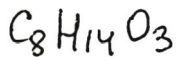


1981

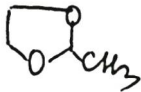
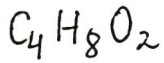


96: 201588d Determination of the heat of fusion of ethers of ethylene and diethylene glycols. Grigorenko, V. I.; Arbuzova, G. G.; Pigulevskaya, V. G. (Khim.-Metall. Inst., Karaganda, USSR). Deposited Doc. 1981, VINITI 1773-81, 6 pp. (Russ.). Avail. VINITI. The heats of melting of ethylene glycol monovinyl ether [764-48-7], diethylene glycol monovinyl ether [929-37-3], 2-methyl-1,3-dioxolane [497-26-7], diethylene glycol diethyl ether [764-99-8], and ethylene glycol divinyl ether [764-78-3] were 3.09, 6.42, 5.32, 6.37, and 3.05 kcal/mol, resp. The heats of melting of several common compds. (e.g., C_6H_6 [71-43-2]) were also detd. in order to est. a calorimetric measurement error, which increased from 1.5' to 1020% with decreasing m.p. of substances studied.

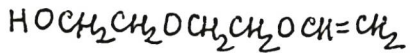
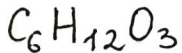
этиленгликоль
двиниловый эфир



диэтиленимале
двиниловый эфир

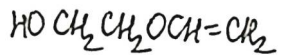
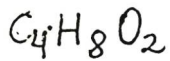


2-метил-1,3-диоксолан



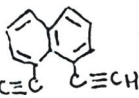
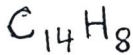
диэтиленгликолевый
моновиниловый
эфир





этиленгликолевый
моновиниловый
эфир

1981

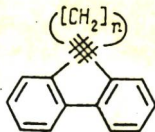


1,8-диэтинил-
нафталин
фотоэл.
спектр

(17)

19 Б160. Трансаннулярные взаимодействия между ацетиленами. Исследование методом фотоэлектронной спектроскопии 1,8-диэтинилнафталина и циклических производных 2,2'-диэтинилбифенила. Gleiter Rolf, Schäfer Wolfgang, Eckert-Maksić Mirjana. Transannulare Wechselwirkungen zwischen Acetylenen — Photoelektronenspektroskopische Untersuchungen an 1,8-Diethynylnaphthalin und cyclischen Derivaten von 2,2'-Diethinylbiphenyl. «Chem. Ber.», 1981, 114, № 6, 2309—2321 (нем.; рез. англ.)

Измерены фотоэлектронные спектры 1,8-диэтинил-I (II, I — нафталин), (III), (IV); 2,2'-диэтинилбифенила (V), 1-этинил-I (VI), 2-этинил-I (VII), 1,5-диэтил-I



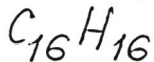
III $n=4$

IV $n=5$

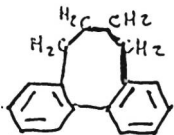
X-1981, №19

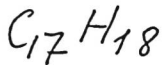
(VIII), 1-винил-I (IX) и 1,8-дивинил-I (X). Первый потенциал ионизации (ПИ) равен (эВ): II 7,88, III 8,04, IV 8,04, V 8,54, VI 8,03, VII 8,11, VIII 7,91, IX 7,89, X 7,72. На основе теоремы Купменса и расчетов I—X методом ССП МО ЛКАО в приближениях МЧПДП/3, МПДП и СЧПДП дано отнесение первых ПИ. Для оценки трансаннулярного взаимодействия ацетиленовых фрагментов проведены модельные расчеты ПИ II. Они дали значение резонансного интеграла $\beta = -0,48$ эВ. Аналогичные оценки для III и IV сделать не удалось ввиду сильного взаимодействия этиниловых и бифенилового фрагментов.

В. Фаустов

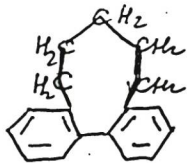


2,2'-тетраметиленбифенил (~~CH~~)



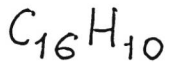


2,2'-пентаметиленбидренин (IV)

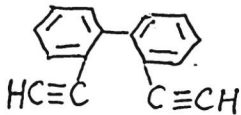


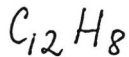
1981

1981, N19

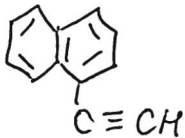


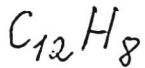
2,2'-диэтинилбифенил (IV)



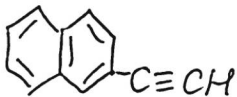


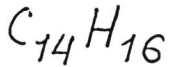
1-этинилнафталин (~~VII~~)



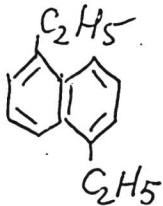


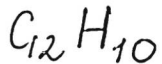
2-этинилнафталин (~~VII~~)



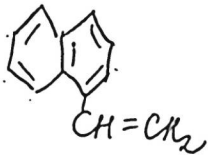


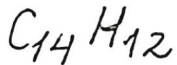
1,5-диэтилнафталин (~~VIII~~)



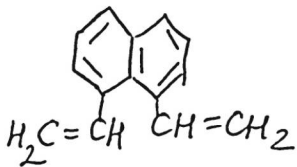


1-винилнафталин (~~ИХ~~).





1,8-дивинилнафталин (IX)



C₇FH₅O

1981

фторбензальдегид:



o-



m-

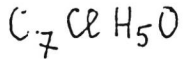


p-

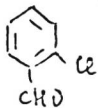
v_i

' 96: 132533t A¹A^{*}(nπ^{*}) ← X¹A' absorption spectra of fluoro- and chlorobenzaldehyde vapors. Haque, M. K.; Thakur, S. N. (Dep. Phys., Banaras Hindu Univ., Varanasi, 221 005 India). *Indian J. Phys., [Part] B* 1981, 55B(6), 477-90 (Eng). Complete assignments of the vibronic bands of o-, m-, and p-fluoro- and -chlorobenzaldehydes obsd. in the A¹A^{*}(nπ^{*}) ← X¹A' vapor phase electronic absorption under medium resolu. are reported. Thirteen excited state (A¹A^{*}) fundamental frequencies were obsd., out of which 9 were assigned to normal modes of vibration in the excited state and correlated with their ground state (X¹A') counterparts.

C.A. 1982, 96, N16



хлорбензальдегиды



o -



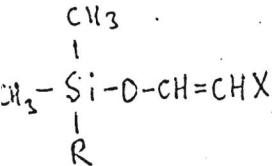
m -



p -



1983



17 Б294 Деп. Поворотная изомерия винилоксиорганосиланов. Дмитриева В. К., Колодяжный Ю. В., Лисовин Е. Г., Ольховская Л. И., Комаров Н. В., Осипов О. А. Ростов. н/Д ун-т. Ростов. н/Д, 1983. 15 с. Библиогр. 28 назв. (Рукопись деп. в ОНИИТЭХИМ г. Черкассы 13 апр., 1983 г., № 392хп—Д83).

Методами дипольных моментов и ИК-спектроскопии изучена поворотная изомерия винилоксиорганосиланов. $\text{Me}_2\text{RSiOCH}=\text{CHX}$ ($\text{R}=\text{Me}$, EtO , $n\text{-PrO}$, $n\text{-BuO}$, $\text{C}\equiv\text{CBu-n}$, $\text{C}\equiv\text{CPh}$; $\text{X}=\text{H}$, Cl , Br). Установлено, что в состав равновесной смеси входит конформер с углом поворота винильной группы вокруг связи $\text{C}_{sp^2}-\text{O}$, равным 60° . Спектральное определение констант равновесия в интервале т-р $180-298^\circ\text{K}$ и его термодинамич. параметров (ΔG , ΔH , ΔS) показало, что состояние конформационного равновесия определяется природой заместителя X в β -положении винильной группы и характером заместителя R у атома кремния.

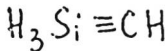
Автореферат

М.р., Кр
поворотная изомерия

X. 1983, 19, N 17



1982

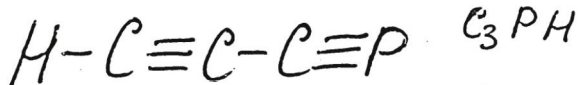


М.П.

12 Д564. Миллиметровый спектр силилацетилен в основном колебательном состоянии. Millimetre wave spectrum of silyl acetylene in the ground vibrational state. Carlier J., Bauer A. «Can. J. Phys.», 1982, 60, № 8, 1079—1080 (англ.; рез. фр.)

В диапазоне 125—231 ГГц исследован микроволн. спектр молекулы силилацетилен. Идентифицированы линии вращательных переходов с $13 \leq J \leq 24$ в основном колебательном состоянии. Определены значения вращательных постоянных и постоянных квартичного и секстичного центробежного искажения. М. Р. Алиев

гр. 1982, 18, № 12



1981

фосфабута-
диен

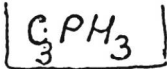
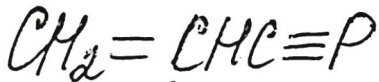
12 Б192. Микроволновый спектр фосфабутадиена, ^и
 $\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}\equiv\text{P}$. Kroto H. W., Nixon J. F., Oh-
no K. The microwave spectrum of phosphabutadiene,
 $\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}\equiv\text{P}$. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 90, № 2,
512—516 (англ.)

МВ спектр,

м.п.

Измерены в области частот 26,5—40 ГГц МВ-спектры $\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}\equiv\text{P}$ (I) и $\text{D}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}\equiv\text{P}$ (II), в основ-
ном и нескольких возбужденных колебательных состоя-
ниях. I и II получены при пиролизе смесей 2:1 $\text{H(D)}-\text{C}\equiv\text{CCH}_2\text{Cl}:\text{PCl}_3$ при т-ре 1100° С. Для I и II опреде-
лены значения вращательных постоянных центробежно-
го искажения, колебательно-вращательные параметры,
полные дипольные моменты и колебательные частоты.
С. Н. Мурзин

Х. 1982, 19, № 12.



1981

~~фосфабут-3-ен-1-ин~~

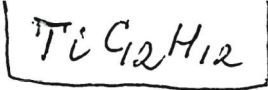
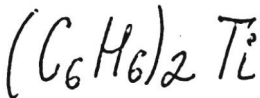
12 Б191. Микроволновый спектр 1-фосфабут-3-ен-1-ина, $\text{CH}_2=\text{CHC}\equiv\text{P}$. Ohno K., Kroto H. W., Ntchong J. F. The microwave spectrum of 1-phosphabut-3-ene-1-yne, $\text{CH}_2=\text{CHC}\equiv\text{P}$. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 90, № 2, 507—511 (англ.)

УВ спектр,

М.П.

Измерен в области частот 26,5—40 ГГц МВ-спектр $\text{CH}_2=\text{CHC}\equiv\text{P}$ в основном и двух возбужденных колебательных состояниях. По эффекту Штарка для трех переходов определены компоненты дипольного момента $\mu_a=1,181$ (2), $\mu_b=0,074$ (1) и полный дипольный момент $\mu=1,183$ (2) D. С. Н. Мурзин

X. 1982, 13, N 12.



1981

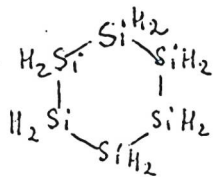
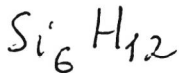
12 Б161. Дибензолтитан(0): структура, спектры и химические свойства. Tatlova G. G., Kyashina E. F., Krasochka O. N., Kichigina G. A., Shvetsov Yu. A., Lisetsky E. M., Atovmyan L. O., Borod'ko Yu. G. Dibenzenetitanium(0): structure, spectra and chemical properties. «Nouv. j. chim.», 1981, 5, № 12, 603—604 (англ.)

