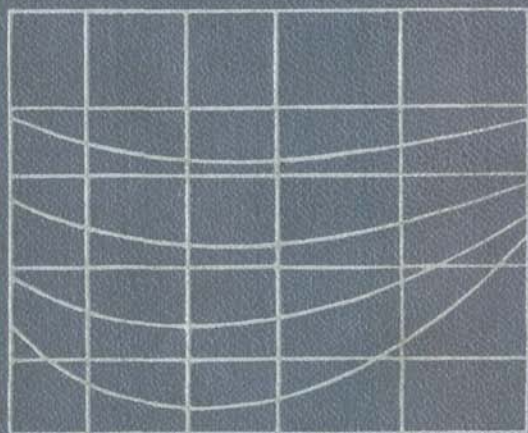




Д.СТАЛЛ · Э.ВЕСТРАМ · Г.ЗИНКЕ

ХИМИЧЕСКАЯ
ТЕРМОДИНАМИКА
ОРГАНИЧЕСКИХ
СОЕДИНЕНИЙ



**THE CHEMICAL THERMODYNAMICS
OF ORGANIC COMPOUNDS**

DANIEL R. STULL
Thermal Research Laboratory
Dow Chemical Company
Midland, Michigan

EDGAR F. WESTRUM, JR.
Professor of Chemistry
University of Michigan
Ann Arbor, Michigan

GERARD C. SINKE
Thermal Research Laboratory
Dow Chemical Company
Midland, Michigan

JOHN WILEY & SONS, INC.
NEW YORK · LONDON · SYDNEY · TORONTO
1969

Д. СТАЛЛ, Э. ВЕСТРАМ, Г. ЗИНКЕ

**ХИМИЧЕСКАЯ
ТЕРМОДИНАМИКА
ОРГАНИЧЕСКИХ
СОЕДИНЕНИЙ**

Перевод с английского
канд. хим. наук. В. А. ЛЕВИЦКОГО
и В. М. САХАРОВА

Предисловие
чл.-корр. АН СССР
Я. И. ГЕРАСИМОВА

ИЗДАТЕЛЬСТВО «МИР»
Москва 1971

Энциклопедия практического использования химической термодинамики для химиков-органиков, занимающихся практическим синтезом и нуждающихся в его эффективном планировании.

В книге кратко и ясно изложены основы химической термодинамики и методы расчета главных термодинамических величин; на многочисленных примерах показано, как используются термодинамические данные для промышленных проблем, охарактеризованы методы оценки термодинамических величин. Основная ценность книги — таблицы термодинамических свойств примерно для 6000 органических и неорганических соединений.

Предназначена для химиков-органиков — работников промышленных предприятий, заводских лабораторий, научно-исследовательских институтов и учебных заведений.

Редакция литературы по химии

ЭНЦИКЛОПЕДИЯ
ХИМИИ
ЖИДКОСТИ
И
ГАЗОВ

30458

Д. Сталл

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Редактор И. В. Алексеева

Художник Д. В. Орлов

Художественный редактор И. Г. Блинов.

Технический редактор Л. П. Бирюкова.

Сдано в набор 3/III 1971 г. Подписано к печати 4/X 1971 г. Бумага № 1 60×90^{1/16} = 29,50 бум. л. 59 усл. печ. л., Уч.-изд. л. 68,90. Изд. № 3/5937. Цена 4 р. 56 к. Зак. 831

ИЗДАТЕЛЬСТВО «МИР»

Москва, 1-й Рижский пер., 2

Московская типография № 16 Главполитграфпрома Комитета по печати при Совете Министров СССР

Москва, Трехпрудный пер., 9

Инд. 2-5-4
71-79

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие	9
Из предисловия к английскому изданию	11
Из предисловия авторов	13

Часть I

ОСНОВЫ ТЕРМОДИНАМИКИ

Глава I. Понятие химической термодинамики	17
Введение	17
Основные определения	18
Уравнение состояния	23
Энергия, работа и теплота	25
Энтальпия	27
Стандартные состояния	28
Давление пара	29
Глава II. Теплоемкость и энтальпия фазовых переходов	32
Теплоемкость	32
Экспериментальное определение теплоемкостей конденсированных фаз при низких температурах	33
Теоретическая оценка теплоемкостей твердых веществ	39
Теплоемкость жидкостей	43
Экспериментальное определение теплоемкостей газов и энтальпий испарения	43
Расчет теплоемкостей газов на основе статистической механики	48
Уравнения теплоемкости	64
Энтальпия	65
Энтальпия фазовых переходов	69
Энтальпия испарения	71
Глава III. Термохимия	77
Энтальпия реакции	78
Зависимость энтальпии реакции от температуры	81
Определение энтальпии образования по данным энтальпий сгорания	83
Определение энтальпий сгорания веществ методом бомбовой калориметрии	84
Определение энтальпий сгорания органических веществ в газообразном и парообразном состояниях	90
Определение энтальпий образования по теплотам реакции	92
Определение энтальпий образования по равновесным данным	95
Определение энтальпий образования другими методами	104

Глава IV. Расчет энтропии	105
Второй закон термодинамики	105
Изменение энтропии при нагревании системы	106
Энтропия смешения	107
Энтропия фазовых переходов	107
Влияние давления на энтропию	107
Третий закон термодинамики	109
Вычисление энтропии на основе третьего закона термодинамики	110
Общее выражение для энтропии	111
Вычисление энтропии по данным низкотемпературных теплосмкостей	111
Расчет энтропии методом статистической механики	112
Энтропия поступательного движения	114
Энтропия вращения	115
Энтропия внутреннего вращения	119
Энтропия колебания	120
Расчет температурной зависимости энтропии	127
Изменение энтропии химической реакции	131
Расчет изменения энтропии реакции из констант равновесия при двух температурах	132
Глава V. Энергия Гиббса и химическое равновесие	134
Энергия Гиббса	134
Энергия Гиббса и равновесный состав	137
Расчет равновесного состава газовой смеси	142
Равновесие в газах при высоких давлениях	148
Равновесие в системах с участием конденсированных фаз	150
Сложные равновесия	153
Зависимость констант равновесия от температуры	154
Функции энергии Гиббса	156
Глава VI. Методы приближенного расчета термодинамических величин	158
Введение	158
Методы расчета с учетом вкладов валентных связей	160
Методы расчета с учетом групповых вкладов	165
Глава VII. Применение термодинамики органических соединений для решения некоторых промышленных проблем	173
Введение	173
Нефтехимия	177
Получение химических соединений из метана	186
Производство стирола	192
Синтез акрилонитрила	197
Синтез хлористого винила	198
Термодинамика синтеза метанола	200
Производство формальдегида из метанола	203
Производство уксусной кислоты	208
Реакция Гаттермана — Коха	210
Использование термодинамики при подборе катализаторов	213

Часть 2

ТЕРМИЧЕСКИЕ И ТЕРМОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ В СОСТОЯНИИ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ ОТ 298 ДО 1000° К

Глава VIII. Термодинамические символы, константы, методы расчета, данные для простых веществ и некоторых неорганических соединений	218
Определение термодинамических символов	218

Константы	221
Машинный расчет табличных данных	224
Стандартные состояния элементов	228
Термодинамические свойства некоторых неорганических соединений	235
Глава IX. Химическая термодинамика углеводородов	259
Исторический обзор	259
Значение углеводородов	261
Закономерности изменения термодинамических свойств	263
Алканы. Таблицы для состояния идеального газа	267
Алкены. Таблицы для состояния идеального газа	347
Алкадиены. Таблицы для состояния идеального газа	369
Алкины. Таблицы для состояния идеального газа	373
Циклоалканы. Таблицы для состояния идеального газа	383
Циклоалкены. Таблицы для состояния идеального газа	387
Алкилциклопентаны. Таблицы для состояния идеального газа	389
Алкилциклопентены. Таблицы для состояния идеального газа	399
Алкилциклогексаны. Таблицы для состояния идеального газа	401
Алкилбензолы. Таблицы для состояния идеального газа	413
Стиролы. Таблицы для состояния идеального газа	436
Алкилнафталины. Таблицы для состояния идеального газа	439
Углеводороды других классов. Таблицы для состояния идеального газа	451
Глава X. Химическая термодинамика соединений углерода, водорода и кислорода	458
Введение	458
Простые эфиры	459
Спирты	459
Альдегиды	463
Таблицы термодинамических свойств кислородсодержащих соединений	465
Алифатические эфиры. Таблицы для состояния идеального газа	465
Циклические эфиры. Таблицы для состояния идеального газа	473
Спирты. Таблицы для состояния идеального газа	476
Ненасыщенные спирты. Таблица для состояния идеального газа	493
Двухатомные спирты. Таблица для состояния идеального газа	493
Циклоалканолы. Таблица для состояния идеального газа	494
Альдегиды. Таблицы для состояния идеального газа	495
Кетоны. Таблицы для состояния идеального газа	502
Ненасыщенные кетоны. Таблица для состояния идеального газа	505
Циклокетоны. Таблица для состояния идеального газа	506
Насыщенные карбоновые кислоты и их производные. Таблицы для состояния идеального газа	507
Ненасыщенные кислоты. Таблицы для состояния идеального газа	511
Фенолы. Таблицы для состояния идеального газа	513
Фенилкарбоновые кислоты. Таблица для состояния идеального газа	516
Глава XI. Химическая термодинамика азотсодержащих соединений	517
Введение	517
Первичные алкиламины. Таблицы для состояния идеального газа	522
Вторичные алкиламины. Таблицы для состояния идеального газа	527
Третичные алкиламины. Таблицы для состояния идеального газа	528
Циклические амины. Таблицы для состояния идеального газа	530
Ариламины. Таблица для состояния идеального газа	534
Нитрилы. Таблицы для состояния идеального газа	535
Нитроалканы. Таблицы для состояния идеального газа	540
Алкилнитриты и алкилнитраты. Таблицы для состояния идеального газа	546

Глава XII. Химическая термодинамика галогенсодержащих соединений	551
Введение	551
Алифатические производные. Таблицы для состояния идеального газа	560
Ароматические фторпроизводные. Таблицы для состояния идеального газа	572
Алифатические хлорпроизводные. Таблицы для состояния идеального газа	577
Ароматические хлорпроизводные. Таблицы для состояния идеального газа	606
Ацилхлориды. Таблица для состояния идеального газа	611
Алифатические бромпроизводные. Таблицы для состояния идеального газа	612
Ароматические бромпроизводные. Таблицы для состояния идеального газа	625
Алифатические иодпроизводные. Таблицы для состояния идеального газа	627
Ароматические иодпроизводные. Таблица для состояния идеального газа	635
Глава XIII. Химическая термодинамика серусодержащих органических соединений	637
Введение	637
Диалкилсульфиды (тиоэфиры, монотиалканы). Таблицы для состояния идеального газа	642
Диалкилдисульфиды (дитиалканы). Таблицы для состояния идеального газа	684
Тиациклоалканы. Таблицы для состояния идеального газа	690
Тиациклоалкены. Таблицы для состояния идеального газа	694
Алкалтиолы (меркаптаны). Таблицы для состояния идеального газа	696
Циклоалкантиолы. Таблицы для состояния идеального газа	712
Ароматические тиолы. Таблицы для состояния идеального газа	713
Другие органические соединения серы. Таблицы для состояния идеального газа	713
Часть 3	
ТЕРМИЧЕСКИЕ И ТЕРМОХИМИЧЕСКИЕ ДАННЫЕ ПРИ 298° К	
Глава XIV. Отобранные значения энтальпии образования и энтропии органических соединений при 298° К	715
Введение	715
ПРИЛОЖЕНИЯ	
Обозначения	719
Основные термодинамические величины	719
Другие величины, обозначаемые курсивными латинскими буквами	720
Величины, обозначаемые греческими буквами	721
Верхние (надстрочные) индексы	721
Нижние (подстрочные) индексы	721
Таблицы П.1—П.12	722
Литература	750
Указатель соединений	794
Предметный указатель	802
Таблицы	809

ПРЕДИСЛОВИЕ

В настоящее время термодинамические расчеты являются общепринятым и существенным элементом многих химических исследований. Помимо эффективной роли таких расчетов при изучении реакционной способности соединений с молекулами различной структуры, особенно важна роль термодинамических расчетов при поисках путей промышленного синтеза технически важных веществ. Здесь термодинамический расчет позволяет выбрать наиболее обещающий из многих возможных путей синтеза данного продукта из различных исходных веществ, а также оценить относительную роль параллельных реакций, протекающих при использовании того или иного пути. Конечно, остаются кинетические затруднения, неподвластные термодинамике. Эти затруднения можно надеяться преодолеть подбором селективных катализаторов.

На пути использования термодинамических расчетов перед химиком-органиком нередко встает трудность освоения методов термодинамического расчета и нахождения исходных данных. Важно также уметь оценить необходимые величины на основе имеющихся данных для сходных веществ с использованием закономерностей, связывающих термодинамические свойства химических соединений с их составом и структурой.

Советский читатель, встречающийся в своей научной деятельности с указанными проблемами, имеет в своем распоряжении несколько ценных руководств — справочных изданий, например книгу А. А. Введенского «Термодинамические расчеты нефтехимических процессов» (Гостоптехиздат, Л., 1960) и книгу В. В. Коробова и А. В. Фроста «Свободные энергии органических соединений» (Изд-во Моск. отд. ВХО им. Д. И. Менделеева, М., 1949). В обширном труде под руководством М. Д. Тиличеева «Физико-химические свойства индивидуальных углеводородов» (выпуски 1—5, Гостоптехиздат, Л., 1951—1954) собраны и обработаны термодинамические данные для многих углеводородов. Важной проблеме оценки физико-химических свойств соединений по данным о свойствах других родственных соединений посвящена книга М. Х. Карапетьянца «Методы сравнительного расчета физико-химических свойств» (изд-во «Наука», М., 1965) и книга В. А. Киреева «Методы практических расчетов в термодинамике химических реакций» (изд-во «Химия», М., 1970).

