\text{H}) = 449,1$ кДж/моль. В рамках предложенного варианта теории показано, что эксперим. энергия активации термоллиза должна сильно зависеть от T -ры; наряду с этим отношение величин k^∞ для прямой и обратной р-ций не должно в общем случае равняться значению термодимич. константы равновесия K_p . Библ. 57.

А. Б. Мазалецкий

CH

1981

Sana Michel, Leroy G.

u. n., y. Mol. Struct. Theochem.
1991. 226, n 3-4. c. 307-
 $\Delta_f M$ 325.

(cu. ● LiH; $\frac{T}{\text{IV}}$)

CH

1993

120: 117234s Total electron impact ionization cross sections of free molecular radicals: the failure of the additivity rule revisited. Deutsch, H.; Cornelissen, C.; Cespiva, L.; Bonacic-Koutecky, V.; Margreiter, D.; Marek, T. D. (Fachbereich Phys., Ernst Moritz Arndt Univ., D-17489 Greifswald, Germany). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* 1993, 129, 43-8 (Eng). Using the recently developed semiclassical DM approach the authors have calcd. the abs. electron impact cross sections for single ionization of some selected mol. radicals (CH_2 , CH_3 and SiF_2 , SiF_3) from threshold up to 80 eV. CH CH_2 CH_3 SiF SiF_2 SiF_3 . The present results confirm (i) a previously noted anomaly in the ordering of the SiF_n cross sections (i.e. $\sigma(\text{SiF}) > \sigma(\text{SiF}_2) > \sigma(\text{SiF}_3)$) and (ii) the failure of the simple additivity rule in predicting this anomaly.

nonpermissible
ceretive uokul-
zakuv. 6

CH_2 , CH_3 , SiF , SiF_2 , SiF_3

(45) Δ



C.A. 1994, 120, N10

CH

(Om. 39968)

1999

Paul Marshall et al.,

(Δ_{5H}₂₉₈) J. Chem. Phys., 1999,
110, N4, 2069-2073