Di;

Проведено рентгеноструктурное исследование $(\text{C}_6\text{H}_6)_2\text{Ti}$ (I). Измерены электронные спектры (200—800 нм), ИК-спектр (4000—400 cm^{-1}) и спектр КР I. Проведено отнесение частот колебаний металл — лиганд. Показано, что I является Кт р-ции полимеризации ацетилена и этилена. И. А. Гарбузова



X. 1982, 19, N 12.



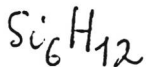
геометрия,
структура

1982

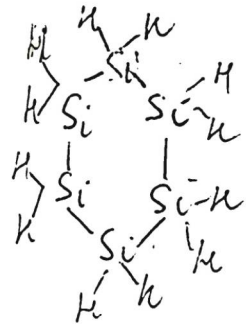
24 Б104. Электронографическое исследование газообразного циклогексасилана. Smith Zuzana, Almenningen Arne, Hengge Edwin, Kovar Dieter. Electron-diffraction study of gaseous cyclohexasilane. «J. Amer. Chem. Soc.», 1982, 104, № 16, 4362—4366 (англ.)

Методом газовой электронографии при $t = 130^\circ\text{C}$ изучена структура молекулы циклогексасилана (I). Несмотря на то, что на основании полученных данных конформац. состав I однозначно определить не удалось, установлено, что I существует преимущественно в форме кресла. Найдены след. значения основных межъядерных расстояний (r_a , Å) и углов: Si—Si 2,342(5), Si—H 1,484(8), $\angle\text{SiSiSi}$ 110,3(4)°, двугранный угол SiSiSiSi 57,9(9)°. Цифры в скобках представляют полную ошибку, включающую величины 2σ , оценку систематич. погрешности и корреляционную перв. эксперим. данных. Путем повторного анализа колебательного спектра I

X. 1982, 19, N 24



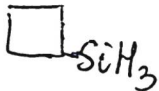
произведена оценка простого валентного силового поля,
на основе к-рой рассчитаны амплитуды колебаний и
колебательные поправки к эффективным межъядерным
расстояниям. В. Спиридонов



$\text{SiC}_4\text{H}_{10}$

1982.

13 В222. Микроволновый спектр второго конформера циклобутилсилана. Microwave spectrum of a second conformer of cyclobutylsilane. Wurster-Rock A., Rudolph H. D. «J. Mol. Struct.», 1983, 97: Determinat. Mol. Struct. Microwave Spectrosc. and Electron Diffract. Proc. 6 Eur. Conf., Tübingen, 30 Aug. — 3 Sept., 1982, 327—330 (англ.)



М.П.

Измерены в области частот 8—40 ГГц МВ-спектры двух конформеров циклобутилсилана, экваториального (Э) и аксиального (А), в основном и нескольких возбужденных колебательных состояниях. Для Э- и А-конформеров идентифицировано соотв. 68 и 25 переходов α - и σ -типа. Второй конформер наблюдался впервые. Анализ спектров выполнен в приближении модели почти вытянутого асим. волчка с включением эффектов центробежного искажения вплоть до 4-го порядка по угловому моменту. Вращательные постоянные Э- и А-конформеров в основном состоянии соотв. равны (МГц): $A=8984,388$ и $7404,909$, $B=2395,635$ и $2682,684$, $C=2101,061$ и $2445,930$. Измеренные по эффекту Штар-

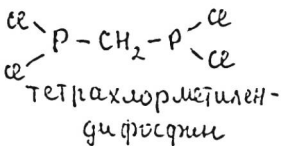
Х. 1983, 19, N 13

ка компоненты дипольного момента, соотв., равны $\mu_a = 0,884$ и $0,806$ Д, $\mu_c = 0,225$ и $0,397$ Д. Спектры в возбужденном низкочастотном колебательном состоянии (τ SiH₃) идентифицированы для обоих конформеров. Потенциальный барьер внутреннего вращения группы SiH₃ для А-конформера равен $V_3 = 2150$ кал/моль.

С. Н. Мурзин

С Р Cl₂ H₂

1983



спектры

3 Б1256. Колебательные спектры и конформационное равновесие тетрахлорметилендифосфина. Новиков В. П., Ярков А. В., Умарова И. О., Раевский О. А., Куркин А. Н., Новикова З. С. «Изв. АН СССР. Сер. хим.». 1983, № 10, 2252—2257

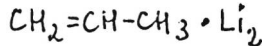
Получены ИК- и КР-спектры газообразного, жидкого и крист. $\text{CH}_2(\text{PCl}_2)_2$. По спектрам установлено наличие конформац. равновесия с отношением конформеров при комн. т-ре 2:3. Результаты конформац. анализа тетрахлорметилендифосфина показывают, что при $\sim 20^\circ\text{C}$ существует равновесие трех конформеров с примерно равным содержанием, два из к-рых, возможно, спектроскопически неразличимы. Проведен расчет частот и форм нормальных колебаний и расчет валентно-силового поля.

Г. К.

х. 1984, 19, №3

$\text{Li}_2\text{C}_3\text{H}_6$

1982



дилитий пропен

геометрия,
структура

2 Б44. Неэмпирические расчеты дилитийпропенов.
Ab initio calculations of dilithiopropenes. Kost Daniel, Klein Joseph, Streitwieser Andrew, Schriver George W. «Proc. Nat. Acad. Sci. USA, Phys. Sci.», 1982, 79, № 12, 3922—3926 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 3-21-ГФ проведены расчеты комплексов между молекулой Li_2 и молекулой пропена $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_3$ (I). Исследовано 6 различных конфигураций включая двухмостиковые, в к-рых оба атома Li взаимодействуют с I посредством π -связей, и одномостиковые в к-рых один атом Li σ -связан с атомом C, а другой (мостиковый) — образует π -связь с I. Наиболее стабильной найдена дважды мостиковая конфигурация, в к-рой атомы Li расположены симметрично по обе стороны скелета из трех атомов C в перпендикулярной плоскости, проходящей через средн. атом C (цис- π, π -конфигурация). Оптимизированные значения геометрич.

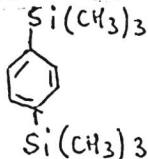
X: 1983, 19, № 2

параметров равны: угол LiCLi 90° , расстояние Li^+-Li^+ 3,008 Å, расстояние между Li и последовательно расположенными атомами углерода равны соотв. 2,028; 2,116 и 2,186 Å. Из анализа распределения электронной плотности и структуры МО сделан вывод, что комплекс между I и Li_2 можно рассматривать как триплет из двух катионов лития и дианиона пропенилидена.

Э. Герман

$\text{Si}_2\text{C}_{12}\text{H}_{22}$

1982



геометрия,
структура

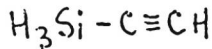
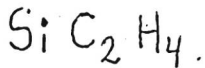
4 B116. Строение молекулы p-бис(триметилсилил)-бензола по данным газовой электронографии. The molecular structure of p-bis(trimethylsilyl)benzene from gas phase electron diffraction. Rozsondai Béla, Zelei Borbála, Hargittai István. «J. Mol. Struct.», 1982, 95, 187—196 (англ.).

В плане систематич. исследований пара-дизамещ. пр-ных бензола изучено строение молекулы названного соединения. Получены след. геометрич. параметры (r_g): $\text{C}-\text{C}_{\text{ср}}$ 140,8 (3) пм, $\text{Si}-\text{C}_{\text{ср}}$ 188,0(4), $\text{C}-\text{H}_{\text{метил}}$ 111,3 (3), $\angle \text{C6}-\text{C1}-\text{C2}$ 115,7 (6)°, $\text{C1}-\text{Si}-\text{CH}_3$ 109,2 (4), $\tau (\text{C2}-\text{C1}-\text{Si}-\text{CH}_3)$ 13,6 (11) ($\tau=0^\circ$ при затенении связей $\text{C1}-\text{C2}$ и $\text{Si}-\text{CH}_3$). Для средних значений параметров найдены также возможные неравноценности:
 $\Delta (\text{C}-\text{C}) = r (\text{C1}-\text{C2}) - r (\text{C2}-\text{C3})$
 1,6 (7) пм и $\Delta (\text{Si}-\text{C}) = r (\text{Si}-\text{CH}_3) - r (\text{Si}-\text{C1})$
 3,3 (7) пм. С эксперим. данными одинаково хорошо согласуется модель свободного вращения относительно

X. 1983, 19, №4

связей Si—C1 и Si—C4. Отмечено, что: 1) конфигурация связей вокруг атома кремния близка к тетраэдрической, 2) связь Si—CH₃ длиннее, чем связь Si—Cl вопреки результатам рентгеноструктурного определения, 3) степень отклонения бензольного кольца от правильного шестиугольника согласуется с электроположит. характером триметилсилильной группы. В. Мاستрюков





силилацетилен

Vi, М. П.

1982

3 Б279. Миллиметровый спектр силилацетилена в основном колебательном состоянии. Millimetre wave spectrum of silyl acetylene in the ground vibrational state. Carlier J., Bauer A. «Can. J. Phys.», 1982, 60, № 8, 1079—1080 (англ.)

Измерен в области частот 125—231 ГГц МВ-спектр силилацетилена, $^{28}\text{SiH}_3\text{CCH}$, в основном колебательном состоянии. Идентифицирована K -структура 9 вращательных переходов со значениями квантового числа $J=12-24$. Анализ спектра выполнен в приближении модели симм. волчка с учетом кватичного и секстичного центробежного искажения. Определены вращательная постоянная $B_0=4828,6651(4)$ МГц и постоянные центробежного искажения $D_J=1,1737(5)$, $D_{JK}=62,723(16)$ кГц, $H_{JJK}=0,30(1)$, $H_{JKK}=1,33(14)$ Гц. Полученные молек. постоянные воспроизводят вращательные частоты в пределах стандартного отклонения 0,038 МГц.

С. Н. Мурзин

X. 1983, 19, №3

$\text{Sn C}_6\text{H}_5\text{Cl}_3$

1982



SnCl_3

фениллов трихлорид

кометр,

структура

12 Д362. Использование сателлитов Sn в спектрах ЯМР ^1H ориентированных молекул. Структура трихлорида фенилолова. The use of Sn satellites in ^1H NMR spectra of oriented molecules. The structure of phenyltin trichloride. Diehl P., Amrein J. «Org. Magn. Reson.», 1982, 19, № 3, 148—149 (англ.)

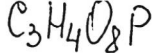
Исследованы сателлитные линии в спектрах ПМР, обусловленные ядрами ^{117}Sn и ^{119}Sn , для изучения структуры молекулы трихлорида фенилолова (I). С помощью моделирования на ЭВМ проведен анализ спектров, полученных на изотопно распределенных и на ориентированных молекулах I на частоте 90 МГц. Определены константы прямых и косвенных спин-спиновых связей протон—протон и протон—олово. В пределах ошибки эксперимента не обнаружено отклонения от соотношения $\gamma(^{119}\text{Sn})/\gamma(^{117}\text{Sn})=0,9558$. Поскольку литературные данные для силового поля молекулы I от-

90. 1982, 18, N12

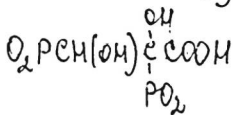
сутствуют, поправки на гармонич. колебания для диполь-дипольных связей аппроксимированы с использованием данных для силового поля моноклорбензола. Показано, что такое приближение может давать ошибочные поправки для дипольных связей между протонами, однако поправки для соответствующих связей между оловом и протонами практически равны нулю вследствие большой массы ядра олова. Из полученных результатов определены межъядерные расстояния, углы связи и параметры упорядочения для ориентированных молекул I. Отмечено, что длина связи $r_{C,Sn} = 2,034 \text{ \AA}$ согласуется с данными для других подобных молекул.

Т. К. П.





1983



2,3-дифосфоглицери-
новая к-та

Б 15 Б3247. Энтальпии ионизации 2,3-дифосфоглицериновой кислоты. Enthalpies of ionization for 2,3-diphosphoglyceric acid. Dellaripa Laura, Vickers Leland P., Hopkins Harry P. «J. Solut. Chem.», 1983, 12, № 11, 791—800 (англ.)

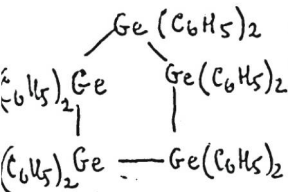
При $t = 26,5^\circ$ С методом калориметрич. Тт [титранты NaOH и $(C_2H_5)_4NOH$] определены энтальпии ионизации (ΔH_i) 2,3-дифосфоглицериновой к-ты (I) по каждой из пяти ступеней. Установлено, что значения $\Delta H_i = 0,0 \pm 0,3$ ккал/моль. Этот результат подтвержден методом калориметрич. Тт двуназиевой соли I р-ром HCl. Обсуждаются причины, обусловившие столь незначительные значения ΔH_i в случае I. А. С. Соловкин

А. Н. Искенд.