Новая предлагаемая советскому читателю книга Сталла, Вестрама и Зинке удачно удовлетворяет требованиям химика-органика и представляет собой нечто вроде энциклопедии химической термодинамики для химика-органика. В этой книге в краткой и четкой форме излагаются основы химической термодинамики и приводятся методы расчета основных термодинамических величин, в том числе и статистические методы. Даны примеры расчета выходов при наличии ряда параллельных реакций. Изложены в самой общей форме основы экспериментальной калориметрии. Очень полезны сведения об эмпирических приемах расчетов не известных в литературе данных на основе разложения термодинамических величин по валентным связям и по групповым вкладам с примерами и таблицами вкладов.

Однако самая ценная часть этой книги — обширная и систематическая сводка термодинамических данных, охватывающая впервые всю литературу до января 1966 г., а также полная библиография. Таким образом, пользуясь этой книгой, химик-органик может освоить методы термодинамического расчета, провести эти расчеты на основе имеющегося в книге цифрового материала и попытаться оценить отсутствующие в справочной части данные для интересующих его соединений.

Эта в высшей степени полезная книга будет надежным помощником во многих исследованиях, особенно при широких поисках путей синтеза и способов использования полученных соединений.

Я. Герасимов

ИЗ ПРЕДИСЛОВИЯ К АНГЛИЙСКОМУ ИЗДАНИЮ

Критическая оценка опубликованных данных с целью составления таблиц значений физических и термодинамических свойств химических веществ представляет собой конечный результат экспериментальной термодинамики, важный для решения практических промышленных проблем. До 1939 г. сводные таблицы, применявшиеся для практических целей, составлялись, как правило, отдельными исследователями. В последнее время систематическая работа по составлению термодинамических таблиц осуществляется в нескольких научных центрах. Такими центрами в США являются Национальное бюро стандартов, университет в Техасе и химическая компания «Доу» (Мидленд, Мичиган), в СССР — Академия наук СССР, в Англии — Имперский колледж в Лондоне.

В связи с необходимостью анализа все возрастающего объема новых данных и возможностью применения вычислительной техники наблюдается тенденция к групповой работе по составлению наиболее полных таблиц физических и термодинамических свойств.

Монография Американского химического общества «Свободные энергии некоторых органических веществ», написанная Парксом и Хаффманом и явившаяся в свое время одной из самых серьезных из всех опубликованных компиляций, ставила своей целью представить термодинамические зависимости и данные по равновесиям в виде, наиболее удобном для практического использования. Одновременно она служила справочником термодинамических свойств достаточно простых химических веществ. Монография была опубликована в 1938 г. Впоследствии авторы приступили к подготовке нового издания книги, однако начавшаяся война помешала окончанию работы. Хаффман, Парке и Сталл обсудили возможность написать эту книгу запово еще в 1948 г., однако не смогли выделить достаточного времени для этой работы и предложили Сталлу взять на себя ответственность за полную переработку монографии. Позднее Зинке, работавший в компании «Доу» (Мидленд), принял приглашение Сталла сотрудничать с ним в подготовке этой книги. Первоначальная задача состояла в подборе и оценке всех имеющихся данных и представлении их в виде таблиц, удобных для использования. В конце 1948 г. Сталл разработал специальный метод расчета термодинамических свойств на вычислительных машинах (опубли-

кован в «Chemical and Engineering News» 25 сентября 1950 г.). Этот метод затем был применен и усовершенствован в термической лаборатории компании «Доу» и использован при подготовке работы Сталла и Зипке «Термодинамические свойства элементов», опубликованной в 1956 г. в «Advances in Chemistry». В 1959 г. термической лаборатории «Доу» было поручено подготовить издание специальных термодинамических таблиц (JANAF Tables). К этому времени Сталл и Зипке закончили разработку метода расчета с использованием вычислительных машин для составления таблиц JANAF и таблиц, приведенных в этой книге. В мае 1961 г. Сталл пригласил Вестрама, работавшего в Мичиганском университете, для совместной работы над этой книгой, для завершения которой потребовалось более шести лет.

Книга Сталла, Вестрама и Зипке в значительно большей степени полезна для химиков-технологов, чем все аналогичные издания, опубликованные ранее. В этой книге ясно изложено, каким образом следует применять термодинамику при решении научно-исследовательских и производственных проблем. Можно надеяться, что она займет подобающее место как учебник и справочник в самых различных лабораториях мира.

Г. А. Скиннер

Председатель Комиссии по термодинамике и термохимии Международного Союза по чистой и прикладной химии

ИЗ ПРЕДИСЛОВИЯ АВТОРОВ

Классическая работа «Термодинамика и свободная энергия веществ», написанная в 1923 г. Льюисом и Ренделлом, по существу является первой полной математической формулировкой химической термодинамики. Поколения студентов изучали эту интересную книгу и убеждались в полезности приведенных там соотношений для решения технических проблем. Одной из двух значительных работ, опубликованных после 1923 г., было экспериментальное подтверждение третьего закона, выполненное Джиоком и его учениками. Другим исследованием явилась разработка методов статистической механики для расчета термодинамических свойств идеального газа на основании первого и второго законов термодинамики. Сейчас нет никаких сомнений в том, что величины свободных энергий, полученные из термических данных и статистических методов расчета, можно с уверенностью использовать для предсказания состояния равновесия в системах. Тем не менее широкое применение термодинамики в органической химии до настоящего времени тормозилось двумя факторами. Использование неточных литературных данных или непонимание ограничений, налагаемых термодинамикой, вело к тому, что некоторые термодинамические выводы не соответствовали экспериментальным результатам. Это в свою очередь вызывало определенное недоверие к тем общим выводам, которые были сделаны на основе термодинамики. Другой причиной, ограничивающей применение термодинамического подхода к проблемам органической химии, являлся недостаток доступных численных значений свободных энергий. Данные по химической термодинамике настолько рассеяны в научной литературе, что без сводных таблиц было крайне трудно работать термохимикам, занимающимся практическими расчетами. Наряду с этим выявилась скудность данных для органических соединений, что было впервые отмечено Парксом и Хаффманом еще в 1932 г. в их оригинальной монографии «Свободные энергии органических соединений». В этой очень полезной книге были полностью учтены оба отмеченных выше фактора.

Помимо книги Паркса и Хаффмана известно несколько попыток составления таблиц термодинамических и термохимических данных для органических соединений. Систематическую работу по определению и оценке термодинамических свойств углеводородов проводили

Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248], Россини с сотр. [1250] и Зволинский с сотр. [1653]. Рибо [1222] составил таблицы некоторых функций энергии Гиббса (с использованием шкалы Кельвина) для насыщенных углеводородов и других соединений. Вестрам и Мак-Каллох [1598] опубликовали обзор данных по термодинамике органических соединений в твердом состоянии; Скотт и Мак-Каллох [1316] составили таблицы термодинамических свойств газообразных серусодержащих органических веществ; Караш [744] привел данные по теплотам сгорания; Ауэр [52] опубликовал таблицы по энтальпиям сгорания, теплоемкостям и энтропиям органических и металлоорганических соединений при 25° С. Помимо этого, Чермин (ср. [223] и предыдущие ссылки) и Кобе [784] рассмотрели термодинамические свойства некоторых классов углеводородов и их производных. Следует, однако, отметить, что после вышедшей в 1932 г. книги Паркса и Хаффмана [1105] не публиковались большие обзорные работы или таблицы. Таблицы термодинамических величин для элементов приведены Сталлом и Зинке [1437], для металлов и сплавов — Халтгрином, Орром, Андерсоном и Келли [660] с соответствующими дополнениями под редакцией Халттрина, Орра и Келли [661], для неорганических веществ — Келли [736, 737], Келли и Кингом [738], Бишовским и Россини [125], Кофлином [278], Кубашевским и Эвансом [812] и Россини, Вагманом, Эвансом, Левином и Джаффе [1249] в виде справочника «Циркуляр 500», который был переработан Вагманом, Эвансом, Халоу, Паркером, Бейли и Шуммом и частично переиздан в виде специальных изданий (Technical Notes) [1560, 1561]. Ряд других таблиц для более или менее ограниченных групп неорганических соединений был составлен Вагманом и Эвансом [1559], Зволинским с сотр. [1654], Брюером, Бромли, Джиллесом и Лофгрином [167], Рибо [1222], Зейсе [1643], Маргрэйвом [930], Катцем и Маргрэйвом [726], Сталлом с сотр. [1435], Ауэром [52], Хилсепратом с сотр. [604], Глушко, Гурвичем, Хачкурузовым, Вейц и Медведевым [499, 500], Герасимовым, Крестовниковым и Шаховым [467—470] и Шиком [1282, 1283].

Научный и технический прогресс органической химии в значительной степени зависит от наших знаний основных свойств веществ, поэтому отсутствие единого подхода к термодинамике органических соединений тормозило развитие этой области. С целью в какой-то мере исправить такое положение и была написана эта книга. В 1940 г. научные сотрудники химической компании «Доу» пришли к выводу о необходимости количественных измерений термических свойств химических веществ. Созданная для этого лаборатория с успехом решала многие современные технические проблемы путем применения данных по энергиям Гиббса. Решение проблем, связанных с неуглеводородными органическими соединениями, требует непрерывных поисков необходимых литературных данных. Таким образом, появление настоящей книги было обусловлено запросами промышленно-

сти. Для химика-органика она представляет единственный и весьма исчерпывающий обзор термодинамических данных. Химики-органики, работающие в промышленности, и химики-технологи, не связанные с нефтехимией, совершенно недостаточно использовали термодинамические данные для решения возникающих перед ними задач. Однако сейчас ситуация, по-видимому, меняется, и многие химики-органики, работающие в промышленности, начинают искать энергетически наиболее благоприятные пути синтеза, поскольку такие процессы будут давать и максимальный экономический эффект. Более того, недалеко то время, когда инженер-технолог при осуществлении процесса будет учитывать не только материальный, но и энергетический баланс.

Авторами этой книги была просмотрена вся литература до 1 января 1966 г. Для 741 чистого органического вещества приведены таблицы значений теплоемкости, энтропии, энтальпии и энергии образования Гиббса для состояния идеального газа в интервале температур от 298 до 1000° К. Примерно для 4400 органических соединений по возможности наиболее полно приведены значения энтропий, энтальпий и энергий образования Гиббса для состояния идеального газа и конденсированного состояния при 298° К. Поскольку лишь некоторые органические вещества устойчивы выше 1000° К (727° С), таблицы были ограничены интервалом температур от 298,15 до 1000° К. В книге рассматриваются некоторые закономерности между термодинамическими свойствами углеводородов и других классов органических соединений, полезные при оценке термодинамических свойств соединений, не изученных экспериментально.

Предполагается, что читатели этой книги знакомы с основами термодинамики и математики. Тем не менее в первой части дан достаточно подробный теоретический обзор и обсуждаются методы расчета, помогающие исследователю использовать табличные данные. С помощью этой книги можно легко осуществить практические расчеты различных типов, и, как нам кажется, она может служить дополнительным пособием при изучении термодинамики. Несмотря на то что в книге обсуждаются некоторые важные теоретические вопросы, она едва ли может претендовать на глубокое и тонкое изложение теории термодинамики. Краткое описание калориметрических измерений знакомит органика-экспериментатора с методами определения термических величин — основного источника данных, приведенных в виде таблиц во второй и третьей частях. В гл. VI обсуждаются методы оценки термодинамических свойств, еще не определенных экспериментально, но необходимых для практических расчетов.

В последнее время химики-органики, занимающиеся теоретическими исследованиями, начали оценивать значительный вклад термодинамики в вопросы, связанные со структурной молекул, молекулярной свободой в кристаллах, устойчивостью органических молекул, энергией напряжения и разнообразными энергетическими ограниче-

пиями, возникающими в процессе превращений и перегруппировок в структурах. Данные, приведенные в этой книге, могут быть использованы и для таких целей. И наконец, следует отметить, что некоторые термические исследования посвящены термохимии соединений, пока не представляющих прямого интереса для промышленности, но, возможно, интересных в будущем.

Авторы надеются, что эта книга поможет заполнить те серьезные пробелы, которые существуют в настоящий момент в термодинамических данных для различных соединений, и будет стимулировать исследования по определению термических и термохимических свойств соединений, представляющих особый практический интерес.

Авторы старались сделать все, чтобы избежать ошибок, однако ввиду большого объема работы некоторые погрешности могли остаться незамеченными. Авторы будут благодарны читателям за все замечания о возможно допущенных ошибках.

Д. Сталл
Э. Вестрам
Г. Зинке

Часть 1

Основы термодинамики

Глава I

ПОНЯТИЯ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ

Введение

30458

Более века назад В. Томсон (лорд Кельвин), Ранкин, Клаузиус, Реньо и ряд других ученых установили взаимосвязь между теплотой и работой для тепловой машины и тем самым заложили основы термодинамики. Название этой науки происходит от двух греческих слов: *thermos* (теплый или горячий) и *dynamis* (действующая сила). Позднее Бертелло, Томсен и их современники применили понятие теплоты для характеристики химических реакций. Они ошибочно полагали, что теплоты различных химических реакций и превращений связаны с некоторой «разумной» теплотой, однозначно определяющей возможность протекания той или иной химической реакции. Понятие *термохимия* обычно связывали с этим «тепловым показателем» направления химической реакции. Гиббс, Вант-Гофф, Хорстман, Нерст, Планк и ряд других ученых установили связь между энтропией и теплотой реакции и ввели понятие энергии Гиббса, которое является реальной мерой химического сродства и реакционной способности. Применение значений энергии Гиббса и энтальпий реакций в решении химических проблем является предметом химической термодинамики. Эта область науки иногда подразделяется на учение о термических свойствах вещества, т. е. таких, которые по существу являются физическими и не связаны с протеканием химических реакций, и термохимию, которая, наоборот, имеет дело с теплотами химических реакций и превращений.

