

C12H8

C₁₂H₈

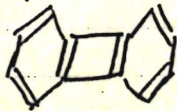
Race, Crumman,
Kjellm.

1955

Cass R.C., Springell H.R., Quincey P.B.
J. Chem. Soc., 1955, Apr., 1188-1190.

Методы синтеза и стро-
ение молекул. Часть III.

Директорат. (Дибензцикло-
бутан)



α-56-3-6109.

$C_{12}H_8$

1962

23 Б323. Теплоты сгорания и молекулярная структура. Часть VIII. Дифенилен. Bedford A. F., Carey J. G., Millar I. T., Mortimer C. T., Springall H. D. Heats of combustion and molecular structure. Part VIII. Diphenylene. «J. Chem. Soc.», 1962, Oct., 3895—3898 (англ.)

Определена теплота сгорания дифенилена $C_{12}H_8$: $\Delta H(\text{сгор.}) = 0,1486 \pm 0,7$ ккал/моль. Из полученной величины и литературных данных рассчитаны (в ккал/моль): теплота образования газообразного $C_{12}H_8$ из атомов: 2352,3 и энергия резонанса 17,1. Отмечено, что небольшая энергия резонанса $C_{12}H_8$ обусловлена высоким напряжением четырехчленного кольца, образованного двумя бензольными кольцами. Дана оценка энергии этого напряжения (между 64,3 и 75,4 ккал/моль). Часть VII см. РЖХим, 1959, № 20, 70717. М. Козина.

Х.1963.23

1
Нормальные координаты, ~~отра-~~
~~жены~~, 26, 71-73, 91

II Вырожденные колебания, 103-105

~~Вращательная~~, 90-94

II Выражение для кинетической
энергии, 26, 287

III Потенциальной энергии 26, 287

C₁₂H₈

C₁₂H₁₀

1977

Edgar F., et al.

Тез. гонел. - 7th Всес.
компр. по калориметр

31/I - 3/II 77 T-A 35-40.

(Sp)

C₁₂H₈

1977

14 Б766. Низкотемпературная термофизика, термохимия и ориентационный беспорядок в системе аценафтилен — аценафтен. Westrum Edgar F., Cheda J. A. R., Rodgers D. L. «Low-temperature thermophysics, thermochemistry, and orientational disorder in the system acenaphthylene/acenaphthene. В сб. «VII

Всес. конф. по калориметрии, 1977. Расшир. тезисы докл. ин. участников конф.» М., 1977, 35—39 (англ.)

термодин.
св-ва

Методом квазиadiaбат. калориметрии определена емкость c_p аценафтилена C₁₂H₈ (I) и аценафтена C₁₂H₈ (II) в диапазоне т-р 90—140° К. Эксперим. т-рная зависимость c_p для I указывает на наличие двух ориентационных переходов, соотв. при 116,6 (макс.) и 127,1° К (мин.), причем величина ΔS для этих переходов равна 2,9 э. е. В окрестности точек перехода наблюдаются явления гистерезиса. С. помощью вращающейся бомбы определены теплоты сгорания I и II. Найденные значения c_p , S^0 , H^0 и $-(G^0-H^0)/T$ для I и II равны соотв. 43,88 и 45,74 кал/град·моль, 49,29 и 45,13 э. е., 7152 и 6758 кал/моль, а также 25,30 и 22,46 кал/град·моль. Погрешность определения этих величин выше 100° К составляет менее 0,1%.

С. Огородников

X. 1977. №14

$C_{12}H_8$

1994

18 Б2116. Термофизические свойства аценафтена и аценафтилена при температурах ниже комнатной: молекулярный беспорядок во втором кристалле. Subambient-temperature thermophysics of acenaphthene and acenaphthylene: Molecular disorder in the latter /Cheda J. A. R., Westrum (Jr.) E. F. //J. Phys. Chem. —1994 .—98 ,№ 9 .—С. 2482—2488 .—Англ.

Методом адиабатической калориметрии измерены низкотемпературные (5—350 К) теплоемкости аценафтена, $C_{12}H_{10}$ (I) и аценафтилена, $C_{12}H_8$ (II). Для II найдены 2 перехода: крист. фаза III/крист. фаза II (максимум при 116,6 К) и крист. фаза II/крист. фаза I (острый пик при 127,1 К). При охлаждении для этих двух максимумов найдены небольшие гистерезисы. Энтропия перехода крист. фаза III/крист. фаза I равна 12,13 Дж·К⁻¹·моль⁻¹. Проведено сравнение между калориметрич. и рассчитанной статистически значениями энтропии. Для II получены доказательства наличия остаточной энтропии, равной 10,33 Дж·К⁻¹·моль⁻¹.

Ф. М. Спиридонов

Gr

(5-350 K)

ΔH_{t2}

X. 1994, N18.

H_2C_{12}

2002

F: H_2F_2 H_2Cl_2 H_2Br_2

P: 3

03.07-19Б1.16. Неэмпирическое изучение линейных анионных [систем] галогенидов водорода $XH-HX$. An ab initio study of linear $XH-HX$ hydrogen halide anions / Rauk A., Armstrong D. A. // J. Phys. Chem. A. - 2002. - 106, N 2. - С.400-403. - Англ.

С использованием неэмпирических методов (RO)MP2 и CCSD(T) исследованы геометрическая структура, колебательные частоты и энергия связывания димерных анионов $XH-HX\{-\}$, $X=F, Cl, Br$, с линейной структурой "противоположных диполей". Библ. 28.