Х. 1984, 19, N 15

$C_{60}H_{50}Ge_5$

1983

 T_{tr}

X. 1983, 19, N 20

20 Б950. Формы декафенилциклопентагермана (Ph₂-Ge)₅. Die Formen des Decaphenylcyclopentagermans (Ph₂Ge)₅. Roß Ludwig, Dräger Martin. «Z. Naturforsch.», 1983, B38, № 6, 665—673 (нем.; рез. англ.)

Получены 5 крист. модификаций декафенилциклопентагермана, в том числе две в чистом виде и три — содержащие р-ритель (бензол), к-рый освобождался при 70°С. При т-ре 190°С все фазы переходили в тетрагон. пластичную крист. фазу. Определена крист. структура триклинной фазы и показано, что в соответствии с повышенной р-римостью по сравнению с содержащими гомологич. кольца соотв. тетра- и гексасоединениями с жесткими нормальными конформациями, триклинной фазе присуща гибкая конформация молекул. Расположение фенильных групп — параллельное или перпендикулярное для внутри- и межмолекулярного случаев. Показано также, что гексафенилциклопентагерман переходит в состояние пластичных кристаллов при т-ре 346°С.

А. Е. Вольпян

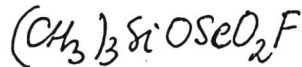
$C_3H_9FO_3SeSi$

1983

1) 21 Б209. Триметилсилиловый эфир фторселеновой кислоты. Trimethylsilylester der Fluorselensäure. Do-
stál Karel, Sikola Yiri. «Z. Chem.», 1983, 23,
№ 5, 185 (нем.)

Синтезирован $Me_3SiOSeO_2F$ (I) и изучены его физи-
ко-хим. характеристики, а также зарегистрированы
спектры ЯМР и КР. Частоты колебаний $\nu_s(SeO_2)$ и
 $\nu_{as}(SeO_2)$ I лежат в области 951 и 1025 cm^{-1} , соотв.
а частота вал. кол. $\nu(SeF)$ равна 661 cm^{-1} . I реагиру-
ет с $(Me_3Si)_2O$ ($T = -20^\circ$) с образованием $(Me_3-$
 $SO)_2SeO_2$.

А. В. Бобров



ν_i

X. 1983, 19, N 21

1985

21 БЗ066. Зависимость термодинамических свойств алкилбензолов и их функциональных производных от строения. Нестерова Т. Н. «5 Всес. конф. по термодинам. орган. соедин.» Куйбышев, 1985, 36

Обобщены результаты исследования равновесий превращения алкил-бензолов, -фенолов, -галогенбензолов и -бифенилов (140 независимых р-ций). Сформирован подход к определению энтальпий образования соединений рассматриваемых классов в газ. и жидк. состояниях; вычислены эффекты взаимодействия заместителей при различном их расположении в ароматич. ядре. При переходе от газ. к жидк. состоянию для алкилфенолов, трет-алкилбензолов и ряда др. соединений принципиально изменяется соотношение эффектов взаимодействия заместителей (в энтальпиях образования), что в нек-рых случаях приводит к изменению относит. термодинамич. стабильности соединений.

А. С. Гузей

X. 1985, 19, № 21

1985

21 Б3067. Анализ термодинамических функций изомеров положения ароматического ядра в алифатической цепи вторичных алкилбензолов (ВAB) и алкилфенолов (ВAF). Пимерзин А. А., Нестерова Т. Н. «5 Всес. конф. по термодинам. орган. соедин.» Куйбышев, 1985, 39

Из исследований жидкофазных равновесий изомеризации и измерений давл. насыщ. паров определены энтальпии образования в газ. и жидк. состоянии 33 ВAF и 11 ВAB. Оценены вклады для расчета х-к высших ВAB и ВAF по схемам Татевского и Бернштейна.

А. С. Гузей

Х. 1985, 19, №21

1985

16 Б2334 Деп. Термодинамические свойства изобутилового спирта. Васильковская Т. Н., Шелковенко А. Э., Золин В. С., Голубев И. Ф.; Ред. «Инж.-физ. ж.», Минск, 1985, 23 с. Библиогр. 11 назв.

(Рукопись деп. в ВИНТИ 17 апр. 1985 г., № 2581—85 Деп.)

На основании лит. данных о термодинамич. св-вах изобутилового спирта в жидк. фазе, закрит. обл. и на линии кипения составлены ур-ние состояния и ур-ние зависимости давл. насыщенных паров спиртов от т-ры. Рассчитаны термодинамич. св-ва изобутилового спирта при т-рах 280—600 К и давл. 0,1—50 МПа.

Автореферат

Х. 1985, 19, N 16.

1984

10 E723. Диэлектрические измерения при высоких давлениях и низких температурах. Ч. 6. Диэлектрические и термодинамические свойства циклогексанола. Dielectric measurements at high pressures and low temperatures. Pt 6. Dielectric and thermodynamic properties of cyclohexanol. Pingel Norbert, Poser Uwe, Würflinger Albert. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1984, Pt 1, 80, № 11, 3221—3231 (англ.)

Методом ДТА исследованы термодинамич. свойства твердого и жидкого циклогексанола в интервале т-р 160—370 К при давлении до 3 кбар. Кроме того, в интервале т-р 230—320 К измерены диэлектрич. проницаемость ϵ и диэлектрич. потери циклогексанола в диапазоне частот до 10 МГц при нормальном и повышенном давл. Исследованы переходы между тремя различными твердыми фазами и определены изменения энтальпии и свободного объема при фазовых переходах. Установлено наличие так наз. «экзотермич. аномалии» при повышенных давлениях. Из полученного значения ϵ

A H₂;

сф. 1985, 18, N 10

рассчитан корреляционный фактор Кирквуда для циклогексанола и проведено сравнение с данными для подобных соединений (циклопентанола, циклогексанола и 1-бутилхлорида). Библ. 40. Ч. 5. Würtflinger A. «Ber. Bunsenges Phys. Chem.», 1982, 86, 172. И. А. Б.



1984

) 21 Б3250. Фазовые переходы нечетных высокочистых н-алканов — влияние давления на температуры переходов, определенные методом ДТА при высоком давлении. Phase transitions of odd n-alkanes of high purity — pressure dependence of the transition temperatures determined by high pressure DTA Takamizawa K., Nagao Y., Irii D., Urabe Y. «Thermochim. acta», 1985, 88, № 1: Calorimetry and Therm. Anal. Collec. Selec. Pap. 20 Anniversary Conf., Osaka, 13—16 Nov., 1984, 205—210 (англ.)

Методом ДТА при t -рах 300—400 К и давл. до 500 МПа исследованы полиморфные превращения в н-пентаконтане (I), н-гептаконтане (II) и н-тритриаконтане (III). Подробно описано устройство и работа установки для проведения ДТА при высоком давл., приведена ее схема. Установлено, что при атмосферном давл. I—III претерпевают фазовые переходы в тв. состоянии: I — при 313,5 и 320,1 К, II — при 316,1, 323,2 и 325,6 К, III — при 320,7, 330,3, 339,3 и 341,4 К. Во

T_{tr};

X. 1985, 19, № 21

всех соединений обнаружено по одному превращению ориентац. типа. Построены фазовые $P-T$ -диаграммы I—III. Показано, что с увеличением давл. т-ры превращений растут.

В. Е. Смирнов



1985

21 Б3119. Термодинамика процесса испарения тетраэтилолова, триэтилалюминия и их двойных систем с диэтиловым эфиром. Виталёв С. Е., Баев А. К. «5 Всес. конф. по термодинам. орган. соедин.» Куйбышев, 1985, 82

Статическим методом исследовано испарение Et_2O (I), SnEt_4 (II) и AlEt_3 (III). Значения ΔH и ΔS испарения составили: I 29,5 кДж/моль и 92,7 Дж/моль·К; II 46,6 и 98,5; III 66,6 и 132,2. Состав пара: I и II постоянный, в процессе испарения III его димерная форма диссоциирует с ростом т-ры. В системах I—II и I—III зависимость суммарной теплоты испарения от состава жидк. фазы имеет минимум при 50 мол.% I. Для термич. диссоциации газофазного комплекса I с II получено $\Delta H_{\text{T}}^0 = -52,2$ кДж/моль и $\Delta S_{\text{T}}^0 = 192,2$ Дж/моль·К.

А. С. Гузей

ΔH_{T}^0

Х. 1985, 19, N 21

1985

21 Б3248. Исследование фазового перехода в 2,4,6-трибромфеноле методом спектроскопии КР. Голосова Л. Н., Данилов И. Ю. «Мол. ученые и спец.-нар. х-ву. Тез. 1 Краев. науч.-практ. конф., посвящ. памяти акад. Л. В. Криенского, Красноярск., 8—13 апр., 1985». Красноярск, 1985, 100 (рус.)

Исследовано влияние т-ры на спектры КР 2,4,6-трибромфенола (I) в окрестностях фазового превращения при 357 К. Подробно анализируются изменения в положении и форме линий при переходе в процессе нагрева и охлаждения с различными скоростями через т-ру превращения. На основе полученных данных обсуждается влияние фазового превращения на характер внутримолек. колебания I в области 300—100 см⁻¹.

В. Е. Смирнов

T_{tr};

Х. 1985, 19, № 21

1984

11 И219. Термодинамические свойства алкилбензолов и закон соответственных состояний. Махно М. Г., Кисляк Г. М. «Ультразвук и термодинам. свойства вещества». Курск, 1984, 7—10

Этилбензол и ксилолы в интервале t -р (0,5—0,7) T_c и давл. (1—60) p_c являются термодинамически подобными, и для них выполняется закон соответственных состояний. На основании ур-ния Тэйта—Таммана получено универсальное ур-ние состояния указанных в-в, представляющее собой однозначную зависимость между приведенными давлением, t -рой и плотностью. Резюме

ср. 1985, 18, № 11

1984

11 И204. Некоторые термодинамические свойства н-гексана на линии насыщения вблизи критической точки. Зотов В. В., Неручев Ю. А. «Ультразвук и термодинам. свойства вещества». Курск, 1984, 70—73

Проведен термодинамич. расчет отношения теплоемкостей γ , адиабатич. β_s и изотермич. β_T сжимаемостей и внутреннего давления $\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T$ для жидкой и паровой фаз н-гексана на линии насыщения вблизи критич. точки. Показано, что γ сильно возрастает при приближении к критич. точке, причем значения γ для жидкой и паровой фаз при одних и тех же t -рах практически совпадают. Значения внутреннего давления $\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T$ для паровой фазы н-гексана и н-гептана укладываются практически на одну общую кривую, характеризующую зависимость $\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T$ от плотности ρ .

Резюме

термод. св-ва

ср. 1985, 18, N 11

1986

12 Б3033. Давление насыщенного пара и энергии межмолекулярных взаимодействий 1,2-дихлор-н-алканов. Варущенко Р. М. «Ж. физ. химии», 1986, 60, № 2, 291—294

Определена т-рная зависимость давления насыщ. пара 1,2-дихлор-н-нонана (I); вычислены норм. т-ра кипения и энтальпия испарения I. Методом Татевского получены постоянные ур-ния для расчета энтальпии испарения 1,2-дихлор-н-алканов при 298 К в приближении «связь с первым окружением». Приведена оценка полярных и неполярных составляющих энергий молекул. взаимодействия 1,2-дихлор-н-алканов $C_2—C_9$. Показано, что основной вклад в общую энергию вносят неполярные (дисперсионные) взаимодействия (75—95%). Для большинства гомологов индукц. энергии больше ориентац., исключение составляет 1,2-дихлорэтан, в жидк. фазе которого происходит дипольная стабилизация полярного гош-конформера.