Химик обычно заинтересован в количественных аспектах тех изменений состояния вещества, которые сопровождаются выигрышем или потерей одной или нескольких форм энергии. Эти изменения могут быть как физическими, так и химическими или одновременно и теми и другими и могут протекать при большом разнообразии внешних условий. Термохимические принципы полезны для предсказания поведения реагирующих систем, стремящихся достичь более устойчивого состояния равновесия. Опираясь только на терми-

ческие и термохимические измерения, состояние равновесия таких систем можно рассчитать из минимального числа экспериментальных данных. Энергии Гиббса (или свободные энергии) являются мерой той «силы», которая определяет самопроизвольное протекание процессов или реакций в состоянии равновесия. Однако скорость приближения к состоянию равновесия зависит от ряда дополнительных факторов, таких, как кинетика и катализ. Химическая термодинамика описывает свойства равновесных систем и не может предсказать время, необходимое для полного протекания той или иной реакции или превращения. Для решения вопроса о направлении протекания различных химических реакций современному химику необходимо использовать знания как в области кинетики и катализа, так и в области химической термодинамики.

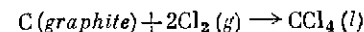
Основные определения

Термодинамика как наука включает четкое определение основных понятий и границ между ними. В типичном термодинамическом явлении рассматривают систему взаимодействующих (химически или каким-либо другим образом) тел и связанные с этими взаимодействиями изменения их свойств. Обычно удобно разделить рассматриваемую совокупность взаимодействующих тел на две части и обозначить одну из них *системой*, а другую — *внешней средой*. В таком случае система будет определяться как тело или некоторая группа тел (состоящих в свою очередь из множества частиц, например молекул, атомов или ионов), подвергающихся внешнему воздействию. Внешняя среда представляет собой другую группу тел, с которыми взаимодействует наша система в процессе рассмотрения. Если, например, реакция этерификации изучается в замкнутом сосуде, то реагирующую массу вещества в этом случае удобно рассматривать как систему, а реакционный сосуд и нагреватель — как внешнюю среду.

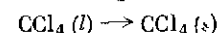
В каждом конкретном случае может быть некоторый произвол в выборе термодинамической системы. В связи с этим очень важен правильный выбор и точное определение самой системы. Так, например, при обсуждении калориметрического эксперимента не обязательно рассматривать калориметр как часть термодинамической системы, однако всегда необходимо отдавать себе отчет в том, является ли используемый калориметр частью системы или внешней средой. Система называется *гомогенной*, если она однородна по всему объему и состоит из одной фазы. Гетерогенная система содержит несколько фаз, отделенных одна от другой видимыми поверхностями раздела. Физические свойства системы, пропорциональные массе, например такие, как объем и теплоемкость, называются *экстенсивными* свойствами системы. Физические свойства системы, не зависящие от массы и характеризующие вещество, такие, как

плотность и температура, называются *интенсивными* свойствами системы. Совокупность экстенсивных и интенсивных свойств определяет состояние системы. В начале превращения система находится в некотором заданном состоянии, называемом *исходным*; после превращения система переходит в некоторое новое состояние, для данной системы являющееся конечным.

Химическое превращение вещества называется *реакцией*, физическое превращение — *процессом*. Во избежание двоякого толкования используется система обозначений, предложенная Льюисом и Ренделлом [861]. Согласно этой системе, каждая реакция или процесс сопровождается подробным описанием изменения агрегатного состояния участвующих в них веществ. Например, реакция



описывает взаимодействие 1 моля углерода (графита) с 2 молями газообразного хлора с образованием 1 моля жидкого четыреххлористого углерода, в то время как процесс



отвечает переходу 1 моля жидкого четыреххлористого углерода в твердый или кристаллический четыреххлористый углерод в процессе кристаллизации.

Обычно говорят, что химическая или физическая термодинамическая система находится в состоянии *равновесия*, когда ее состав и свойства не претерпевают видимых изменений при постоянных внешних условиях в течение неограниченного времени. С макроскопической точки зрения это означает, что система находится в состоянии покоя или устойчивого равновесия, хотя с микроскопической точки зрения в такой системе существует некоторое динамическое равновесие, отвечающее равенству скоростей прямой и обратной реакций или процессов. Любая система, не находящаяся в состоянии равновесия, должна непрерывно переходить в это состояние с большей или меньшей скоростью. Если скорость приближения к состоянию равновесия настолько мала, что за доступный для эксперимента промежуток времени практически невозможно заметить какое-либо изменение в состоянии системы, то обычно говорят, что система находится в состоянии метастабильного равновесия. Добавление в систему подходящего катализатора должно привести к более быстрому достижению истинного равновесия. Так, ряд простых органических соединений, например нитроглицерин или бензол, в реальных условиях являются термодинамически неустойчивыми соединениями. Смесь водорода и кислорода в отсутствие катализаторов (фольги, приготовленной из сплава на основе палладия) или электрической искры также самопроизвольно не реагирует при комнатной температуре с образованием более устойчивого продукта — воды. Анализ таких реакций и процессов не представляет

особого труда в том случае, если известно, какие из реакций протекают с измеримой скоростью (и в связи с этим являются предметом термодинамического рассмотрения), а какие оказываются существенно «заторможенными» исходя из кинетических соображений.

Д а в л е н и е — это интенсивное свойство системы; размерность его — сила на единицу площади. В настоящей монографии давление выражается в единицах стандартной атмосферы, равной $1\,013\,250 \text{ дин}\cdot\text{см}^{-2}$, или 760 мм рт. ст. при 0°C и стандартном ускорении $980,665 \text{ см}\cdot\text{сек}^{-2}$.

Объем является экстенсивным свойством системы и имеет размерность длины в третьей степени. В настоящей монографии за стандартный мольный объем принят объем 1 моля идеального газа, равный $22\,414,6 \text{ см}^3$ и содержащий $6,02308\cdot 10^{23}$ молекул при общем давлении 1 атм и температуре затвердевания льда ($273,15^\circ\text{K}$).

Т е м п е р а т у р а — интенсивное свойство системы, являющееся основным понятием термодинамики. Слово «температура» состоит из двух частей: латинского глагола *temperare* (смягчать), обозначающего перевод чего-либо в более удобное, выгодное состояние путем смешивания с чем-либо еще, и суффикса *-ure*, выражающего результат действия, указанного глаголом. Это понятие обычно связывают с теплотой и холодом. Количественное определение температуры основано на измерении эффекта теплового воздействия на некоторую систему. Цельсий разработал шкалу температур на 100 одинаковых градусов, основанную на изменении объема жидкости в интервале температур между точкой замерзания воды (0°C) и точкой ее кипения (100°C).

Изучая свойства газов, Р. Бойль установил, что газ, обладающий объемом V и находящийся под давлением P , при постоянной температуре подчиняется соотношению

$$PV = \text{const} \quad \text{или} \quad P_2V_2 = P_1V_1, \quad (I.1)$$

где индексы 1 и 2 указывают на два различных состояния.

Дж. Чарльз показал, что объем газа при постоянном давлении увеличивается прямо пропорционально температуре

$$V_t = V_0(1 + \alpha t), \quad (I.2)$$

где V_0 и V_t — объемы газа при 0°C и $t^\circ\text{C}$, а α — постоянная величина. Подстановка в это выражение экспериментальных данных приводит к значению α , примерно равному $1/273$. Тогда выражение (I.2) принимает вид

$$\frac{V_t}{V_0} = \frac{273+t}{273}. \quad (I.3)$$

В. Томсон (лорд Кельвин) предложил для простоты использовать новую шкалу температур с тем же значением градуса, как и шкала Цельсия, но имеющую нуль шкалы при температу-

ре -273°C *. В таком случае выражение (I.3) можно записать

$$\frac{V_T}{V_0} = \frac{T}{273} \quad \text{или} \quad \frac{V_2}{V_1} = \frac{T_2}{T_1}, \quad (I.4)$$

где T — абсолютная температура, или температура по Кельвину ($^\circ\text{K}$).

Комбинируя соотношения (I.1) и (I.4) для газов, подчиняющихся правилам Бойля и Чарльза, нетрудно получить уравнение их состояния

$$PV = rT,$$

где величина $P_0V_0/273 = r$ представляет собой удельную газовую постоянную, характерную для каждого газа.

Реальные газы только приближенно подчиняются этому уравнению. Однако при уменьшении давления индивидуальные особенности поведения молекул разных газов становятся менее отчетливыми, и при бесконечном разбавлении (чисто гипотетическое состояние) все газы подчиняются закону идеальных газов, описываемому уравнением

$$PV = RT, \quad (I.5)$$

где R — универсальная газовая постоянная, отнесенная к молекулярному весу (или молю) газа. Величина T пропорциональна произведению PV идеального газа и, как можно показать, совпадает с термодинамической шкалой температур, обычно известной под названием шкалы Кельвина.

Состояние идеального газа — это некоторое гипотетическое состояние, достигаемое для реального газа только при малых давлениях. Поскольку эксперименты с газами при низком давлении в значительной степени затруднены, по международному соглашению была принята более удобная шкала температур. В 1948 г. на девятой Генеральной конференции по мерам и весам [1423] была достигнута договоренность об определении и использовании международной шкалы температур 1948 г. в градусах Цельсия ($^\circ\text{C}$), записываемых символом t . Эта международная шкала температур 1948 г. является практической, рабочей шкалой и разделена на две части. В интервале от $-182,970^\circ\text{C}$ (точка кипения кислорода) до $630,5^\circ\text{C}$ (точка плавления сурьмы) температура определяется с помощью специального платинового термометра сопротивления по формуле

$$\mathcal{R}_t = \mathcal{R}_0 [1 + At + Bt^2 + C(t-100)t^3],$$

где \mathcal{R} — сопротивление платинового термометра при температуре плавления льда, а A, B, C — константы, вычисляемые из реперных

* Предложенная Томсоном термодинамическая шкала температур не зависит от вида термометрического вещества и основана на использовании к.п.д. цикла Карно как величины, являющейся функцией только температуры. — *Прим. перев.*

Таблица I.1

Фундаментальные и основные реперные значения температур некоторых фазовых переходов при общем давлении 1 атм

Температура фазового перехода	Температура, °С
(а) Температура равновесия жидкого кислорода с его насыщенным паром (точка кипения кислорода)	-182,970
(б) Температура равновесия льда с жидкой водой и ее насыщенным паром (точка плавления льда) (фундаментальная реперная точка)	0,000
(в) Температура равновесия жидкой воды с ее насыщенным паром (точка кипения воды) (фундаментальная реперная точка)	100,000
(г) Температура равновесия жидкой серы с ее насыщенным паром (точка кипения серы)	444,600 ^{а)}
(д) Температура равновесия твердой и жидкой сурьмы (точка плавления сурьмы)	630,5
(е) Температура равновесия твердого и жидкого серебра (точка плавления серебра)	960,8
(ж) Температура равновесия твердого и жидкого золота (точка плавления золота)	1063,0

^{а)} Вместе точки кипения серы часто рекомендуется также точка плавления цинка (419,505°С). Ряд точек фазовых переходов других веществ также используется в качестве вспомогательных реперных точек. — Прим. перев.

точек (в), (г) и (а) соответственно (табл. I.1). Последний член этого уравнения необходимо учитывать только в интервале температур между точкой кипения кислорода и точкой плавления льда.

В интервале температур от 630,5 до 1063,0°С шкала определяется формулой

$$E = a + bt + ct^2,$$

где E — электродвижущая сила стандартной термопары, изготовленной из платины и платино-родиевого сплава, один спай которой находится при точке плавления льда, а другой — при измеряемой температуре t . Коэффициенты a , b и c обычно определяются путем измерения E при точке плавления сурьмы, серебра и золота. Поскольку международная шкала температур и шкала Кельвина основаны

на различных определениях, они не идентичны. Так, при 200°К шкала Кельвина примерно на 0,04°, а при 660°К примерно на 0,15° выше международной шкалы температур.

Еще в 1854 г. Томсоном было отмечено, что если значение точки плавления льда известно с достаточной точностью, то с теоретической точки зрения предпочтительнее определять шкалу температур с помощью абсолютного значения точки плавления льда, чем путем отнесения 100° к разнице между значениями точки плавления льда и точки кипения воды. В 1954 г. десятая Генеральная конференция по мерам и весам [1424] пересмотрела определение шкалы температур по Кельвину, приписав значение 273,16°К тройной точке воды; в этом случае точка плавления льда соответствует 273,15°К. Для практических целей пересчет между двумя шкалами температур выражается формулой *

$$T (^{\circ}\text{K}) = t (^{\circ}\text{C}) + 273,15^{\circ}.$$

Уравнение состояния

Химическая термодинамика позволяет полностью описать состояние системы с помощью четырех наблюдаемых параметров состояния — состава, давления, температуры и объема (при условии, если отсутствуют другие независимые переменные, такие, как гравитационное, магнитное и электрическое поля). Из этих четырех параметров первые три являются интенсивными свойствами системы. В случае чистого гомогенного вещества его состав постоянен. Три остальных параметра взаимосвязаны, поэтому для описания состояния системы необходимо определить только два из них. Например, давление является некоторой функцией температуры и объема:

$$P = f(T, V).$$

Это значит, что при различных значениях T и V величину P можно определить из математического соотношения, называемого уравнением состояния. Для n молей идеального газа уравнение состояния (I.5) принимает вид

$$PV = nRT. \quad (\text{I.5}')$$

Измеряя произведения PV для нескольких реальных газов при различных давлениях и температуре плавления льда и экстраполируя произведение PV к нулевому давлению, получим

$$(PV)_{P=0} = 22\,414,6 \text{ см}^3 \cdot \text{атм} / \text{моль}.$$

* Для более подробного знакомства с вопросами, связанными с понятием температуры и ее измерением, см.: М. М. Попов, Термометрия и калориметрия. Изд-во МГУ, М., 1954; С. М. Скуратов, В. П. Колесов, А. Ф. Воробьев, Термохимия, ч. I, Изд-во МГУ, М., 1964. — Прим. перев.