Автореферат

(P)

X. 1986, 19, N 12

1985

12 Б3088. Упругости паров некоторых компонентов продукта окисления циклододекана: Дидковская Н. В., Громогласов Ю. А. «Физ.-хим. основы и аналит. контроль орган. пр-в». М., 1985, 17—19

Получены эксперим. данные по упругостям паров ундецилового спирта, ундецилформната и гидрокумола, к-рые обработаны в виде ур-ния Калингерта—Дэвиса. Резюме

Х. 1986, 19, N 12

1986

12 Б2425 Деп. Вязкость и плотность н-гептана при давлениях до 245 МПа и температурах до 473 К. Фомина М. Г., Сагдеев Д. И., Мухамедзянов Г. Х., Якобсон М. М.; Казан. хим.-технол. ин-т. Казань, 1986. 12 с., ил. Библиогр. 12 назв. Рус. (Рукопись деп. в ОНИИТЭхим г. Черкассы 31.01.86 № 200-хп)

Приведены результаты измерений коэф. динамич. вязкости и плотности н-гептана при т-рах 293,15—473 К и давл. до 245 МПа. Макс. относит. погрешность измерения коэф. динамич. вязкости и плотности составляет 1,4 и 0,29% соответственно.

Автореферат

Х. 1986, 19, N 12

1984

11 Б3102. Калориметрическое изучение координационной способности трибутилфосфата в растворах. Цветков В. Г., Цветкова Л. Я. «Пробл. калориметрии и хим. термодинам. Докл. на 10 Всес. конф., 12—14 июня. 1984. Т. 1. Ч. 2.» Черногловка, 1984, 273—275

На основании калориметрич. данных по энтальпиям смешения при 298 К донора электронов — ТБФ, широко используемого в качестве экстрагента различных соединений, с жидк. в-вами установлен след. ряд относит. электроноакцепторной способности: $\text{PCl}_3 < \text{SOCl}_2 < \text{SO}_2 < \text{S}_2\text{Cl}_2 < \text{SeOCl}_2 < \text{AsCl}_3 < \text{VOCl}_3 < \text{VCl}_4 < \text{SnCl}_4 < \text{TiCl}_4 < \text{SbCl}_5 < \text{GaCl}_3$. Отмечается, что ТБФ не образует достаточно прочных координац. соединений с SiCl_4 , GeCl_4 и MeSiCl_3 . Представлены в графич. виде зависимости от состава ΔH (смеш.) для бинарных систем ТБФ + донор, CCl_4 , SO_2 , CHCl_3 , Br_2 , AsCl_3 , HNO_3 , VOCl_3 , SnCl_4 .

ΔKmix

X. 1985, 19, N 11

и TiCl_4 [перечислены в порядке возрастания $-\Delta H$ (смеш.)]. В системе ТБФ + HNO_3 максимум тепло-выделения (30,9 кДж/моль) соответствует соотношению компонентов 1 : 1. Значение $-\Delta H$ р-рения HNO_3 в избытке ТБФ (до конц-ии 1 мол.%) составило 34,7, а ТБФ в избытке HNO_3 48,5 кДж/моль. Р. Г. Сагитов

1984

11 Б3105. Термохимическое моделирование процесса взаимодействия целлюлозы с щелочным раствором железобиннатриевого комплекса (ЖВНК). Иванов А. В., Соколов В. В., Цветков В. Г., Полторацкий Г. М. «Пробл. калометрии и хим. термодинам. Докл. на 10 Всес. конф., 12—14 июня. 1984. Т. 1. Ч. 2». Черноголовка, 1984, 316—318

Калориметрически определены ΔH смешения в водн. р-рах ЖВНК с гидроксилсодержащими соединениями (ГСС), в кач-ве к-рых использовались метанол, ДЭГ, глицерин и т. п. Данные свидетельствуют о хим. взаимодействии компонентов. Показано, что это положение м. б. распространено и на ГСС, моделирующие элементарное звено Ц. Расчет ΔH взаимодействия на 1 группу ОН пиранозного кольца для таких ГСС, как α -метилглюкозид, α -D-глюкоза, α -D-ксилоза, целлобиоза, и для одного звена Ц дает величины от —11,1 до —12,7 кДж/моль ГСС, что, по-видимому, свидетельствует об образовании одинаковых соединений. Сделан вывод, что хелатообразование между ЖВНК и Ц, показанное и др. физ.-хим. методами, энергетически возможно.

Р. Г. Сагитов

X. 1985, 19, N 11

1984

8 Б3032. Термохимия реакции гидролиза метилового эфира N-ацетилфенилаланина, катализируемой α -химотрипсином. Thermochemistry of the N-acetylphenylalanine methylester hydrolysis reaction catalyzed by α -chymotrypsin. Rekharsky M. V., Rumsh L. D., Antonov V. K., Gal'chenko G. L. «Thermochim. acta», 1984, 81, 167—174 (англ.).

При 298,15 К в 0,05 М фосфатном буфере и pH 7 в присутствии α -химотрипсина как Кт определена ΔH р-ции $\text{MeCONHCH}(\text{CH}_2\text{Ph})\text{COOMe}(\text{RMe}) + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{R}- + \text{MeOH} + \text{H}^+$. Величина ΔH р-ции составила $-4,81 \pm \pm 0,10$ кДж/моль. С использованием экспериментально измеренных энтальпий ионизации буферного р-ра ($-3,98 \pm 0,20$ кДж/моль) и N-ацетилфенилаланина ($-2,46 \pm 0,09$ кДж/моль) для ΔH р-ции гидролиза в водн. р-ре $\text{RMe} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{RH} + \text{MeOH}$ получено значение $1,63 \pm 0,25$ кДж/моль. Из сопоставления результатов с лит. данными для др. эфиров средн. величина ΔH гидролиза по эфирной связи оценена в $1,80 \pm 0,25$ кДж/моль.

Р. Г. Сагитов

 ΔH ;

X, 1985, 19, N 8

1984

8 БЗ043. Термодинамические параметры равновесия димер — свободные радикалы арилиндандионов. Писаренко Л. М., Никулин В. И., Гагарина А. Б., Рогинский В. А., Эмануэль Н. М. «Докл. АН СССР», 1984, 279, № 3, 641—645

Методом ЭПР определены термодинамич. параметры (ΔH° , ΔS°) равновесий димер — свободные радикалы для 2,2-бис-2-(п-диметиламинофенил)индандиона-1,3, а также его 4-Cl- и 5-Cl-пр-ных. Получены ЭСП поглощения образующихся радикалов и определены коэф. экстинкций в максимумах поглощения. Независимо методом ЭСП определены энтальпии равновесий ΔH° , к-рые находятся в согласии с данными, полученными методом ЭПР, что подтверждает их высокую точность. Отмечено, что введение атома хлора во фталоильный цикл увеличивает K_p , что связано с увеличением термодинамич. стабильности радикалов.

Автореферат

X. 1985, 19, № 8

1984

У 8 Б3048. Взаимодействия ион-молекула растворителя в газовой фазе. Ион калия и диметилсульфоксид, диметилацетамид, диметилформамид и ацетон. Ion-solvent molecule interactions in the gas phase. The potassium ion and Me_2SO , DMA, DMF, and acetone. Supper Jan, Kebabie Paul. «J. Amer. Chem. Soc.», 1984, 106, № 21, 6135—6139 (англ.)

С использованием импульсного масс-спектрометра высокого давления при различных T -рах изучено газофазное равновесие $\text{K}^+(\text{L})_{n-1} + \text{L} = (\text{K}^+(\text{L}))_n$, где L — ДМСО, N,N -диметилацетамид, N,N -диметилформамид и ацетон. По зависимости констант равновесия от T -ры определены и табулированы термодинамич. ф-ции равновесий при изменении n от 1 до 6. Полученные значения сопоставлены с лит. данными. Квантовомех. расчеты показали, что взаимодействие K^+ с ДМСО имеет электростатич. характер. По резюме

X. 1985, 19, N 8

1984

8 БЗ064. Сравнение различных методов для измерения давления сублимации органических веществ на примере тетрацианохинодиметана. Vergleich verschiedener Methoden zur Sublimationsdruckbestimmung organischer Substanzen am Beispiel von Tetracyanchinodimethan. Kersten F., Oppermann H. «Z. Phys. Chem.», 1984, 265, № 6, 1207—1212 (нем.; рез. англ.)

Показано, что измерения давл. сублимации тетрацианохинодиметана с использованием различных методов (статич., скорости сублимации, диффузионного переноса и эффузионного) не всегда приводят к одинаковым результатам. Предположено, что эффузионный метод дает большие систематич. ошибки, т. к. соотв. ошибки др. различных физ. методов и приборов весьма маловероятны. Усредненные результаты, исключая данные эффузионного метода, являются след.: давл. сублимации $\lg P/Pa = 13,9 - 5550 K/T$; энтальпия сублимации $\Delta H^0 = 106$ кДж/моль; энтропия сублимации $\Delta S^0 = 170$ Дж/моль; коэф. испарение $\alpha = 0,02$, принимая во внимание лит. данные $\alpha \leq 0,06$.

Резюме

X. 1985, 19, N 8.

1984
8 Б3017. Над-адиабатическая калориметрия (ОАС).
Over-adiabatic calorimetry (OAC). Hakl Joseph.
«Thermochim. acta», 1984, 81, 319—325 (англ.)

Предложен новый метод над-адиабатич. калориметрии для определения теплоты р-ции или скорости тепловыделения в случае медленной р-ции или слабоэкзотермич. процессов. Метод заключается в измерении подъема т-ры при нагревании электрич. током реакц. смеси с постоянной скоростью нагрева. При хим. р-ции скорость подъема т-ры $dT/d\tau = S = A(B + S\tau - T) \exp(-C/T) + S$, где параметр A обобщает частотный фактор, теплоемкость системы и коэф. пропорциональности, B — конечная т-ра реакц. смеси после окончания р-ции в адиабатич. условиях, $C \propto E/R$, E — энергия активации, R — газовая постоянная. Указаны графич. и итерац. способы нахождения этих параметров для р-ции 1-го и иных порядков. Приведены опытные данные для р-ции 1-хлоро-4-нитробензола с SO_3 в р-ре H_2SO_4 в сосудах Дьюара. Для этой р-ции 2-го порядка $\Delta H = -44,7$ кДж/моль, максим. скорость р-ции наблюдалась через 1,2 ч после начала реакции.

Л. А. Резницкий

X, 1985, 19, 28

1984

11 Б3101. Термодинамическое прогнозирование в разработке процессов гидролиза полихлорпропенов. Забродина Т. И., Леванова С. В., Добровольцева Г. В., Рот Г. А. «Пробл. калометрии и хим. термодинам. Докл. на 10 Всес. конф., 12—14 июня. 1984. Т. 1. Ч. 2.» Черногловка, 1984, 247—249

С целью прогнозирования вероятных направлений р-ций, протекающих при гидролизе хлорпр-ных пролилена $\text{CX}_2=\text{CXCH}_2\text{Cl}$ (I) $+\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{CX}_2=\text{CXCH}_2\text{OH}$ (II) $+\text{HCl}$ (1) и I+II $\rightleftharpoons \text{O}(\text{CX}_2=\text{CXCH}_2)_2+\text{HCl}$ (2), инкрементным методом рассчитаны для газ. и жидк. состояний ΔH^0 (обр.) и S^0 исходных соединений и продуктов их гидролиза — спиртов и эфиров. Вычислены K равн. р-ций (1) и (2). Р. Г. Сагитов

х. 1985, 19, 11

1984

8 Б3029. Термохимия транс-ди-трет-бутилгипонитрита. Thermochemistry of trans-di-tert-butyl hyponitrite. Chen H. - T. E., Mendenhall G. D. «J. Amer. Chem. Soc.», 1984, 106, № 21, 6375—6378 (англ.)

Измерена теплота сгорания транс-ди-трет-бутилгипонитрита трет-BuON=NOBu-трет (I). Эффузионным методом в интервале $0-19^\circ\text{C}$ определена энтальпия испарения I, равная $17,7 \pm 0,3$ ккал/моль. Вычисл. на основе эксперим. данных значения $-\Delta H^\circ$ (обр.) тв. и газ. I равны $59,0 \pm 2,9$ и $41,3 \pm 2,9$ ккал/моль. Давл. пара I при 19°C равно 0,13 Торр. Указывается, что ΔH (обр.) гипонитрита экспериментально определено впервые. С использованием метода аддитивности для транс- $\text{NON}=\text{NOH}$ получено ΔH° (обр.) = 3,1 ккал/моль в хорошем согласии с лит. расчетами методами МО. По аддитивной схеме оценены энергии активации E_a гомолитич. разл. нек-рых орг. транс-гипонитритов. Однако расчетные данные не согласуются с эксперим., что связано с компенсирующим линейным соотношением между E_a и $\lg A$ (A — частотный фактор) для гипонитритов.

Р. Г. Сагитов

 $\Delta H_w, \Delta H_f;$

X. 1985, 19, 28

1985

10 Б1222. Отнесение низкочастотных колебаний в инфракрасных спектрах и спектрах комбинационного рассеяния (+)-борнилацетата, используя данные по родственным соединениям и дейтеропроизводным. A low frequency assignment for infrared and Raman spectra of (+)-bornyl acetate using related compounds and deuterated derivatives. Kim S. B., Hammaker R. M., Fateley W. G. «Spectrochim. acta», 1985, В40, № 10—12, 1295—1330 (англ.)

Проведено отнесение 21 фундаментального колебания (+)-борнилацетата (I), его 9-дейтеропроизводных и (—)-изоборнил-10,10,10- d_3 -ацетата в обл. 200—850 см^{-1} . Модельными соединениями для анализа являлись норборнан, неопентан, метилацетат, циклопентанол, (—)-изоборнилацетат, а также родственные соединения: эндо-норборнилацетат, 1-метил-эндо-норборнилацетат, апоборнилацетат и ряд эндо и экзо-стереоизомерных спиртов на основе норборнана. В ИК-спектрах сильнее про-

X. 1986, 19, N 10

являются колебания ацетатной группы, а в спектрах КР — колебания четвертичных атомов углерода. В спектрах I и родственных соединений частоты вал. кол. четвертичных атомов C-1 и C-7 лежат в обл. 580—679 и 600—670 см^{-1} соотв. частоты деф. кол. C-1 и C-7 — в обл. 220—260, 540—610 см^{-1} и 360—430, 500—540 см^{-1} соотв. Частоты симм. вал., деф. и крут. кол. кольца лежат в обл. 940—770, 830—700 и 340—310 см^{-1} соответственно.

И. А. Гарбузова



1985

9 Б1081. Изучение методом МО водородной связи в салицилальдегиде. Hydrogen bonding in salicylaldehyde: a molecular orbital study. George Philip, Bock Charles W., Trachtman Mendel. «J. Mol. Struct.», 1985, 133, Suppl.: «Theochem», 26, 11—24 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО в базисе 6-31 ГФ с оптимизацией геометрии проведены расчеты плоской молекулы салицилальдегида, (I) с внутримолекулярной Н-связью и ее ротамера (II), с группой OH, повернутой на 180° вокруг связи C—O. Разность энергий I и II ΔE_t ($-11,9$ ккал/моль) включает энергию возмущения связей и валентных углов при переходе от II к I ($\Delta E_d = 2,2$ ккал/моль) и собственно энергию Н-связи ($\Delta E_b = -14,1$ ккал/моль). Сопоставление величин ΔE_t , ΔE_d и ΔE_b с соотв. лит. значениями для β -оксиакролеина ($-4,2$; $0,9$ и $-5,1$ ккал/моль) свидетельствует о том, что бензольное кольцо в I оказывает существенное влияние на стабильность Н-связанной системы. Найдено, что изменение полных зарядов атомов при переходе от II к I обусловлено, в основном, π -вкладом,

X. 1986, 19, 29

а изменение заселенностей перекрывания — σ -вкладом.
Э. Д. Герман

генд.

1985

9 Б1069. Расчет энергии связи для связей между металлами главных групп, водородом и углеродом. Yuan Lubiny, Qi Aihua. «Хуасюэ тунбао, Chemistry», 1985, № 8, 17—20 (кит.)

Предложена эмпирич. ф-ла для расчета энергий связей металл—Н и металл—С в металлорг. соединениях элементов главных групп: $E = t_i(\Delta S/n\Sigma S)E_i + t_c(t_i / ((a+b))E_c$, где t_i , t_c , E_i и E_c — те же величины, что и в ф-ле Сандерсона (см. Sanderson R. T. «Chemical Bonds and Bond Energy» N.-Y. «Academic Press», 1976) для оценки энергии связи; ΔS — разность электроотрицательностей по Сандерсону, ΣS — их сумма, n — коэф., равный 2,3 для связей Н—металл и 1,23 для связей С—металл, a и b поляризуемости атомов. При $\Delta S/n\Sigma S$ и $a+b=1$ предложенная ф-ла превращается в ф-лу Сандерсона для расчета энергий связи. Ф-ла использована для расчета 51 молекулы со связями металл—Н и металл—С. Вычисленные энергии связи согласуются с эксперим. в вероятных пределах ошибки их эксперим. определения для большинства из изученных соединений.

И. Н. Сенченко

X. 1986, 19, № 9

1985

10 Б1111. Молекулярная структура и псевдотвращательное движение циклопентилсилана по данным газовой электронографии. The molecular structure and pseudorotational motion of cyclopentylsilane as determined by electron diffraction. Shen Q., Dakkouri M. «J. Mol. Struct.», 1985, 131, № 3—4, 327—332 (англ.)

Проведено электронографич. исследование при -10°C циклопентилсилана. Наиболее стабильный конформер имеет форму конверта (симметрия C_s) с силильной группой в экваториальном положении. Энергия формы с аксиальной силильной группой на 750 кал/моль выше. Основные молек. параметры: $r(\text{C}-\text{C})$ 1,548 (2) Å, q (складчатость цикла) 0,409 (2) Å, $r(\text{Si}-\text{H})$ 1,490 (14) Å, $r(\text{Si}-\text{C})$ 1,874 (4) Å, $\angle\text{SiCC}$ 113,1 (6°), $\angle\text{CCH}$ 110,2 (8°).
Из резюме

X. 1986, 19, N 10

1985

10 Б1143 Деп. Определение угла поворота тиенильной группы в молекулах 2-фенил- и 2-пиридилтиофена. Даллакян П. Б., Ше Ф. М. «Материалы Конф. мол. ученых хим. фак. МГУ, Москва, 25—28 янв. 1985. Ч. 2», М., 1985, 279—282, ил. Библиогр. 6 назв. Рус. (Рукопись деп. в ВИНТИ 5.12.85, № 8374-В)

Методом хроматоструктурного анализа определен угол поворота тиенильной группы в молекулах 2-фенил- и 2-пиридилтиофена. Модели молекул строили на основе геометрич. параметров бензола, пиридина и тиофена. Используются эмпирич. атом-атомные Пт С (аром)...С (графит), Н...С (графит), S...С (графит) и N...С (графит). Угол поворота найден равным $30 \pm \pm 3^\circ$. Варьирование длины связи между кольцами в диапазоне 0,147—0,150 нм практически не влияет на этот результат.

Автореферат

Х. 1986, 19, N 10

1985

10 Б1130. Повторное исследование формальдегид-анилиновой конденсации. Сообщение 4. Ультрафиолетовые фотоэлектронные и электронные трансмиссионные спектры и полуэмпирическое теоретическое изучение N-метилениланилина и его симметричных диметилциклозамещенных гомологов. Reinvestigation of the formaldehyde-aniline condensation. Part 4. Ultraviolet photoelectron and electron transmission spectra of N-methylethaniline and its symmetric dimethyl ring-substituted homologues and semiempirical theoretical evaluations. Distefano Giuseppe, Giumanini Angelo G., Modelli Alberto, Poggi Gabriella. «J. Chem. Soc. Perkin Trans.», 1985, PT 2, № 10, 1623—1627 (англ.)

Измерены фотоэлектронные спектры (ФС) и электронные трансмиссионные спектры (ЭТС) 1,3,5-трифенилгексагидротриазина (I), 2,2',2'',6,6',6''-гексаметил-I (II) и 3,3',3'',5,5',5''-гексаметил-I (III). Методом МПДП с

X. 1986, 19, N 10

варьированием всех независимых степеней свободы рассчитаны N-метиленанилин (IV) и его циклич. димер 1,3-дифенилдиазетин (V). Анализ ФС и ЭТС показывает, что пары I—III представляют собой, главным образом, молекулы IV, V и соотв., их замещенных. Сродство к электрону VI (эВ) —0,25, —1,11, —1,85, —4,6. Пт ионизации VI (эВ): 8,73; 9,38; 10,30 и 11,6. Сопоставление вычисленных орбитальных энергий различных конформаций IV с эксперим. Пт ионизации показывает, что в газовой фазе IV существует в почти копланарной конформации, характеризующейся сильным $\pi(\text{Ph})-\pi(\text{NC})$ -взаимодействием.

В. И. Фаустов

1985

10 Б1128. Системы с двойной связью атома фосфора(III), карбеновые и алкеновые аналоги. Электронное строение имино- и метилефосфанов. Phosphorus(III) double bond systems, carbene and alkene analogues. The electronic structure of imino- and methylene-phosphanes. Niocke E., Gudat D., Schoeller W. W., Rademacher P. «J. Chem. Soc. Chem. Commun.», 1985, № 15, 1050—1051 (англ.)

Исследована корреляция между двумя первыми Пт ионизации иминофосфанов $R^1P=NR^2$ [$R^1, R^2 = \text{трет-Бу, SiMe}_3, N(\text{SiMe}_3)_2$] и энергиями двух нижних электрон-ных переходов. Разности двух первых Пт ионизации хорошо коррелируют с разностями энергий переходов. Аналогичное сопоставление проведено для метилефосфанов. Сделан вывод, что при варьировании заместителей карбеновый характер иминофосфанов может меняться на алкеновый. В. Фаустов

X. 1986, 19, N 10

1983

13 Б1213 К. Атлас спектров ароматических и гетероциклических соединений. Вып. 27. ИК-спектры и спектры КР нитроксильных радикалов ряда 3-имидазолина, их диамагнитных предшественников и аналогов, содержащих D и ^{15}N . Ред. Коптюг В. А. Новосибирск: Ин-т орг. химии, 1983. 192 с., ил.

Х. 1986, 19, N 13

1985

9 E758. Полиморфизм и старение терефталевой кислоты. Polymorphism and aging in terephthalic acid. Saska Michael, Myerson Allan. «Cryst. Res. and Technol.», 1985, 20, № 2, 201—208 (англ.; рез. нем.)

Неограниченные частицы терефталевой кислоты (ТФК) размером 20—50 мкм, помещенные в ее насыщенный раствор, после выдержки в течение нескольких часов при $t_{\text{ре}}$, превышающей 150°C , превращаются в хорошо ограниченные кристаллы игольчатой формы, часто со следами двойникования. Рентгенографич. методом исследования возможная роль полиморфизма в процессе старения ТФК. Вопреки ожиданиям оказалось, что на всех стадиях процесса наблюдается лишь одна полиморфная модификация ТФК. С использованием ранее применяемых для этого класса органических кислот потенциалов меж-атомных взаимодействий рассчитаны энергии двух предполагаемых полиморфных модификаций ТФК I и II.

полиморфизм

Ф 1985, 18, № 9.

которые составляют 41,02 и 39,99 ккал/моль, соответственно. Расчетная теплота превращения 1,03 ккал/моль оказывается достаточно малой по сравнению с величиной изменения энтропии, что позволяет предполагать возможность реализации полиморфного превращения I—II при некоторых специальных внешних условиях, хотя указанное превращение и не имеет места в обычном процессе старения ТФК.

А. Отко



С. Н. - N (аром. соед.).

1985

?

20 Б3051. Исследование соединения включения [состава] 4:1, [образуемого] дезоксихолевой кислотой и (Е)-п-диметиламиноазобензолом, путем измерений давления пара. Study of the 4:1 inclusion compound between deoxycholic acid and (E)-p-dimethylaminoazobenzene by vapour pressure measurements. Campanelli A. R., Ferro D., Pavel N. V. «Thermochim. acta», 1985, 87, 231—238 (англ.)