Подставляя предельное значение PV в уравнение состояния идеального газа (1.5), находим

$$\frac{22\,414,6}{273,15} = R = 82,05967 \text{ см}^3 \cdot \text{атм}/(\text{моль} \cdot ^\circ\text{К}).$$

Так как 1 атм равна $1\,013\,250 \text{ дин} \cdot \text{см}^{-2}$,

$$R = 83,1469 \cdot 10^6 \text{ эрг}/(\text{моль} \cdot ^\circ\text{К}).$$

Согласно [1424], величина термохимической калории принята равной $4,1840 \cdot 10^7 \text{ эрг}$, откуда следует

$$R = 1,98726 \text{ кал}/(\text{моль} \cdot ^\circ\text{К}).$$

В первом приближении многие реальные газы при давлениях, меньших и равных 1 атм, можно рассматривать как идеальные, поэтому уравнения (1.5) и (1.5') можно использовать для оценки поведения реальных газов. Уравнение состояния, используемое при точных расчетах и давлениях выше 1 атм, имеет более сложный вид. Экспериментальные данные по сжимаемости газа можно описать с помощью эмпирических уравнений как некоторую функцию объема или давления сжимаемого газа, например:

$$PV = A_V + \frac{B_V}{V} + \frac{C_V}{V^2} + \frac{D_V}{V^4} + \frac{E_V}{V^6} + \dots,$$

или

$$PV = A_P + B_P P + C_P P^2 + D_P P^4 + E_P P^6 + \dots,$$

где A_V, B_V, C_V, D_V, E_V и соответственно A_P, B_P, C_P, D_P и E_P являются первыми, вторыми, третьими, четвертыми и т. д. в ири-альными коэффициентами соответствующих уравнений. Эти коэффициенты зависят от температуры и с помощью весьма сложных соотношений, полученных рядом авторов, могут быть выражены через объем, давление и температуру в уравнениях состояния реальных газов*.

В термодинамических исследованиях достаточно широко применяется эмпирическое уравнение состояния

$$PV = nRT \left[1 + \frac{9}{128} \frac{PTc}{PcT} \left(1 - 6 \frac{1Tc^2}{T^2} \right) \right],$$

впервые предложенное Д. Бертло [120]. Для использования уравнения Бертло, представленного в таком виде, необходимы только значения критической температуры и давления. Это уравнение позволяет достаточно точно рассчитать свойства неассоциированных веществ при комнатной температуре и умеренных давлениях**.

* Подробнее об этом см.: Э. А. Мелвилл-Хьюз, Физическая химия. т. 2. ИЛ, М., 1962.— *Прим. перев.*

** Это уравнение часто применяют для определения стандартных энтропий по третьему закону термодинамики.— *Прим. перев.*

Более общий подход к решению этой проблемы был предложен Лидерсеном, Гринкорном и Нугеном [894]. Он заключается в использовании фактора сжимаемости Z , определяемого из данных по коэффициенту летучести, приведенной температуре ($Tr = T/Tc$) и приведенному давлению ($Pr = P/Pc$) (см. рис. V.7). Уравнение состояния такого типа имеет вид

$$PV = nZRT.$$

Энергия, работа и теплота

Обычно говорят, что система обладает энергией, если она способна совершить некоторую работу. Эйнштейн показал, что полная энергия системы связана с ее массой. Однако в системах, рассматриваемых в настоящей книге, изменения энергии эквивалентны фактически ненаблюдаемым изменениям массы. Величина полной энергии системы неизвестна; экспериментально можно определить только ее изменение, связанное с переходом системы из некоторого начального в некоторое конечное состояние. Энергия, которой обладает система в зависимости от ее положения в пространстве, состава или других параметров (например, энергия поднятого груза, энергия эндотермического соединения или сжатого газа), называется потенциалной энергией. Потенциальная энергия является производением силы на расстояние. Энергия, связанная с движением системы, называется кинетической энергией. Кинетическая энергия равна произведению половины массы на квадрат скорости системы. Сила, сообщающая 1 г вещества скорость 1 см/сек, называется дин. Работа, совершаемая силой в 1 дину на пути 1 см, называется эргом. 1 Дж равен 10^7 эрг или 1 вт·сек.

Существует большое разнообразие форм энергии: механическая, электрическая, химическая, гравитационная, центробежная и магнитная. Распределение энергии системы между этими формами изменяется в зависимости от условий, налагаемых на систему. При изменении условий изменяется и количество энергии данного вида. Однако для любого мыслимого процесса сумма изменений энергии системы равна нулю. Другими словами, энергия системы не создается из ничего и не исчезает, а остается постоянной при всех процессах и явлениях. Формулировку этого основного закона природы можно записать так:

$$\sum dE = 0.$$

Этот закон, обоснованный человеческим опытом, является основой первого закона термодинамики.

Если система расширяется на объем ΔV , преодолевая при этом давление внешней среды P , то работу W , совершенную системой, можно записать в виде

$$W = P\Delta V.$$

Если внешнее давление изменяется от некоторого первоначального давления P_1 до некоторого конечного P_2 , то работа расширения будет равна

$$W = \int_1^2 P dV. \quad (I.6)$$

Обычно работе, совершаемой системой против внешних сил, приписывают положительный знак.

В 1789 г. Б. Томпсон (граф Румфорд), наблюдая процесс сверления пушек в мюнхенском арсенале, отметил факт превращения механической энергии в тепловую. С помощью экспериментов он установил, что количество выделяющейся теплоты пропорционально количеству затраченной энергии. На основании своих экспериментов Томпсон пришел к выводу, что теплота является видом движения: при исчезновении движения вместо него появляется эквивалентное количество теплоты. Томпсон попытался взвесить теплоту, но все попытки обнаружить какое-либо влияние теплоты на вес тел были безрезультатными. В 1840 г. Дж. П. Джоуль, исследуя превращение механической энергии в теплоту, определил эквивалентное отношение между этими двумя величинами при их взаимных переходах.

Если система изолирована, то ее температура может отличаться от температуры окружающей среды. При нарушении изоляции системы тепло переходит от более нагретой окружающей среды к системе или наоборот, до выравнивания температур. Энергия, передаваемая системе благодаря разнице температур, называется *теплотой*, а изменение температуры системы в таком случае является мерой количества перешедшей теплоты. Однако система может обмениваться теплом с окружающей средой и без изменения температуры системы, например при химическом или физическом превращении. Так, бензол будет плавиться и поглощать тепло при постоянной температуре, равной его точке плавления $278,69^\circ \text{K}$. Химическая реакция также может протекать при постоянной температуре, причем тепло, выделяющееся или поглощающееся в процессе этой реакции, передается или заимствуется из окружающей среды.

Авторы настоящей монографии придерживаются принятого в США правила знаков, согласно которому энергии, передаваемой системой окружающей среде, приписывается отрицательный знак. Несмотря на то что Клаузиус принял такую систему обозначений еще в 1850 г., многие европейские термохимики придерживаются другой системы обозначений и приписывают энергии, выделяющейся из системы, положительный знак. Этот факт необходимо учитывать при анализе опубликованных термохимических данных.

Согласно определению, количество энергии системы связано с ее массой и температурой. Первые термохимики определяли количество тепла, измеряя повышение температуры жидкости, поглощаю-

дей это тепло. Использование воды в качестве калориметрической жидкости привело к первому определению калории как количества тепла, необходимого для повышения температуры 1 г воды на 1°C . Последующие исследования показали, что величина калории зависит от температуры, при которой проводятся измерения. Современная калориметрия основывается на сравнении подъема температуры за счет химической реакции с измеренным количеством электрической работы, т. е. произведением измеренного количества электрического тока на измеренный промежуток времени.

Термодинамические основы современной термохимии прекрасно изложены в работе Макгласена [976]. Девятая Генеральная конференция по мерам и весам (1948 г.) [1423] приняла в качестве основной единицы энергии абсолютный джоуль (10^7 эрг). В этом случае 1 кал равняется 4,1840 абсолютных джоулей. Один абсолютный джоуль определяется как энергия, выделяющаяся при прохождении электрического тока в один абсолютный ампер через сопротивление в один абсолютный ом за одну солнечную секунду. (Согласно закону Ома, один абсолютный джоуль равен потенциалу в один абсолютный вольт на участке сопротивления в один абсолютный ом.)

Для систем, состоящих из органических веществ, изменение энергии ΔE в процессе превращения из состояния 1 в состояние 2 может быть выражено как сумма теплоты Q и работы W . При этом предполагается, что другими факторами, такими, как поверхностная энергия и влияние магнитного и гравитационного полей, можно пренебречь. Таким образом, первый закон можно сформулировать следующим образом:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = Q - W. \quad (I.7)$$

Энтальпия

Согласно уравнению (I.6), для процесса, протекающего при постоянном давлении, выражение для работы можно записать так:

$$P(V_2 - V_1) = PV_2 - PV_1.$$

Следовательно,

$$Q = E_2 - E_1 + (PV_2 - PV_1) = (E_2 + PV_2) - (E_1 + PV_1). \quad (I.8)$$

Для удобства вводят новую функцию H , называемую энтальпией

$$H = E + PV. \quad (I.9)$$

Тогда уравнение (I.8) можно заменить выражением

$$Q = H_2 - H_1 = \Delta H. \quad (I.10)$$

Величину ΔH в выражении (I.10), которую часто ошибочно отождествляли с теплотой реакции, правильнее называть *изменением энтальпии* соответствующего процесса или реакции.

Из выражения (I.8) следует, что чисто химический процесс, протекающий при постоянном объеме (работа расширения равна нулю), характеризуется теплотой Q , являющейся точной мерой изменения энергии ΔE . Из уравнения (I.10) следует, что значение Q для процесса или реакции, протекающих при постоянном давлении, равно изменению энтальпии ΔH .

Стандартные состояния

Абсолютное значение энтальпии или энергии вещества измерить нельзя, однако можно определить разность в энтальпии для двух температур, например

$$H_{298} - H_0 = \int_0^{298} dH = \Delta H|_0^{298}, \quad (\text{I.11})$$

и вычислить значение этого интеграла. В этом выражении величина H_0 остается неопределенной. Следует отметить, что хотя значения энергии и энтальпии при абсолютном нуле применяются в ряде расчетов, тем не менее они не представляют большой ценности для термохимии. В связи с этим необходимо ввести некоторый нулевой уровень энтальпии, относительно которого можно было бы проводить практические расчеты. Для многих веществ отсутствуют значения теплоемкостей для температур ниже комнатной, поэтому для нулевого уровня энергии удобнее выбрать температуру $298,15^\circ \text{K}$. При обозначении температур, связанных с тем или иным состоянием, используются цифровые индексы типа тех, которые приведены в выражении (I.11).

Для однозначного термодинамического рассмотрения процессов или реакций необходимо полностью описать состояние каждого вещества. Под стандартным состоянием вещества подразумевают некоторое определенное его состояние, выбранное из тех или иных физико-химических соображений для решения конкретной термодинамической задачи. Все остальные состояния обычно сравнивают со стандартным. Для элементарных веществ в качестве стандартного состояния выбирается конденсированное состояние до тех температур, при которых давление пара вещества достигает 1 атм , выше этих температур в качестве стандартного состояния выбирается состояние идеального газа. Стандартные состояния элементов приведены в гл. VIII. В литературе отсутствуют данные по энтальпиям для многих органических веществ в жидком состоянии. Для газообразного состояния эти величины известны чаще. Учитывая этот факт, а также то, что давления паров органических соединений достигают атмосферного при температурах порядка 500°K и ниже, в качестве стандартного состояния большинства органических соединений удобнее выбрать состояние идеального

газа. В тех случаях, когда соединение (например, сахар) разлагается при низких давлениях, в качестве стандартного используется конденсированное состояние. С учетом этих исключений в данной книге в качестве стандартного состояния органического вещества выбрано состояние идеального газа при общем давлении 1 атм . Стандартное состояние вещества обозначается надстрочным индексом $^\circ$.

Давление пара

Давлением пара называется такое давление, которое устанавливается в системе, состоящей из газообразной и конденсированной фаз, находящихся в динамическом равновесии. Конденсированная фаза может быть твердой или жидкой (или и той и другой в тройной точке). Свойства газообразной фазы в значительной степени характеризуют поведение всей системы, поэтому они являлись объектом большого числа исследований. Обзор некоторых из много численных методов измерения давления пара был опубликован Партингтоном [1124]. Необходимо подчеркнуть, что для получения надежных данных по давлению пара следует уделять особое внимание деталям эксперимента. Экспериментальные данные по давлению паров большого числа органических веществ были проанализированы Сталлом [1432], в результате чего им были рекомендованы значения температур рассмотренных веществ для целого ряда давлений.

Если в системе присутствует конденсированная фаза, то уравнение состояния принимает более сложный вид по сравнению с уравнением состояния для простой газообразной системы. Это уравнение ограничивается кривой насыщения и имеет предел в критической точке. Обзор уравнений, охватывающих данные по давлению пара, был дан Томсоном [1496]. Поскольку давление пара связано с энтальпией процесса, представляет интерес рассмотреть методы интерполяции экспериментальных данных по давлению паров. Среди многочисленных математических выражений, связывающих температуру и давление газовой фазы, находящейся в равновесии с твердой, наиболее удачным следует признать уравнение, впервые предложенное Антуаном [24]

$$\lg P = A - \frac{B}{t + C}, \quad (\text{I.12})$$

где P — давление, t — температура в градусах Цельсия, а A , B и C — константы. Экспериментальные и вычисленные величины давления пара часто приводятся при случайных температурах; в таких случаях константы вычисляют методом наименьших квадратов, как это описано Томсоном [1496]. Часто имеющихся данных недостаточно для использования этого метода, тогда оценивают константу C , а значения A и B вычисляют методом наименьших квадратов.

Поскольку уравнение Антуана нелинейно, такой расчет сложен для выполнения его на арифмометре. В таких случаях вполне удовлетворительные результаты дает метод расчета по «трем точкам».

Согласно этому методу, для составления системы трех уравнений и их решения относительно A , B и C из экспериментальных данных выбирают три надежные величины давления пара, полученные для температур, значительно отличающихся друг от друга. Задача значительно упрощается, если величины давлений заменить их логарифмами, а переменные представить в виде

$$t_1, y_1, \quad t_2, y_2, \quad t_3, y_3, \quad (I.13)$$

где $y_i = \log P_i$. В таком случае константу C можно получить прямой подстановкой переменных в уравнение

$$\left(\frac{y_3 - y_2}{y_2 - y_1}\right) \left(\frac{t_2 - t_1}{t_3 - t_2}\right) = 1 - \left(\frac{t_3 - t_1}{t_3 + C}\right). \quad (I.14)$$

Константу B определяют из следующего выражения:

$$B = \left(\frac{y_3 - y_1}{t_3 - t_1}\right) (t_1 + C) (t_3 + C), \quad (I.15)$$

а константу A — из уравнения

$$A = y_2 + \frac{B}{t_2 + C}. \quad (I.16)$$

Пеннингтон, Скотт, Фянке, Мак-Каллох, Мессерли, Хоссенлоп и Уаддингтон [1136] измерили давление пара I -пропантиола в интервале температур от 24 до 102° С. Используя данные для давления пара при трех температурах (табл. I.2) и уравнения (I.14) —

Таблица I.2

	$t, ^\circ\text{C}$	$P, \text{ мм}$	$y = \lg P$
1	24,28	149,41	2,17438
2	62,14	633,99	2,80208
3	102,09	2026,0	3,30664

(I.16), нетрудно рассчитать константы в уравнении Антуана:

$$\left(\frac{3,30664 - 2,80208}{2,80208 - 2,17438}\right) \left(\frac{62,14 - 24,28}{102,09 - 62,14}\right) = 1 - \left(\frac{102,09 - 24,28}{102,09 + C}\right),$$

откуда $C = 223,48$.

$$B = \left(\frac{3,30664 - 2,17438}{102,09 - 24,28}\right) (24,28 + 223,48) (102,09 + 223,48) = 1173,81.$$

$$A = 2,80208 + \frac{1173,81}{62,14 + 223,48} = 6,91177.$$

Для расчета нормальной точки кипения преобразуем уравнение (I.12):

$$t = \left(\frac{B}{A - \lg P}\right) - C.$$

Тогда для давления, равного 760 мм рт. ст., получим

$$t = \left(\frac{1173,81}{6,91177 - 2,88081}\right) - 223,48 = 67,72^\circ \text{C}.$$

Экспериментально найденная температура кипения при нормальных условиях равна 67,719° С.

ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ЭНТАЛЬПИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

Теплоемкость

Если нагреть 1 моль вещества от температуры T_1 до температуры T_2 , сообщив ему количество тепла Q , то средняя теплоемкость \bar{C} в этом интервале температур будет определяться выражением

$$\bar{C} = \frac{Q}{T_2 - T_1} = \frac{Q}{\Delta T}.$$

Истинной теплоемкостью C вещества при температуре T называют теплоемкость, соответствующую бесконечно малому изменению температуры:

$$\lim_{\Delta T \rightarrow 0} \frac{Q}{\Delta T} = \frac{\delta Q}{dT} = C.$$

Если изучаемый процесс протекает при постоянном объеме, то работа расширения будет равна нулю; в таком случае бесконечно малому количеству теплоты δQ будет соответствовать бесконечно малое изменение внутренней энергии dE

$$\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = C_V, \quad (\text{II.1})$$

где C_V — теплоемкость при постоянном объеме.

Если система поглощает тепло при постоянном давлении, то повышение температуры приводит к изменению объема; при этом совершается некоторая работа расширения PV . Согласно первому закону,

$$\delta Q = dE + P dV,$$

откуда для теплоемкости при постоянном давлении получаем

$$\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_P + P \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = C_P. \quad (\text{II.2})$$

Учитывая, что при постоянном давлении

$$P \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = \left(\frac{\partial (PV)}{\partial T}\right)_P,$$

из выражения (II.2) получаем

$$\left(\frac{\partial (E + PV)}{\partial T}\right)_P = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P = C_P, \quad (\text{II.3})$$

где C_P — теплоемкость при постоянном давлении. Разность величин C_P и C_V можно получить, вычитая уравнение (II.1) из уравнения (II.3):

$$C_P - C_V = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P - \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = \left[\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_P + \left(\frac{\partial (PV)}{\partial T}\right)_P\right] - \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V.$$

Поскольку

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_P &= \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V + \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P, \\ C_P - C_V &= \left[P + \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T\right] \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P. \end{aligned} \quad (\text{II.4})$$

Для идеального газа

$$\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T = 0 \quad \text{и} \quad \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = \frac{R}{P},$$

откуда

$$C_P - C_V = R. \quad (\text{II.5})$$

В теоретических расчетах, как правило, используют значения C_V , поскольку теория теплоемкости конденсированных веществ базируется на понятии внутренней энергии системы. Экспериментальное же определение теплоемкостью обычно проводят при условии, отвечающем постоянству давления в системе, т. е. измеряют теплоемкость C_P . С практической точки зрения использование теплоемкостью при постоянном давлении обусловлено еще и тем, что большинство химических процессов и реакций чаще проводится при постоянном давлении, чем при постоянном объеме.

Теплоемкость, отнесенная к единице массы вещества, называется его удельной теплоемкостью и обозначается через c , например $C_P/M = c_P$, где M — молекулярный вес вещества.

Обычно величина теплоемкости определяется экспериментально, однако в ряде случаев для оценки термических свойств органических веществ с успехом можно использовать теоретические методы расчета. В связи с этим в следующих разделах книги обсуждаются некоторые экспериментальные и теоретические методы определения теплоемкостей.

Экспериментальное определение теплоемкостей конденсированных фаз при низких температурах

Несмотря на то что отдельные попытки измерения теплоемкостей при низких температурах предпринимались уже более полувека назад, начало систематического исследования теплоемкостей веществ при низких температурах было положено в работах Нернста с сотрудниками [1055], создавших в 1910 г. первый удачный низкотемпературный вакуумный калориметр. Начиная с этого времени в технике низкотемпературного эксперимента произошли значительные улуч-

шения. Примером современных прецизионных калориметров, у которых ранепство температур адиабатической оболочки и самого калориметра поддерживается или вручную, или автоматически, является адиабатический низкотемпературный калориметр, сконструированный Вестрамом [1594]. Поскольку низкотемпературные значения

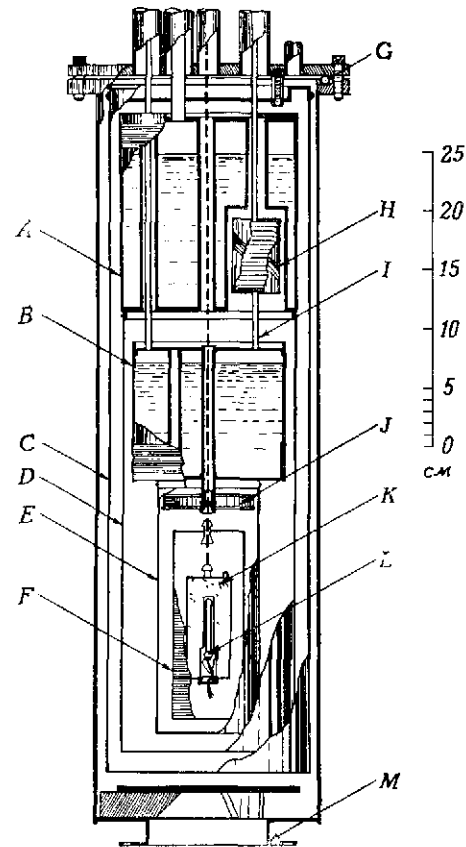


Рис. II.1. Схематический разрез калориметрической установки для определения теплоемкостей при низких температурах (Mark II) (по Вестраму [1594]).

A — резервуар для жидкого азота; B — резервуар для жидкого гелия; C, D, E — тепловые экраны; F — адиабатическая оболочка; G — герметизирующая медная прокладка, с помощью которой рубашка вакуумноплотно соединяется с крышкой; H — резервуар для испаряющегося жидкого гелия («экономайзер»); I — трубка для вывода гелия; J — кольцо для регулирования температуры подводных проводов; K — калориметр; L — платиновый термометр сопротивления; M — место крепления высоковакуумного диффузионного насоса.

теплоемкостей многих органических соединений определяли на калориметре такого типа, целесообразно рассмотреть его устройство более подробно. Этот калориметр представляет собой усовершенствованный вариант калориметра Руервейна и Хаффмана [1264], являющийся прототипом калориметра Черныста [1054].

Калориметрическая установка схематически представлена на рис. II.1. В качестве охлаждающих ванн используются медные хромированные резервуары для жидкого азота (A) и жидкого гелия (B). Тонкостенные медные хромированные тепловые экраны C, D и E слу-

жат не только для предохранения хладагентов от быстрого испарения, но и для создания тепловых зон со все более низкой постоянной температурой, обеспечивающих тепловую изоляцию калориметра от влияния внешней среды. Для определения теплоемкостей при температурах выше 90° K в качестве хладагента в обоих резервуарах используется жидкий азот; температуры вблизи 50° K достигаются превращением жидкого азота в твердое состояние при откачке его в процессе испарения из резервуара B при пониженном давлении. Для измерения теплоемкостей в интервале температур 4—50° K в качестве хладагента в резервуаре B используют жидкий гелий. Температуры, близкие к 1° K, можно получить путем испарения жидкого гелия в вакуум. Небольшие изменения в конструкции калориметра позволяют использовать его до температур порядка 600° K. Тонкостенные трубки из нержавеющей стали, соединенные с резервуарами, служат для их заполнения, вывода газов и вакуумирования системы, а также являются основой для крепления всех деталей калориметра. С помощью болтов и прокладки круглого сечения (G) крышка калориметра вакуумноплотно соединяется с внешней вакуумной камерой, изготовленной из латуни. Вакуумирование установки осуществляется форвакуумным и высокопроизводительным масляным насосами, последовательно присоединенными к фланцу M.

Калориметр окружен адиабатической оболочкой F, изготовленной из тонкой листовой хромированной меди. По всей внешней поверхности крышки, цилиндрической части и дна оболочки расположены бифилярные константановые проволочные нагреватели. Неглубокая винтовая 50-сантиметровая нарезка на адиабатической оболочке калориметра позволяет поддерживать тепловое равновесие между пакетом токоподводящих проводов и обмоткой калориметра, навитой на его внешнюю поверхность. Все провода выводятся наружу и присоединяются с помощью специальной эмали к резервуару с азотом, «экономайзеру» H (служащему теплообменником и использующему теплоемкость холодного испарившегося гелия для поглощения тепла, передаваемого проводами, и таким образом уменьшающему расход жидкого гелия), к резервуару с гелием и к кольцу J, обеспечивающему выравнивание температуры подводных проводов. С помощью адиабатической оболочки, температура которой с точностью $\pm 0,002^\circ$ K соответствует температуре калориметра, температура проводов поддерживается равной температуре калориметра. Медно-константановые термопары контролируют разность температур между калориметром и оболочкой и между оболочкой и кольцом и возбуждают три независимые регистрирующие электронные цепи (соответствующие трем частям адиабатической оболочки), снабженные малоинерционной системой прямого и обратного контроля условий адиабатичности калориметра. Контроль и управление адиабатической оболочкой можно также осуществлять вручную.

Рассмотренная калориметрическая установка позволяет в процессе опыта нагревать образец вещества в калориметре до любой желаемой температуры при отсутствии теплового обмена с окружающей средой за счет регулируемой подачи тепла от электрического нагревателя. Калориметр с исследуемым образцом подвешивается на плетеной шелковой нити внутри адиабатической оболочки. С помощью тщательно подогнанных конусов калориметр и адиабатическая оболочка могут соприкасаться с охлаждающим резервуаром и, таким образом, охлаждаться до требуемой температуры, после чего могут быть вновь возвращены в исходное положение. Такая система охлаждения калориметра не требует газа-носителя и позволяет по желанию циклически изменять температуру образца вблизи области перехода для получения чередующихся кривых охлаждения и нагрева.

Калориметр *K* состоит из контейнера для образца, обычно изготовленного из меди и покрытого слоем золота. В зависимости от величин измеряемых теплоемкостей и количества исследуемого вещества размеры калориметра колеблются от 2 до 100 см³. Использование радиальных перегородок и гелия под небольшим давлением в качестве теплоносителя в ампуле с веществом способствует быстрому установлению теплового равновесия после подачи энергии в калориметр.