Соединение включения (СВ), образующееся при внедрении молекул (Е)-п-диметиламиноазобензола (I) в крист. решетку дезоксихолевой к-ты (II) было получено р-рением I и II в сп. с послед. медленным испарением р-рителя. СВ имело состав $II:I=4:1$. СВ — призматич. оранжев. кристаллы, т. пл. 479—480 К, параметры элементарной ячейки: a 25,676, b 13,731, c 7,160 А, ρ (эксп.) 1,17, ρ (выч.) 1,18 г/см³. Торсионным эффузионным методом определено давл. пара над тв. I и СВ. Данные для I описываются ур-нием $\lg P(\text{кПа}) = 15,05 \pm 0,18 - (6887 \pm 500)/T$, из к-рого для 381 К найдено $\Delta H^\circ(\text{исп.}) = 132 \pm 8$ кДж/моль. Давл. пара I над СВ лежит на пределе чувствительности метода. По грубой оценке при 435 К $\Delta H^\circ(\text{исп.}) = 138$ кДж/моль. Результаты свидетельствуют о силь-

х. 1985, 19, N20

ном взаимодействии I и II в соединении включения.

Р. Г. Сагитов

Ж/М
7:

Ph¹⁵NO₂⁻

1987

24 БЗ030. Влияние изотопного замещения на электронное сродство нитробензола в газовой и жидкой фазах. Effect of isotopic substitution upon the gas phase and solution electron affinities of nitrobenzene. Stevenson Gerald R., Reiter Richard C., Espe Matthew F., Bartmess John E. «J. Amer. Chem. Soc.», 1987, 109, № 13, 3847—3849 (англ.)

Методами ионного циклотронного резонанса (в газовой фазе) и ЭПР (в р-ре) измерена константа равновесия K_p р-ции электронного переноса (ЭП) $\text{Ph}^{14}\text{NO}_2^{\cdot-} + \text{Ph}^{15}\text{NO}_2 \rightleftharpoons \text{Ph}^{14}\text{NO}_2 + \text{Ph}^{15}\text{NO}_2^{\cdot-}$. Для ЭП в газовой фазе $K_p \sim 1$ ($T = 305 \text{ K}$). Для ЭП в жидк. NH_3 ($T = 208 \text{ K}$) $K_p = 2,1$, если противоион K^+ и $K_p = 0,4 \text{ Na}^+$. Очень слабое влияние изотопного замещения азота на ΔG_0 р-ции в газовой фазе объяснено на основе расчетов PhNO_2 и $\text{PhNO}_2^{\cdot-}$ квантовохимич. методами МПДП и АМ1, эффектом удлинения связи $\text{N}-\text{O}$ и укорочения $\text{C}-\text{N}$ при переходе от PhNO_2 к $\text{PhNO}_2^{\cdot-}$. В случае р-ции ЭП в р-ре влияние катиона на K_p объяснено эффектом образования ионных ассоциатов.

Э. Д. Герман

ЭП,

Х. 1987, 19, № 24

Опашуеет.
Срежуеет

(IM. 27049)

1987

Kebarle P., Chowdhury S.,

Chem. Rev., 1987, 87,
Ae; N3, 513-534.

Electron Affinities and
Electron-Transfer Reactions.

1984

14 БЗ046. Химические термодинамические свойства молекул, претерпевающих инверсию. II. Метиланилины. Chemical-thermodynamic properties of molecules that undergo inversion. II. The methylanilines. Draeger J. A. «J. Chem. Thermodyn.», 1984, 16, № 11, 1067—1073 (англ.)

На основе лит. данных в интервале 0—1500 К вычислены хим. термодинамич. функции для изомерных 4-, 3- и 2-метиланилинов (I—III соотв.) в состоянии идеального газа при давл. 101,325 кПа. Расчет колебательных вкладов базировался на анализе норм. мод. Предполагалось, что изолированные метильные группы имеют пренебрежимо малые барьеры внутр. вращения и что барьер, ограничивающий внутр. вращение аминной группы, равен барьеру в анилине. Наблюдавшиеся инверсионные переходы использованы для расчета приведенных потенциальных функций, из к-рых были выведены функции распределения для инверсии. Представлены данные, использовавшиеся в расчетах. При

м.ф. 2.

X. 1985, 19, N 14

0 К для I—III $\Delta H^\circ(\text{обр.}) = 68,9, 88,5$ и $81,2$ кДж/моль
 соотв. Величины $C_p^\circ/R, S^\circ/R, [H^\circ(T) - H^\circ(0)]/RT$ ($R =$
 $= 8,31441$ Дж/К·моль), $\Delta H^\circ(\text{обр.})$ и $\Delta C^\circ(\text{обр.})$ при
 298,15, 900 и 1500 К соотв. равны: I 15,73, 42,38, 9,13,
 41,8 кДж/моль и 152,4 кДж/моль, 34,14, 69,93, 20,84,
 18,7 и 396,5, 40,74, 89,16, 27,67, 18,9 и 648,9, II 15,64,
 42,78, 9,02, 61,1 и 170,8, 34,09, 70,24, 20,75, 37,7 и
 413,1, 40,72, 89,45, 27,61, 37,7 и 664,0, III 16,23, 42,72,
 9,42, 54,8 и 164,6, 34,25, 70,57, 21,09, 32,9 и 405,9, 40,78,
 89,83, 27,85, 33,5 и 655,0. Сообщ. I см. РЖХим, 1983,
 19Б892.

Р. Г. Сагитов

1988

22 Б3061. Давление паров и энтальпии испарения амилформиата. Догонина М. Д., Петров В. М., Трейбшо Е. И., Васильев И. А. «12 Всес. конф. по хим. термодинам. и калориметрии. Тез. стенд. докл., Горький, 13—15 сент., 1988. Ч. 1». Горький, 1988, 89

В интервале давл. 2—103 кПа эбулиметрич. методом для давл. пара амилформиата (I) получено $\lg P(\text{Па}) = 35,79565 - 3493,107/T - 8,50186 \lg T$. Калориметрически измерены энтальпии испарения I в циркуляц. установке. При 101,00 кПа и 405,15 К получено $\Delta_{\text{vap}} H = 36,01$ кДж/моль. А. С. Гузей

$P, \Delta H$,

X. 1988, N 22

1988

18 Б4128 Деп. Соотношения для расчета констант равновесия реакций дегидрирования нормальных парафинов состава C_6-C_9 в моноолефины. Елисеев Н. А.; ВМТУ. Калуж. фил. Калуга, 188. 10 с. Библиогр. 4 назв. Рус. (Рукопись деп. в ОНИИТЭХИМ г. Черкассы. 12.05.88, № 475—хп88)

Вычислены изменения термодинамич. параметров (разности энтальпий, энтропий и теплосмкостей) р-ций дегидрирования н-парафинов состава C_6-C_9 в изомерные алкены. Показано, что эти изменения сравнительно невелики, поэтому каждую аналогичную р-цию можно охарактеризовать средними значениями термодинамич. параметров. Это дает возможность вывести соотношение, позволяющее вычислять константы равновесия р-ций образования различных изомерных моноолефинов — алкенов-1, а также алкенов-2, 3 и т. д. в цис-транс-формах в широком интервале т-р. Представлены численные значения констант в предложенном ур-нии.

$(\Delta H_f^\circ, S, C_p)$

X. 1988, 19, № 18

Между константами равновесия, вычисленными с помощью предложенного соотношения и рассчитанными др. способами, наблюдается удовлетворит. согласие.

Автореферат



Оптические
свойства

(оп. 30539)

1988

Gustiss L.A., Blander M.,

Chem. Rev., 1988, 88, N6,
827-841.

(ΔH<sub>гидрогено-
вых</sub>)

Thermodynamic Properties
of Gas-Phase ● Hydrogen-
Bonded Complexes.

1988

1 Б3041. Термическое разложение хлорсодержащего циклотритриазила / Спицын В. И., Колли И. Д., Орлова Э. М., Дьяченко О. Г. // Ж. неорг. химии.— 1988.— 33, № 9.— С. 2225—2227.— Рус.

Методами ДТА, РФА и ИК-спектроскопии изучено термич. разложение хлорсодержащего циклотритриазила S_4N_3Cl (I) при нагревании до $600^\circ C$ в атмосфере азота. Показано, что процесс разложения I сопровождается значительным экзотермич. эффектом в обл. т-р $140—180^\circ C$ и протекает с разрывом связи S—S дисульфидной группы. Изменение энтальпии наблюдаемого теплового эффекта по данным ДСК равно $\Delta H = -196,5 \pm 0,1$ кДж/моль. Масс-спектрометрич. исследование подтверждает предложенную схему термич. разложения I.

Резюме

X. 1989, N1

1988

24 Б3221. Избыточные молярные объемы и энтальпии системы 2-бутоксизтанол — вода при 25° С. Excess molar volumes and enthalpies of the 2-butoxyethanol + water system at 25° С. Davis Michael I., Molina M. Concepcion, Douheret Gerard. «Thermochim. acta», 1988, 131, 153—170 (англ.)

При 25° С из данных по плотности и калориметрич. измерений определены избыточные объемы (V^E) и энтальпии (H^E) смесей 2-бутоксизтанол (I) — вода во всем интервале составов. Для изученных смесей V^E и H^E отрицательны, причем минимумы V^E и H^E сдвинуты в обл. $x < 0,5$, где x — мол. доля I. Эксперим. данные обработаны на основе четырехсегментной модели водно-орг. смесей. Обсуждены различные модификации модели. Модель включает 4 сегмента (обл. составов); обл. составов, богатая орг. р-рителем; микрогетерогенная обл.; промежуточная обл. (второй сегмент); обл. составов, богатая водой.

А. С. Соловкин

А. С. Соловкин

Х. 1988, № 24

1988
Орлов Ю.Д., Лебедев Ю.А.,

Термодинам. св-ва органи-
ческих свободных радикалов

XII Всесоюзная конферен-
ция по химической термо-
динамике и
координатной.

84-85

Мезвуховский сборник.

Горький, стр. 84-85, 1988г.

1987

17 Б3037. Кажущиеся молярные теплоемкости ацетата натрия в метаноле. Федяйнов Н. В., Цветков Н. И., Дракин С. И., Азарова Е. Г. «Тр. Моск. хим.-технол. ин-та», 1987, № 148, 34—39

В изотермич. калориметре измерены уд. теплоемкости C_p метанольных р-ров ацетата натрия (I), рассчитаны кажущиеся теплоемкости Φ_c I в метаноле. В обл. малых конц-ий Φ_c определены из т-рной зависимости энтальпии р-рения. Экстраполяцией к бесконечному разбавлению найдены значения Φ_c° . Резюме

C_p ~~ац~~

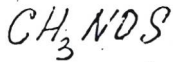
X. 1988, 19, N 17

1987

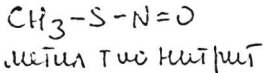
Zhang Lianzhong,
Spencer W. F. et al.

P, ΔHv; Хуаньцзунь кэсюэ сюэбао,
Acta sci. circumstantiae,
1987, N 4, ● 479-484.

(сер.



1983



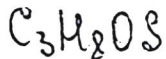
спектр

1) 22 Б247. Предложение о пересмотре конформации метилтионитрита на основании его спектров и предварительных неэмпирических расчетов. A suggested revised conformation of methylthionitrite as seen by its spectra and preliminary ab initio calculations. Bak B., Kristiansen N. A., Johansen H. «J. Mol. Struct.», 1983, 100, 453—458 (англ.)

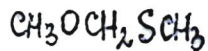
В приближении фиксированной геометрии выполнен неэмпирич. расчет дипольных моментов и потенциальных кривых внутреннего вращения метильной группы для син- и анти-изомеров и внутреннего вращения вокруг связи S—N для син-изомера молекулы метилтионитрита, CH_3SNO (I). Путем повторного анализа лит. данных по спектрам ЯМР, ИК-спектрам и спектрам КР и на основании результатов проведенного расчета показано, что молекула I в газовой фазе существует как син-изомер. Подчеркнуто, что син-изомер более стабилен, чем анти-изомер (1—2 ккал/моль), и что вращение метильной группы в анти-изомере гораздо более затруднено по сравнению с син-изомером. Отмечена аналогия рассмотренных характеристик молекулы I с соотв-щими эксперим. значениями для метилнитрита CH_3ONO .