Равновесная температура образца измеряется платиновым термометром сопротивления *L*, помещенным в платиновую оболочку и расположенным соосно внутри калориметра. По мере увеличения температуры калориметра за счет подвода электрической энергии к нагревателю, расположенному внутри калориметрического сосуда, температура адиабатической оболочки поддерживается настолько близкой к температуре калориметра, что практически между калориметром и окружающей средой не происходит заметного теплообмена. После подачи новой порции энергии определяется следующая температура равновесия. В обычных опытах с типичными веществами за один час удается провести несколько таких измерений. При изучении фазовых и других превращений для достижения равновесия часто требуется более длительное время. В таких случаях для получения надежных значений теплоемкости необходима прецизионная автоматическая система контроля температуры адиабатической оболочки. Значение теплоемкости образца рассчитывается по его массе, измеренной разности температур, количеству введенной энергии и предварительно определенному тепловому значению калориметрической установки. Воспроизводимость порядка нескольких сотых одного процента может быть получена практически во всем интервале температур. Точность измеренной величины определяется сравнением всех определений массы, времени, температуры, сопротивления и потенциала с эталонными значениями, а также путем измерений теплоемкостей некоторых веществ, принятых Калориметрической конференцией в качестве стандартов [487].

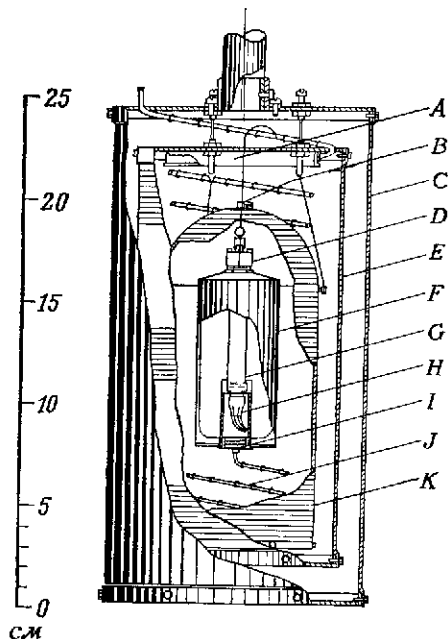
Тщательный анализ ошибок с учетом результатов определений теплоемкостей стандартных веществ, выполненных в разных термодинамических лабораториях, показывает, что теплоемкости, измеренные с помощью описанной выше калориметрической установки, позволяют определять такие термодинамические функции, как энтропия, с ошибкой, не превышающей $\pm 0,1\%$ при температурах измерений выше 100° К.

Подробный анализ последних достижений в области криогенной адиабатной калориметрии был дан Вестрамом, Фурукавой и МакКаллохом [1597]. Вопросы, связанные с изотермической криогенной калориметрией, рассмотрены в работе Стаута [1427].

Различные варианты калориметрических установок для измерения удельных теплоемкостей при комнатной температуре и выше были описаны Уильямсом [1614], Корручини и Джиннингсом [274], Астоном, Финком, Тук и Цинсом [36], Стоу и Эллиоттом [1429], Уестом и Джиннингсом [1591] и Вестрамом и Трубриджем [1599]. Обзор работ в области адиабатной калориметрии при средних температурах дан Уестом и Вестрамом [1592].

Следует отметить, что даже в области средних температур (300—700° К) применение адиабатного метода калориметрии дает ряд преимуществ по сравнению с методом «смешения» [452] при определении термических свойств органических веществ, обладающих метастабильными фазами и необратимыми превращениями в процессе нагревания или не образующих термодинамически равновесных фаз при закалке. Адиабатический калориметр с автоматическим контролем температуры адиабатической оболочки позволяет также изучать такие фазовые превращения, в которых тепловое равновесие, или гистерезис, достигается в течение многих часов. В качестве примера на рис. II.2 изображен адиабатический калориметр, использованный Вестрамом и Трубриджем [1599] для прецизионного определения теплоемкостей конденсированных фаз и энтальпий фазовых переходов и плавления в интервале температур от 300 до 600° К. Принцип работы этой калориметрической установки, предусматривающей изоляцию калориметрического сосуда от внешней среды с помощью хромированных тепловых экранов, аналогичен принципу работы описанного выше калориметра для измерения теплоемкостей при низких температурах. Калориметр, изготовленный из серебра, имеет осевое отверстие для нагревателя сопротивлением 250 ом и помещенный в чехол платиновый термометр сопротивления, плотно вставляющийся с помощью медно-бериллиевой втулки в высверленное отверстие муфты нагревателя. С помощью нарезки на верхней поверхности муфты нагревателя и винтового шлифа муфта плотно ввинчивается в коническое отверстие *G*. Для выравнивания температуры служат шесть вертикальных радиальных перегородок, смонтированных вместе с погружаемым калориметром. Загрузка вещества в калориметр производится через специальную герметичную

золотую крышку с отожженной золотой прокладкой, прижимаемую к кольцевому ножу небольшими винтами. Такая система загрузки и герметизации удобна при работе калориметра в вакууме, так как позволяет вводить в калориметр некоторое количество гелия для ускорения достижения термического равновесия. Описанный калориметр позволяет проводить измерения в импульсном режиме с такими интервалами времени, которые необходимы для установления теплового равновесия после каждой подачи электрической энергии.



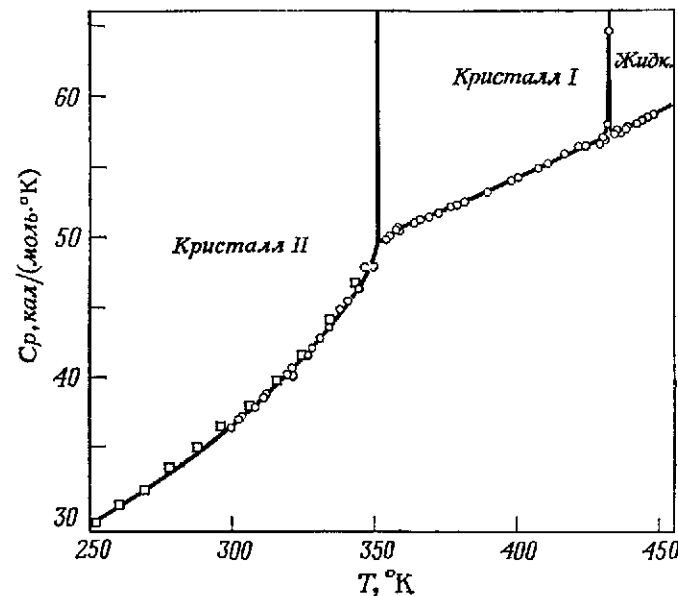
Р и с. II.2. Схематический разрез адиабатического калориметра для определения теплоемкостей и теплот фазовых переходов при средних температурах [1599].

A — кольцо второго теплового экрана, B — подвес из тонкой проволоки, C — первый тепловой экран, D — крышка калориметра, E — второй тепловой экран, F — калориметр, G, H — чувствительный элемент термометра сопротивления, I — катушка для приведения проводов в тепловое равновесие с поверхностью калориметра, J — подводные провода, K — адиабатическая оболочка.

см

Для иллюстрации точности, полученной с помощью такого типа калориметра, на рис. II.3 приведены данные, полученные для триэтилендиамина (1,4-диазабцикло-[2,2,2]-октана) Чангом и Вестрамом [210] для области низких температур и данные Трубриджа и Вестрама для области жидкого состояния [1519]. Как видно из рис. II.3, низкотемпературные кристаллы II этого вещества, состоящего из глобулярных молекул, переходят в пластическое кристаллическое состояние (кристаллы I) при температуре 351,08° K; изменение энтальпии этого перехода равно 2524,0 кал/моль. Образовавшиеся кристаллы I плавятся при 432,98° K; при этом изменение энтальпии равно 1776,5 кал/моль. Сходство термодинамического поведения кристаллов I и жидкой фазы позволяет предположить наличие для пластической кристаллической фазы значительной доли степеней свободы, присущих жидкой фазе.

В литературе опубликовано сравнительно мало работ по определению теплоемкостей органических молекулярных кристаллов при повышенных температурах. Это объясняется отчасти сравнительно низкими температурами плавления этих веществ и их тенденцией



Р и с. II.3. Теплоемкость триэтилендиамина [1519].

□ экспериментальные значения, полученные на низкотемпературном адиабатическом калориметре [210], ○ данные, определенные с помощью адиабатического калориметра, изображенного на рис. II.2.

к разложению и изомеризации. Методики калориметрических измерений при температурах выше 700° K были рассмотрены в обзоре Дугласа и Кинга [338].

Теоретическая оценка теплоемкостей твердых веществ

В 1907 г. Эйнштейн [375], рассмотрев модель одноатомного кристалла, состоящего из n атомов, как систему $3n$ независимых осцилляторов, колеблющихся в трех взаимно перпендикулярных направлениях с одинаковой для всех частиц гармонической частотой ν , получил следующее выражение зависимости теплоемкости при постоянном объеме от температуры:

$$C_v = \frac{3Ru^2 e^u}{(e^u - 1)^2} \quad (II.6)$$

В этом выражении величина u равна $h\nu/kT = \theta_E/T$, где h — постоянная Планка, а k — константа Больцмана, или газовая постоянная, отнесенная к одному атому. Величина θ_E — характеристическая константа (температура Эйнштейна) вещества. Выражение (II.6) при $T \rightarrow 0$ даст C_v , равное нулю; при $T \rightarrow \infty$ значение C_v достигает максимального значения, равного $3R$.

В 1910 г. Нернст и сотрудники, измеряя теплоемкости веществ при очень низких температурах, показали, что теплоемкость при температурах, близких к 0°K , действительно стремится к нулю. Однако наблюдаемая экспериментально зависимость C_v от температуры в значительной степени отличалась от найденной теоретически из формулы (II.6).

В 1912 г. Дебай [315] и независимо Борн и Карман [147] получили новое теоретическое выражение зависимости теплоемкости от температуры, лучше описывающее экспериментальные значения теплоемкостей при низких температурах, чем уравнение Эйнштейна. В своей модели Дебай рассматривал одноатомный изотропный кристалл как некоторый упругий континуум, состоящий из набора $3n$ осцилляторов, характеризующихся определенным спектром частот, ограниченным некоторой максимальной частотой ν_{\max} . Используя теорию колебаний, Дебай получил следующее выражение для теплоемкости упругого твердого кристалла при постоянном объеме:

$$C_v = 9R \left[\frac{4}{x^3} \int_0^x \frac{u^3}{e^u - 1} du - \frac{x}{e^x - 1} \right], \quad (\text{II.7})$$

где $x = h\nu_{\max}/kT = \theta_D/T$, а $u = h\nu/kT$. Выражение (II.7) можно представить в более компактном виде

$$C_v = f_D \left(\frac{T}{\theta_D} \right), \quad (\text{II.8})$$

где f_D — функция теплоемкости по Дебаю, общая для всех веществ. Параметр θ_D является характеристической константой (температурой Дебая) для данного вещества. Функция Дебая хорошо описывает экспериментальные значения теплоемкостей большого числа простых веществ, но применима лишь к тем простым молекулам, для которых можно определить необходимые численные значения колебательных частот. Отсутствие необходимых экспериментальных данных для колебательных частот многоатомных молекул не позволяет в настоящее время рассчитывать теплоемкости многоатомных кристаллических веществ на основании моделей Эйнштейна и Дебая.

Уравнения теплоемкости Эйнштейна (II.6) и Дебая (II.7) содержат универсальную газовую постоянную R и получены для одноатомных твердых тел, атомы которых колеблются в трех направлениях или, как говорят, обладают тремя колебательными степенями свободы. Приведенные в приложении таблицы П. 1 и П. 4 содержат

рассчитанные значения функций теплоемкостей Эйнштейна и Дебая, деленные на R и отнесенные к одной колебательной степени свободы. Приведенные в этих таблицах значения функций теплоемкостей Эйнштейна и Дебая остаются справедливыми при изменении величины экспериментального значения R . При вычислении теплоемкостей конкретных веществ приведенные функции теплоемкостей должны быть умножены на соответствующее число степеней свободы. На рис. II.4 для сравнения приведены две функции теплоемкостей, вычисленные для различных характеристических колебательных частот.

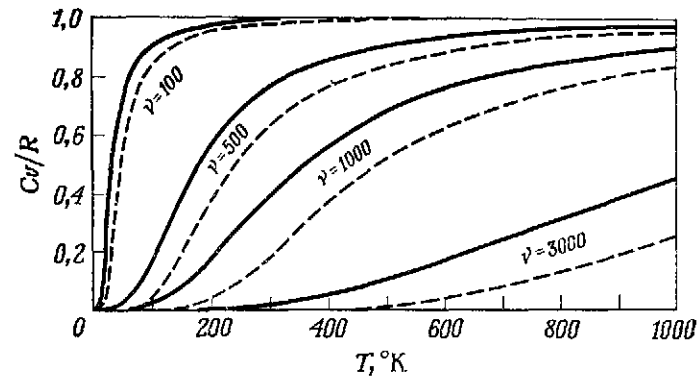


Рис. II.4. Сравнение функций теплоемкостей по Дебаю (—) и по Эйнштейну (---), вычисленных для различных характеристических частот.

Поскольку разница между C_p и C_v для молекулярных кристаллов становится неразличимой вблизи температур порядка 30°K , функцию теплоемкости Дебая можно использовать для экстраполяции измеренных значений C_p к абсолютному нулю. Келли и Кинг [738], рассмотрев ход наблюдаемых значений C_p ряда неорганических веществ при низких температурах, предложили для экстраполяции опытных данных так называемый метод проб и ошибок, основанный на соответствующих комбинациях функций Дебая и Эйнштейна. Для аналогичной экстраполяции теплоемкостей органических соединений многие авторы использовали только одну функцию Дебая. Путнам и Килпатрик [1208] измерили низкотемпературную теплоемкость 1,2,4-триметилбензола; значения, полученные ими, приведены в табл. II.1. С помощью метода проб и ошибок Путнам и Килпатрик пришли к выводу, что их экспериментальные значения можно экстраполировать к 0°K , основываясь на том, что значения теплоемкостей, вычисленные в предположении пяти степеней свободы и $\theta_D = 103,7$, совпадают с первыми шестью экспериментальными значениями теплоемкостей. Подобный эмпирический подход к вычислению теплоемкости вблизи абсолютного нуля, основанный на исполь-

Таблица II.1

Экстраполяция измеренных теплоемкостей
1,2,4-триметилбензола к 0°K ^{a)}

$T, ^\circ\text{K}$	Экспери- мент	$5D\left(\frac{103,7}{T}\right)$	$3D\left(\frac{80,5}{T}\right) + 6E\left(\frac{155}{T}\right)$
14,77	1,901	1,883	1,934
15,80	2,138	2,190	2,194
16,96	2,518	2,541	2,491
18,40	2,914	2,977	2,863
20,36	3,472	3,556	3,382
22,82	4,165	4,234	4,050
25,46	4,900	4,890	4,771
28,16	5,626	5,483	5,577
30,91	6,360	6,002	6,371

^{a)} Данные Путнама и Килпатрика [1208] [$\text{кал}/(\text{моль} \cdot ^\circ\text{K})$]

зовании функции Дебая с более чем тремя степенями свободы, весьма распространен в литературе. Для экстраполяции опытных данных

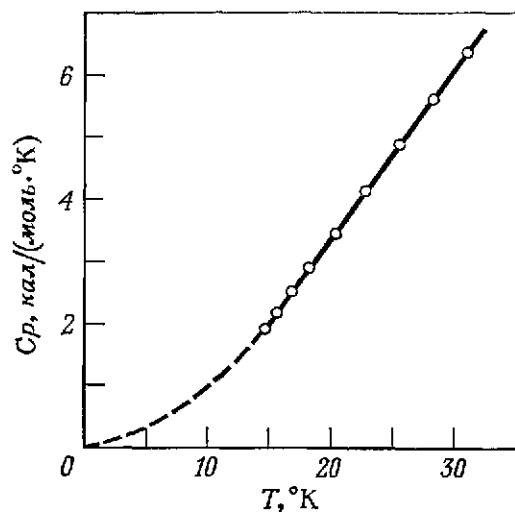


Рис. II.5. Экстраполяция теплоемкости 1,2,4-триметилбензола.

○ экспериментальные данные Путнама и Килпатрика [1208].
— — — комбинированные функции Эйнштейна и Дебая. См. текст и табл. II.1

часто используют также комбинацию функции Дебая с тремя колебательными степенями свободы, описывающими упругие свойства кристалла, в сочетании с определенным числом функций Эйнштейна,

соответствующих колебательному и вращательному движению отдельных молекул. Следовательно, данные Путнама и Килпатрика можно представить в виде функции

$$3D\left(\frac{80,5}{T}\right) + 6E\left(\frac{155}{T}\right).$$

Как видно из рис. II.5, такая комбинация функции Дебая и Эйнштейна адекватно описывает экспериментальные значения теплоемкостей вплоть до температуры $30,91^\circ \text{K}$. Машинные методы расчета, основанные на описанной выше экстраполяции опытных данных, были разработаны Филлипсом и Климпелем [1142].

Питцер и Брюер [1158] и позднее Вестрам, Фурукава и Мак-Каллох [1597] показали, что данные, полученные в последнее время для температур ниже 10°K , можно экстраполировать графически путем построения зависимости в координатах $C_p/T - T^2$.

Теплоемкость жидкостей

В настоящее время не существует удовлетворительных методов расчета теплоемкости жидкостей, поскольку отсутствует достаточно точная теория жидкого состояния. В литературе имеются различные теоретические подходы к рассмотрению этой проблемы (см., например, работы Мелвин-Хьюза [1017, 1018] и Роулинсона [1257]). Поскольку число степеней свободы в жидком состоянии больше, чем в твердом, теплоемкости жидкостей несколько выше теплоемкостей твердых тел. Однако при выборе и использовании конкретных значений всегда следует опираться на экспериментальные величины.

Экспериментальное определение теплоемкостей газов и энтальпий испарения

Прибор для определения энтальпии испарения и теплоемкости газов описан Уаддингтоном, Тоддом и Хаффманом [1552] и изображен с некоторыми упрощениями на рис. II.6. Исследуемая жидкость (объем $150-250 \text{ см}^3$) непрерывно кипит в вакуумном испарителе А, снабженном вакуумной рубашкой и электрическим нагревателем, соединенным с аккумулятором. Нагреватель навит на пирексовую спираль, припаянную к внутренней стенке испарителя. Провода от нагревателя и термопар по всей длине (начиная от нескольких сантиметров ниже поверхности жидкости до места их вывода из испарителя) покрыты слоем стекла. Во избежание конденсации пара газоотводные трубки обогревают электрическим током. Пар, проходя через газовый калориметр С, конденсируется, затем снова нагревается до температуры термостата и возвращается в испаритель. Температуру термостата испарителя поддерживают примерно на $0,2^\circ \text{K}$ выше температуры кипения жидкости с точностью

$\pm 0,003^\circ \text{K}$, что позволяет свести до минимума потери тепла в посеребренной вакуумной рубашке испарителя. Для измерения температуры кипящей жидкости и пара используют термометры TC_1 и TC_2 . Остальную часть системы заполняют гелием, давление его поддерживают специальным маностатом в пределах $\pm 0,1 \text{ мм рт. ст.}$

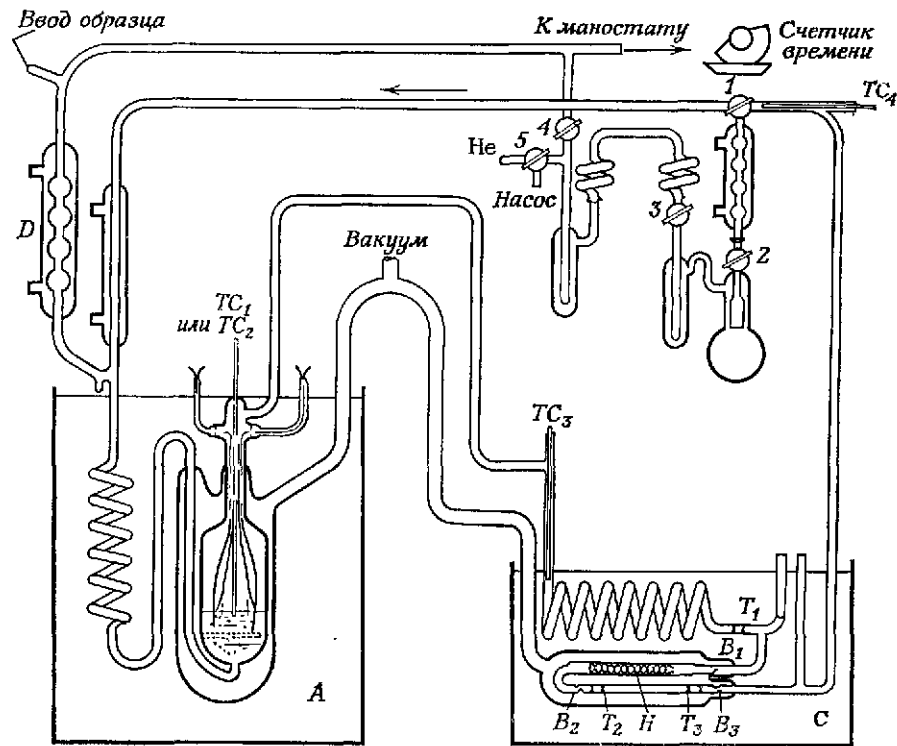


Рис. II.6. Прибор для определения энтальпии испарения и теплоемкости газов (по Уаддингтону, Тодду и Хаффману [1552]).

Проточный калориметр C помещают во второй термостат, температуру которого поддерживают в пределах $\pm 0,002^\circ \text{K}$. С помощью специального нагревателя температуру пара в пароотводной системе (термометр TC_3) поддерживают в пределах температуры термостата с точностью $\pm 2,0^\circ \text{K}$. После охлаждения в стеклянном холодильнике пар проходит над платиновым термометром сопротивления T_1 , служащим для сравнения температуры пара с температурой термостата, измеряемой с помощью другого платинового термометра сопротивления (на рисунке не показан). Затем пар поступает в калориметр, представляющий собой топкостенную U-образную трубку из стекла пирекс, помещенную в посеребренную вакуумную рубашку,

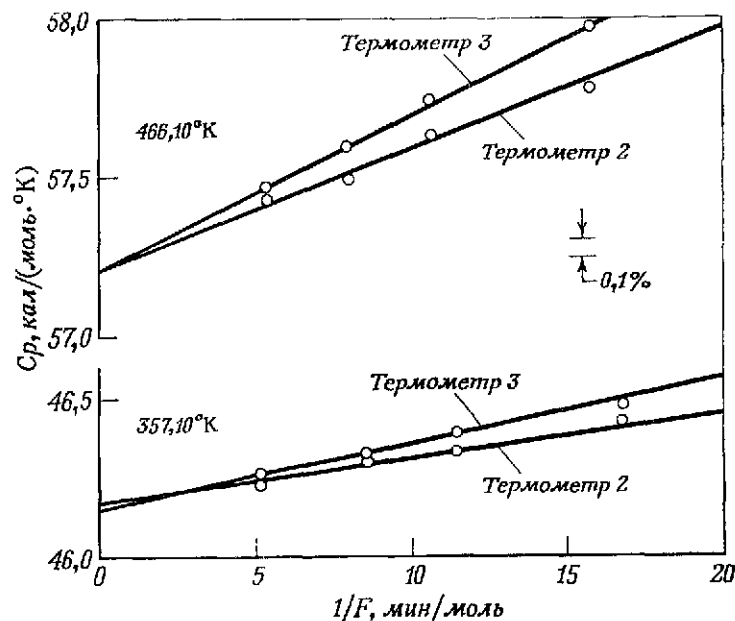
проходит над нагревателем H и двумя платиновыми термометрами сопротивления T_2 и T_3 . Токо- и потенциалподводящие провода нагревателя выведены из системы в направлении против потока газа; аналогичные провода двух термометров выведены в противоположном направлении. Тепловые потери пара сведены до минимума с помощью специальных отражательных перегородок B_1 и B_3 . Третья отражательная перегородка B_2 способствует перемешиванию пара после выхода его из нагревателя. По пароотводной трубке пар поступает к трехходовому крану I , температуру которого измеряют термометром TC_4 и поддерживают примерно на 20°K выше точки кипения жидкости. С помощью этого крана пар можно направить обратно в испаритель A или в конденсатор, соединенный с двумя ловушками для сбора конденсата. Во время заполнения ловушки паром втулка крана I соприкасается со стальным сектором и погружает его в сосуд со ртутью, тем самым включая электрический счетчик времени. С помощью этого счетчика время наполнения ловушек, равное примерно 5–6 мин, фиксируется с точностью $\pm 0,05 \text{ сек.}$ Для определения веса собранного конденсата используют съемные ловушки.

Показания пяти платиновых термометров сопротивления, изготовленных в виде проволочных спиралей, свободных от натяжений [1995], проверяют по точно стабилизированному (эталонному) термометру сопротивления такого же типа. Для измерения электрических токов, протекающих через нагреватель, и потенциалов используют двойной потенциометр Уайта с откалиброванными магазинами сопротивлений, нормальным элементом и высокочувствительным гальванометром.

Измеряя вес конденсата, собранного в ловушке за определенное время, рассчитывают скорость потока пара. Зная силу тока и напряжение на нагревателе за тот же промежуток времени, определяют количество электрической энергии, подведенной к нагревателю. Обычно для определения фактической энергии, затраченной на испарение образца, необходимо ввести следующие четыре поправки: а) поправку на 0–20 кал за счет изменения температуры кипения жидкости в пределах $\pm 0,05^\circ \text{K}$, регистрируемой термометром TC_2 ; б) поправку на 10–35 кал за счет изменения температурного градиента между нагревателем и поверхностью жидкости в испарителе; в) поправку приблизительно на 25 кал за счет потери тепла в результате теплопроводности токоподводящих проводов, расположенных позади контактов проводов, используемых для измерения потенциалов; г) поправку на расширение пара в дополнительный объем, образующийся в результате испарения и уноса жидкости из испарителя. Наличие пропорциональной зависимости между импульсной мощностью и скоростью уноса массы вещества при данной температуре кипения позволяет использовать импульсную мощность для определения скорости потока пара в опытах по определению тепло-

емкостей. При такой температуре эта пропорциональность не зависит от скорости потока и продолжительности эксперимента.

Для определения кажущихся значений теплоемкостей пара измеряют температуру газового калориметра при фиксированной подаче энергии на нагреватель и четырех или более значениях скоростей потока. Независимые величины кажущихся значений теплоемкости



Р и с. II.7. Кажущиеся значения теплоемкости гептана как функция скорости потока пара (по Уаддингтону, Тодду и Хаффману [1552]).

при различных скоростях потока получают, измеряя показания термометров сопротивления T_2 и T_3 . Зависимость кажущейся теплоемкости от скорости потока, построенная в координатах $C_p - 1/F$ (где F — скорость потока), дает прямую линию в пределах $\pm 0,05\%$ (рис. II.7). Экстраполяция этой зависимости к нулевому значению скорости газового потока дает поправку на тепловые потери, которые даже при самых высоких температурах и малых скоростях потока не превышают 2%.