Ю. Н. Панченко

X. 1983, 19,
N 22



1984



метоксн (метил-
тио)метан

16 Б1071. Теоретическое исследование стереохимии метокси(метилтио)метана как модели тиаоацетального сегмента в тиосахаридах. Theoretical study of stereochemistry of methoxy(methylthio)methane as a model of thioacetal segment in thiosaccharides. Tvaroška Igor. «Collect. Czech. Chem. Commun.», 1984, 49, № 2, 345—354 (англ.)

Методами ВКВЛО и МПДП исследована структура и внутр. вращение молекулы $CH_3OCH_2SCH_3$. Методом ВКВЛО рассчитаны конформац. карты вращения относительно связей C—O и C—S при длинах связей $C_1—O_2$ 0,143 нм, $O_2—C_3$ 0,141 нм, $C_3—S_4$ и $S_4—C_5$ 0,180 нм и $C—H$ 0,110 нм, вал. углы COC 112, OCS 112, CSC 99,6 и HCO и HCS 109,46°. Для антиперипланарной (АП — вращение относит. C—O-связи) и синклиальной (СК — вращение относит. C—S-связи) конф-ций молекулы получен порядок стабильностей $(СК, СК) > (АП, СК) > (СК, АП) > (АП, —СК) > (АП, АП)$. Методом МПДП с градиентной оптимизацией проведен расчет геомет-

Х. 1984, 19, N 16

рич. структур, соотв. минимумам из ВКВЛО расчета. Порядок следования изомеров сохранился, а их соотношение равно $92:5:2:1:0$. Приведены энергии, геометрич. параметры, заряды на атомах, ПИ и дипольные моменты конформеров, к-рые возрастают при уменьшении стабильности конформеров. Расчет показывает, что при учете р-рителя с увеличением его полярности увеличивается содержание конформеров с большими величинами дипольных моментов. Так в ацетонитриле и воде соотношение конформеров равно $85:8:3:4:0$ и $63:14:7:16:0$ соответственно.

В. Болотин



CN₂SH₂

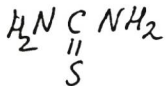
1983

13 Б755. Термохимическое исследование аддуктов тетрахлоридов подгруппы титана с тиомочевинной. Ко-нунова Ц. Б., Кудрицкая С. А. «Ж. неорганич. химии», 1983, 28, № 3, 788—790

Определены теплоты р-рения комплексов титана, циркония и гафния с тиомочевинной состава $MCl_4 \cdot ThiO$ и

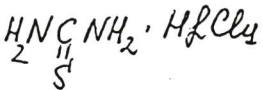
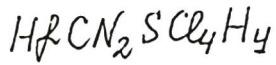
$MCl_4 \cdot 2ThiO$ в 4 н. соляной к-те. На основании цикла Габера рассчитаны теплоты, выделяющиеся при присоединении n молей газ. лиганда при 298 К к одному молю тетрахлорида металла, а также теплоты присоединения 2-й молекулы лиганда к комплексу состава 1:1. Показано, что теплота присоединения 2-й молекулы в комплексах состава 1:2 невелика и составляет 40—80 кДж/моль, т. е. близка к значениям энергий Н-связей.

Резюме



Тиомочевина

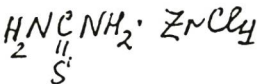
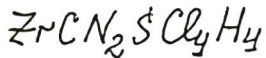
Х. 1983, 19, N 13



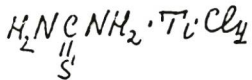
тиомочевина

аддукт с Тетрахлоридом

эарина (1:1)

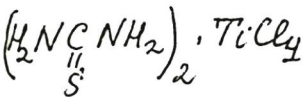
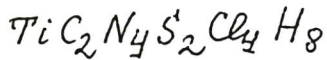


тіомочевина
 аддукт з тетрахлоридом
 цирконія (1:1)



тиомочевина

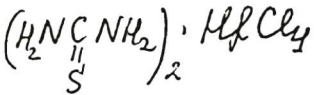
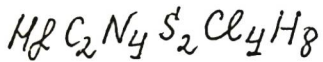
аддукт с тетрахлоридом
титана (1:1)



тіомочевина

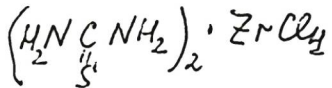
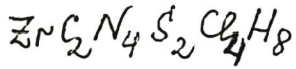
аддукт с тетрахлоридом

титана (2:1)

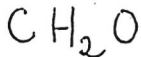


тиомочевина

аддукт с тетрахлоридом
газглия (2:1)



тиомочевина
 аддукт с тетрахлоридом
 циркония (2:1)



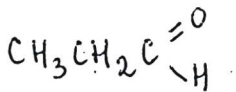
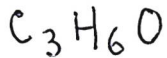
1981

$\text{H}-\text{C}=\text{O}$
 |
 H
формальдегид

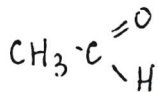
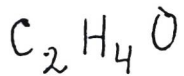
ракет
барьер
инверсии

9 Б74. Конформации триплетных состояний карбонильных соединений: формальдегида, ацетальдегида, пропиональдегида и ацетона. Peterson Michael R., De Maré George R., Csizmadia Imre G., Strausz Otto P. Conformations of triplet carbonyl compounds: formaldehyde, acetaldehyde, propionaldehyde and acetone. «J. Mol. Struct.», 1981, 86, № 1—2, («Theochem», 1981, 3, № 1—2), 131—147 (англ.)
Неэмпирическим методом ССП МО в базисе ОСТ-3 ГФ исследованы конформации триплетных состояний ацетона, пропиональдегида, формальдегида и ацетальдегида. Найденные барьеры инверсии равны 2,5; 2,3; 2,0 и 2,3 ккал/моль соответственно. В. Болотин

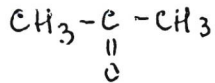
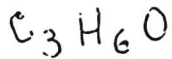
X. 1982, 19, №9.



пропиональдегид

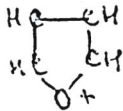


ацетальдегид



ацетон

$(C_4H_4O)^+$



ΔH_f ;

1982

4 Б878. Изомерные и таутомерные ионы $[C_4H_4O]^+$; их термодинамика и характеристики индуцированной столкновениями фрагментации. Isomeric and tautomeric $[C_4H_4O]^+$ ions; their thermochemistry and collisionally induced fragmentation characteristics. Burgers Peter C., Holmes John L., Lossing F. P., Mommers Alexander A., Povel Frank R., Terlow Johan K. «Can. J. Chem.», 1982, 60, № 17, 2246—2255 (англ.)

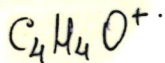
Определены масс-спектры при активации соударением (МАС) ионов $(C_4H_4O)^+$, образующихся из различных предшественников, и энергии ионизации и появления. На основе эксперим. данных вычислены энтальпии образования изомерных ионов $(C_4H_4O)^+$. Значения

ΔH (обр.) ионов составили: C_4H_4O -фуран 197 ккал/моль, $HC \equiv COCH=CH_2$ 251, $CH_2=CHCH=C=O$ 194, $CH_2CH_2C=C=O$ 198±2, $MeCH=C=C=O$ 202, $MeC \equiv CHC=O$ 240, $MeCOC \equiv CH$ 244, $HC \equiv CC(OH)=$

Х. 1983, 19, № 4

✓

$=CH_2$ 217, $H_2C=C=CHCHO$ 236, $MeC\equiv CCHO$ 246, $HC\equiv CCH_2CHO$ 247, $HC\equiv CCH=CH(OH)$ 222, $H_2C=C=C=CH(OH)$ 222. Обсуждены вопросы, касающиеся термодинамич. устойчивости кето-енольных таутомеров и легкости взаимных превращений нек-рых ионов. Структура большинства ионов установлена лишь по МАС. Однако, как подчеркивается, иногда структурное отнесение на основе одного МАС, без дополнительной информации, затруднительно. Р. Г. Сагитов



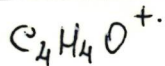
1982

$\text{CH}_2 = \text{C} = \text{C} = \text{CHOH}$
катион-радикал
1,2,3-бутантриен-1-ол

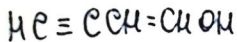
Burgers P.C., Holmes J.L.,
Liossing F.P., et al

Can. J. Chem., 1982, 60,
N 17, 2246-2255

ΔH_f



1982



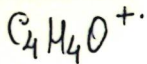
катион-радикал

I-бүйт ем-3-шара

Burgers P.C., Holmes J.L.,
Lossing F.P., et al

Can. J. Chem., 1982, 60,
N17, 2246-2255

ΔHf



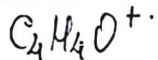
1982

$\text{HC} \equiv \text{CCH}_2\text{CHO}$
катион-радикал
3-бутиналя

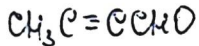
Burgers P.C., Holmes J.L.,
Lossing F.P., et al

Can. J. Chem., 1982, 60, 117,
2246-2255

ΔH_f



1982



Катион-радикал

2-бутинная

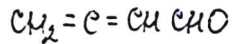
Burgers P.C., Holmes J.H.,
Lossing F.P., et al.

Can. J. Chem., 1982, 60,
N 17, 2246-2255

ΔH_f



1982



катион радикал
формилаллена
(2,3-бутадиенал)

Burgers P.C., Holmes J.L.,
Lossing R.P., et al.

Can. J. Chem., 1982, 60,
N17, 2246-2255

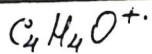
CH₄

1982

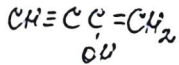
Burgers P.C., Holmes J.H.,
Lossing R.P., et al

Can. J. Chem., 1982, 60,
N17, 2246-2255

ΔHf



1982

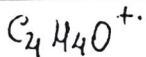


катион-радикал
1-бутен-3-ина-2,

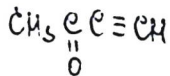
Burgers P.C., Holmes J.L.,
Lossing F.P., et al.

Can. J. Chem. 1982, 60, 117,
2246-2255

ΔHf



1982

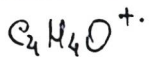


каталон-радикал
иногда другие кетоны

Burgers P. C., Holmes J. L.;
Lossing F. P., et al

Can. J. Chem., 1982, 60,
N 17, 2246-2255

ΔH_f



1982



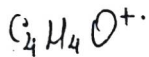
катион-радикал

2-метил-2-оксопропенон

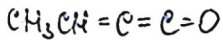
ΔH_f

Burgers P.C., Holmes
J.L., Lossing F.P. et al

Can. J. Chem., 1982, 60,
N17, 2246-2255



1982

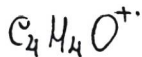


катион-радикал
этимидинкетена

Burgers P.C., Holmes J.L.,
Lossing F.P., et al

Can. J. Chem., 1982, 60,
N17, 2246-2255





1982

$\Delta=\text{C}=\text{O}$
катион-радикал
выключенный из цепи

Burgers P.C., Holmes J.L.,
Lossing B.P., et al

Can. J. Chem., 1982, 60,
N 17, 2246-2255

ΔHf

$C_4H_4O^{+}$ - катион-радикал

1982

$CH_2=CHCH=CH=O$ - катион-радикал
катион радикал
вишнє кейема

Burgers P.C., Holmes J.L.,
Lossing F.P., et al

Can. J. Chem., 1982, 60,
N17, 2246-2255

CH_2

$C_4H_4O^+$ - катион-радикал

1982

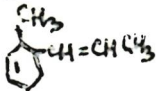
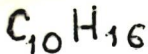
$HC \equiv C OCH=CH_2$ - катион-радикал
этиленвиниловый эфир

Burgers P.C., Holmes J.L.,
Lossing F.P., et al

Can. J. Chem., 1982, 60, N17,
2246-2255

ΔH_f

1979



1-метил-2-про-
пенил-5-циклогек-
сен

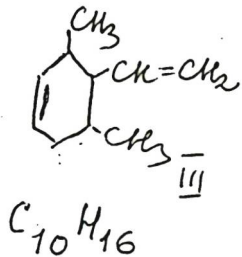
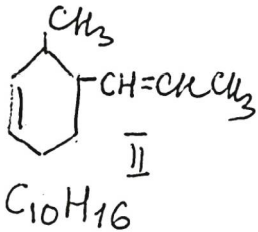
ΔG_f , Кр

+

X. 1980 N 24

24 Б828. Термодинамический анализ равновесных превращений пиперилена. Андрусев М. М. «Тр. Моск. ин-т инж. ж.-д. трансп.», 1979, № 652, 125—129

Рассчитаны значения ΔG° (обр., 298) димеров транс-пиперилена (I), составившие: 1-метил-2-пропенилциклогексен-5 (II) 219,44 кДж/моль, 1-метил-3-пропенилциклогексен-5 221,32, 1,2-диметил-3-этинилциклогексен-5 227,61, 1,3-диметил-2-этинилциклогексен-5 (III) 229,00, 1,2-диметилциклооктадиен-3,7 285,42, 1,5-диметилциклооктадиен-3,7 280,64, 4-метилнонотриен-2,5,7 256,42 и 4-метилнонотриен-3,5,7 234,53. Из этих данных определены величины ΔG и K_p димеризации I и изомеризации олигомеров. Установлено, что равновесие мономер/димер сильно смещено вправо. Наиболее вероятно получение шестичленных циклов (наибольший выход II, наименьший — III), менее вероятно образование линейных димеров и олигомеров с восьмичленным циклом. Определены относит. содержания олигомеров в равновесной смеси. А. С. Гузей

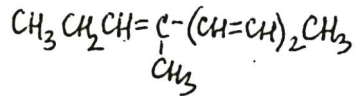


$C_{10}H_{16}$

1979

Андрусов М. М.

Тр. Моск. ин-т. хим.
м.з транспорта, 1979,
№ 652, 125-129

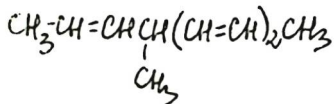


4-метил-3,5,7-
нонатриен

164, Кр

$C_{10}H_{16}$

1979



4-метил-2,5,7-нока-
триен

ΔG_f, Кр

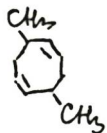
Андрусов М.М.

Тр. Моск. ин-т. инж.

М.г. Трансп., 1979, №652,
125-129

$C_{10}H_{16}$

1979



1,5-диметил-

3,7-циклоокта-
диен

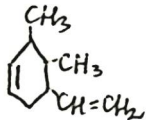
16f, Кр

Анзрусов Н. М.

Тр. Моск. ин-т хим.

М.г. Трансх., 1979, N 52,
125-129

$C_{10}H_{16}$



1,2-диметил-
3-винил-
5-циклогексен

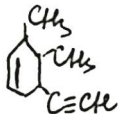
1 а.ф., Кр

1979

Андрусов М. М.

Тр. Моск. ин-т химе.
м. г. транспорта, 1979,
N 652, 125-129

$C_{10}H_{14}$



1,2-диметил-
3-этинил-
5-циклогексен

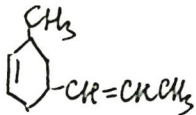
Д.В.Ф. Кр

1979

Андрусев М.М.

Тр. Моск. ин-т хим.
м.г. транспорта, 1979,
N 652, 125-129

$C_{10}H_{16}$



1-метил-3-
винил-5-
циклогексен

464, Кр

1979

Андрусов М. М.

Тр. Моск. ин-т хим.

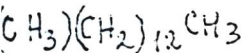
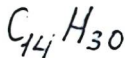
М.г. Транспорта, 1979,
№ 652, 125-129

1981

) 5 Б914. Влияние примесей на температуру и теплоту плавления материалов для аккумулирования тепла за счет теплоты фазового перехода. Sohns J., Seifert B., Hahne E. The effect of impurities on the melting temperature and the heat of fusion of latent heat storage materials. «Int. J. Thermophys.», 1981, 2, № 1, 71—87 (англ.)

Выбор материалов для аккумулирования тепла основан на данных для чистых в-в. Техн. в-ва стоят в 10—100 раз дешевле чистых; однако данные по их термич. св-вам в лит. отсутствуют. Для 7 в-в (тетрадекан, гексадекан, октадекан, эйкосан, лауриновая, пальмитиновая и стеариновая к-ты) измерены т-ры плавления, теплоты плавления и теплоемкости тв. и жидк. фаз в окрестности т. пл. Изучены образцы с разной чистотой: чистые, чистые для синтеза, технич. Результаты табулированы. В зависимости от наличия примесей различия в т. пл. достигают 4,5 К, в теплоте плавления 11,4%, в теплоемкости 27%. Сделан вывод о возможности использования техн. в-в для теплоаккумулирующих устройств, т. к. их характеристики, а также смесей парафинов поддаются учету.

А. С. Гузей



тетрадекан

$$T_m, \Delta H_m$$

X, 1982, 19, N5

$C_{16}H_{34}$

1981

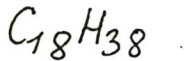
$CH_3(CH_2)_{14}CH_3$

$T_m, \Delta H_m$

Lohm J., Seifert B.,
Hahne E.

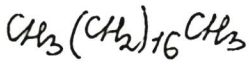
Int. J. Thermophys., 1981,
2, v1, 4-87

гексадекан



1981

Sohns J., Seifert B.,
Hahne E.



Int. J. Thermophys., 1981,
2, N 1, 4-87

T_m , ΔH_m

октадекан

$C_{20}H_{42}$

1981

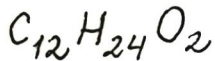
$CH_3(CH_2)_{18}CH_3$

$T_m, \Delta H_m$

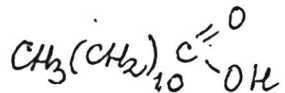
Sohns J., Seifert B.,
Hahne E.

Int. J. Thermophys.,
1981, 2, N1, 71-87

эйкозане



1981



$T_m, \Delta H_m$

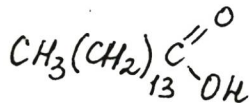
Sohns J., Seifert B.,
Hakke E. .

Int. J. Thermophys.,
1981, 2, N1, 71-87

лауриновая кислота

$C_{15}H_{30}O_2$

1981

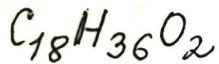


Tm, ΔHm

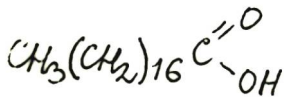
Sohns Y, Seifert B,
Hahne E.

Int. J. Thermophys.,
1981, 2, N1, 71-87

пальмитиновая
кислота



1981



Tm, 1Hm

Sohns J., Seibert B.,
Hahne E.

Int. J. Thermophys.,
1981, 2, N1, H-87

стеариновая кислота

C₂N₂H₅

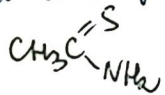
1982.

10 Б757. Термодинамика серусодержащих соединений. III. Термохимическое исследование тиоацетамида и тиобензамида. Sabbah Raphaël, Gomez Luis Alfonso Torres. Thermodynamique de substances soufrees. III. Etude thermochimique de la thioacetamide et de la thiobenzamide. «Thermochim. acta», 1982, 52, № 1—3, 285—295 (фр.; рез. англ.)

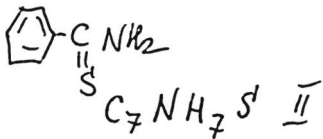
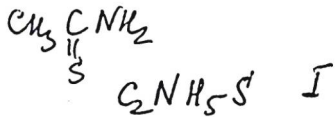
При 298,15 К в калориметре с вращающейся бомбой определены энтальпии сгорания крист. тиоацетамида (I) и тиобензамида (II). Вычисл. из эксперим. данных величины ΔH^0 (обр.) крист. I и II при 298,15 К равны $-73,01 \pm 0,43$ и $33,8 \pm 1,1$ кДж/моль соотв. В калориметре Тиана—Кальве с эффузионной ячейкой определены при 298,15 К ΔH^0 (субл.): I $82,80 \pm 0,25$, II $97,20 \pm 0,60$ кДж/моль. Р. Г. Сагитов

$\Delta H_f, \Delta H_z$

Тиоацетамид



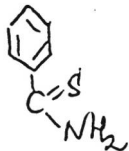
X, 1982, 19, N 10.



~~C₇N¹H₇~~

1982

Sabbah R., Gomez Luis
Alfonso Torres.

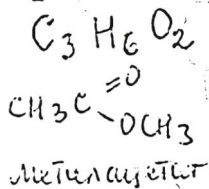


Thermochim. acta, 1982,
52, N1-3, 285-295

4Hf, 1Hs

модензамид





р/

1981

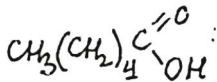
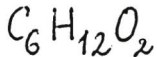
1 Б932. Термодинамические свойства органических кислородных соединений. 51. Давления пара некоторых эфиров и жирных кислот. Ambrose D., Ellen-der J. H., Gundry H. A., Lee D. A., Townsend R. Thermodynamic properties of organic oxygen compounds LI. The vapour pressures of some esters and fatty acids. «J. Chem. Thermodyn.», 1981, 13, № 8, 795—802 (англ.)

Методом сравнительной эбуллиометрии измерены давл. пара метил-, этил-, пропил- и изопропилацетатов (I—IV), пропионовой, масляной и гексановой к-т (V—VII). Области определений (кПа): I—III, V 3—200; IV 6,5—200; VI 3—157; VII 3—31. Для II проведены также эбуллиометрич. и статич. измерения, от 100 кПа до $P_{\text{крит.}}$. Результаты аппроксимированы ур-ниями Антуана, Чебышева и (для I, II) Вагнера, коэф. к-рых табулированы. Определены крит. т-ры I—IV 506,55, 523,30, 549,73, 531,00 К и крит. давл. I—II 4,750 и 3,882 МПа. Интерполированные по ур-ниям

л. 1982, 19 АБ, N1.

Чебышева значения P и dP/dT при 298,15 К, т. кип. и dP/dT при 2 кПа, т. кип. и dP/dT при 101,325 кПа составили соотв.: I 28,828 кПа и 1,284 кПа/К, 249,76 К и 0,136 кПа/К, 330,018 К и 3,539 кПа/К; II 12,600 и 0,613, 265,36 и 0,129, 350,261 и 3,332; III 4,497 и 0,242, 283,97 и 0,121, 374,686 и 3,111; IV 7,892 и 0,401, 273,81 и 0,125, 361,751 и 3,206; V 0,451 и 0,031, 321,71 и 0,115, 414,313 и 3,147; VI 0,102 и 0,08, 342,67 и 0,113, 436,868 и 3,090; VII 0,005 и —, 378,82 и 0,107, 478,17 и 2,938. Сообщ. 50 см. «J. Chem. Thermodyn.», 1981, 13, 61.

А. С. Гузей



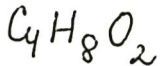
гексановая
кислота

Pv

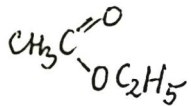
1981

Ambrose D., Ellender J.H.,
Gundry H.A., et al

J. Chem. Thermodyn., 1981,
13, N8, 795-802



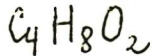
1981



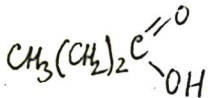
ethyl-
acetate

PV

Ambrose D., Ellender J. H.,
Gundry H. A., et al
J. Chem. Thermodyn., 1981,
13, N 8, 795-802



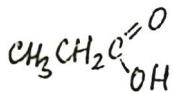
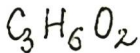
1981



масляная
кислота

PV

Ambrose D., Ellender J.H.,
Gundry H.A., et al
J. Chem. Thermodyn., 1981,
13, N8, 795-802

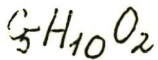


пропионовая
кислота

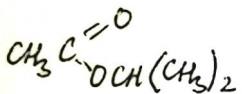
PV

1981

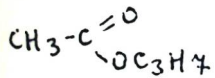
Ambrose D; Ellender J.H,
Gundry H.A, et al
J. Chem. Thermodyn.,
1981, 13, N 8, 795-802



1981



изопропил-
ацетат



пропилацетат

P✓

Ambrose D, Ellender J.V.
Gundry H.A., et al
J. Chem. Thermodyn.,
1981, 13, N 8, 795-802