В начале опыта с помощью термометров сопротивления T_1 , T_2 и T_3 измеряют температуру потока пара при отключенном нагревателе H ; затем нагревателю сообщается измеренное количество энергии, и после достижения теплового равновесия повторно измеряется температура термометрами T_1 , T_2 и T_3 . Незначительные колебания в скорости потока вызывают изменения температуры в пределах

от $\pm 0,003$ до $\pm 0,008^\circ$. Для каждого термометра определяют разность температур (например, $T_{2, final} - T_{2, initial}$) до и после подвода энергии и стараются уменьшить ошибки, связанные с различиями в калибровке термометров и влиянием эффекта Джоуля — Томсона, обусловленного перепадом давления при прохождении пара через калориметр. Для учета температурного коэффициента эффекта Джоуля — Томсона вводят соответствующую поправку, отвечающую изменению температуры газа на 8° . Этот эффект составляет примерно 0,03% общего теплового эффекта. Совпадение средних значений температуры ряда экспериментов свидетельствует об отсутствии влияния величины ΔT на кажущиеся значения теплоемкостей. В процессе эксперимента перепад давления между испарителем и калориметром составляет от 1 до 35 мм и достигает максимального значения для самой большой скорости газового потока и самой низкой температуры эксперимента. Для учета перепада давления вводится соответствующая поправка, которая по величине не превышает 0,1% и связана с измеряемой величиной $(\Delta C_p / \Delta P)_T$. Значения теплоемкости, совпадающие в пределах 0,05% со средним значением, находят из величин ΔT , определенных с помощью термометров T_2 или T_3 .

Поправка для приведения величины теплоемкости C_p при 1 атм к теплоемкости при нулевом давлении (C_p^0) (т. е. к теплоемкости вещества в состоянии идеального газа) определяется из экспериментальных данных при двух или более давлениях, отвечающих одной и той же температуре, путем построения графика в координатах $C_p - P$ и экстраполяции полученной зависимости к нулевому давлению. Такой прием позволяет получить значения C_p^0 и $(\Delta C_p / \Delta P)_T$ и служит для нахождения уравнения состояния вещества.

В табл. II.2 приведены типичные экспериментальные данные по теплоемкости газообразного n -гептана, полученные Уаддингтоном,

Таблица II.2

Теплоемкость газообразного гептана ^{a)}

P, мм	T, °К				
	357,10	373,15	400,40	434,35	466,10
195,5	46,140	47,805	50,555	53,965	57,075
391,2	46,515	48,095			
597,7		48,410	50,930	54,200	57,215
760,0	47,22	48,66	51,08	54,30	57,27
0,0	45,77	47,51	50,37	53,85	57,00

^{a)} Данные Уаддингтона, Тодда и Хаффмана [1552] в кал/(моль·°К).

Тоддом и Хаффманом [1552]. Определенное ими значение энтальпии испарения и соответствующие поправки обсуждаются в этой главе несколько позднее.

Расчет теплоемкостей газов на основе статистической механики

Роль статистической механики в теоретическом обосновании методов расчета термических свойств газов аналогична роли актуарной статистики. Исходя из законов статистической механики нельзя предсказать время жизни отдельной частицы; можно лишь оценить среднее время жизни большого числа частиц. При использовании мощного аппарата статистической механики необходимо, во-первых, знать, можно ли применять для описания распределения энергии частицы по различным степеням свободы и распределения энергии между молекулами законы классической механики или поведение частиц системы лучше рассматривать с точки зрения квантовой механики, и, во-вторых, необходимо знать способы усреднения или распределения энергии между различными состояниями частиц. Несмотря на то что квантовая механика лучше описывает энергетические свойства молекул, в некоторых случаях, когда энергетические уровни молекул полностью возбуждены и расстояния между дискретными уровнями малы по сравнению с величиной kT , классическая механика позволяет также достаточно точно рассчитать термодинамические свойства веществ. Статистический расчет можно значительно упростить, если рассматривать координаты и моменты различных степеней свободы молекулы как независимые, а рассматриваемым молекулам приписать свойства частиц идеального газа.

В классической кинетической теории газов для вычисления энергии и теплоемкости используют принцип классической механики о равномерном распределении энергии по степеням свободы, согласно которому вследствие беспорядочных столкновений частиц происходит постоянное перераспределение энергии, в результате чего на каждую ступень свободы приходится одна и та же доля энергии, равная $RT/2$ на 1 моль. Этот вывод строго вытекает из уравнений статистической механики (см., например, работы Астона [30], Толмана [1513], Майера и Майера [942] и Фаулера и Гугенгейма [436]). В таком случае вклад в теплоемкость будет составлять

$$C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \frac{R}{2}. \quad (\text{II.9})$$

Выражение для кинетической энергии поступательного движения молекулы, отвечающее одной степени свободы, можно представить в виде $E_{tr}/n = 1/2 m (v_i)^2$ или как квадратичную функцию момента количества движения ($p_i = mv_i$), например $E_R/n = (p_i)^2/2m$. Отсюда следует, что минимальное мольное значение кинетической энергии,

приходящееся на одну степень свободы, составляет $RT/2$. Поскольку число степеней свободы одноатомной газообразной молекулы равно числу координат, необходимых для описания положения центра массы в пространстве (x , y и z в картезианских координатах или r и θ , ϕ в полярных координатах), то для одноатомной молекулы их число равно трем и отвечает трем возможным направлениям поступательного движения в пространстве. Энергия поступательного движения и теплоемкости C_v и C_p одного моля такого идеального газа будут равны

$$E = 3RT/2, \quad C_v = 3R/2, \\ C_p = \frac{3R}{2} + R = \frac{5R}{2}.$$

Значения теплоемкостей, полученные для гелия на основе классической теории, согласуются с экспериментальными величинами, определенными для интервала температур в несколько градусов Кельвина вблизи абсолютного нуля, и, таким образом, подтверждают применимость классической теории теплоемкостей при таких температурах, когда можно пренебречь влиянием квантовых эффектов.

Энергия вращательного движения по своей природе также является кинетической, т. е.

$$E_{or} = \frac{(p_{or})^2}{2I},$$

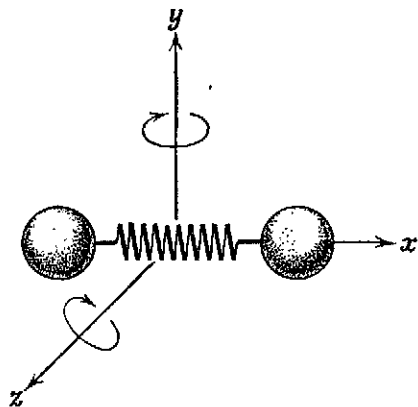
где p_{or} — момент количества движения, а I — момент инерции вокруг оси вращения. Индекс «or» означает свободное вращение всей молекулы. Поскольку энергия вращения также является квадратичной функцией момента, любой вид вращения всей молекулы будет давать вклад, равный $RT/2$ кал/моль, в общую энергию молекулы.

Энергия простого гармонического осциллятора представляет собой сумму двух квадратичных членов: одного, содержащего момент движения p_x , и другого, связанного с координатой смещения x , т. е.

$$E_{vib} = \frac{(p_x)^2}{2m} + \frac{fx^2}{2},$$

где f — силовая постоянная. Таким образом, первый член выражения представляет собой кинетическую, а второй — потенциальную энергию колебательного движения. Отсюда следует, что каждая колебательная степень свободы дает вклад в общую энергию молекулы, равный $(RT/2) \times 2$, или RT кал/моль. Общее число степеней свободы, необходимых для полного описания полиципных многоатомных молекул, содержащих n атомов, составляет $3n$. Три из них описывают движение центра тяжести молекулы и являются поступательными степенями свободы; три, отвечающие ориентации молекулы как целого, — вращательными и остальные $3n - 6$ — колебательными. Полная теплоемкость такой молекулы при постоянном объеме, согласно принципу равномерного распределения энергии, будет равна $(3n - 3)R$. Для линейных молекул число вращательных и колебательных степеней свободы равно соответственно двум

и $(3n - 5)$; в таком случае теплоемкость линейной молекулы при постоянном объеме будет составлять $(3n - 5/2)R$. Для двухатомной молекулы $C_v = 7/2R$. Анализ данных по теплоемкостям газов показывает, что найденные экспериментально теплоемкости, как правило, меньше, чем вычисленные по приведенным формулам, и лишь при высоких температурах они приближаются к расчетным величинам. Расхождение объясняется в основном тем, что не учитывалась кван-



Р и с. II.8. Схематическое изображение двухатомной молекулы.

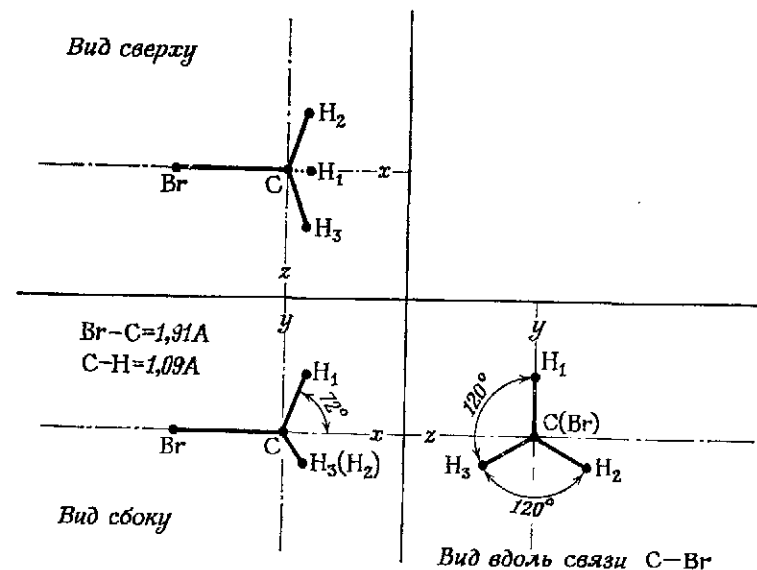
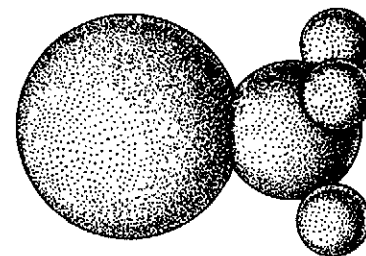
Р и с. II.8. Схематическое изображение двухатомной молекулы. Квантовый подход для оценки энергии колебательного движения будет использоваться по мере необходимости для получения величин, согласующихся с экспериментальными данными. Изображенную на рис. II.8 двухатомную молекулу можно представить как систему, состоящую из двух точечных масс, связанных упругими силами. Каждый атом обладает тремя степенями свободы. Для всей молекулы число степеней свободы будет равно шести. Каждая из трех поступательных степеней свободы молекулы (жесткий ротор) дает одинаковый вклад в теплоемкость, равный величине, приводимой в выражении (II.9). Молекула, изображенная на рис. II.8, может вращаться вокруг осей x , y и z ; причем момент инерции вокруг оси x для такой молекулы пренебрежимо мал. Таким образом, двухатомная молекула обладает двумя вращательными степенями свободы. Последняя степень свободы связана с колебаниями атомов вдоль оси x . Согласно квантовой теории, выражение колебательной составляющей молекулы совпадает с выражением для теплоемкости твердых тел, т. е. с выражением (II.6), и равно

$$C_{\text{vib}} = \frac{u^2 e^u}{(e^u - 1)^2} = R, \quad (\text{II.10})$$

т. е. квантовая природа вещества, и это особенно сказывается на колебательной энергии молекул. В дополнение следует подчеркнуть, что отклонение от точной квадратичной зависимости в выражении для энергии даже при высоких температурах неизбежно приводит к невыполнению принципа равномерного распределения энергии по степеням свободы. Подобные отклонения, например, будут вызывать осцилляторы, не являющиеся строго гармоническими. И наконец, следует учитывать наличие в молекулах заторможенного внутреннего вращения.

Методику расчета теплоемкостей удобно рассмотреть на ряде

где $u = h\nu/kT = hc\omega/kT = 1,4386\omega/T$. Отличие состоит в том, что в случае газов одновременно учитывается только один вид колебательного движения. В расчетах обычно принято выразить частоту



Р и с. II.9. Схематическое изображение и ортографическая проекция молекулы бромистого метила.

(сек^{-1}) в волновых числах и ω (т. е. ν/c) — в см^{-1} . Вычисленные с помощью уравнения теплоемкости Эйнштейна (II.6) значения вкладов C°/R частот простых гармонических колебаний (в см^{-1}) приведены в приложении (табл. II.1).

В качестве следующего примера рассмотрим вычисление теплоемкости бромистого метила, молекула которого изображена на рис. II.9.

Каждые три поступательные и три вращательные степени свободы этой молекулы дают вклад в теплоемкость при постоянном объеме, равный $3R/2$ кал/(моль·°K); вклады остальных колебательных степеней свободы, число которых равно $(3 \times 5) - 6 = 9$, вычисляются из спектроскопических данных. Вейсман, Бернштейн, Россер, Майстер и Клевеленд [1584] исследовали инфракрасные спектры этой молекулы в области частот от 400 до 4000 см^{-1} и определили следующие фундаментальные частоты (в см^{-1}) и их мультиплетность (в скобках): 611 (1), 955 (2), 1305 (1), 1444 (2), 2972 (1), 3057 (2). Обычно говорят, что степень свободы обладает мультиплетностью g_i , если g_i степеням свободы соответствует одинаковая частота колебаний.

Бромистый метил обладает тремя дважды вырожденными частотами, поэтому вклад в теплоемкость этих трех частот необходимо удвоить. Вклад колебательных степеней свободы в теплоемкость определяется для каждой из приведенных выше частот или непосредственно, или путем интерполяции по данным табл. II.1 (см. приложения). Величины этих вкладов при 300° K приведены в табл. II.3.

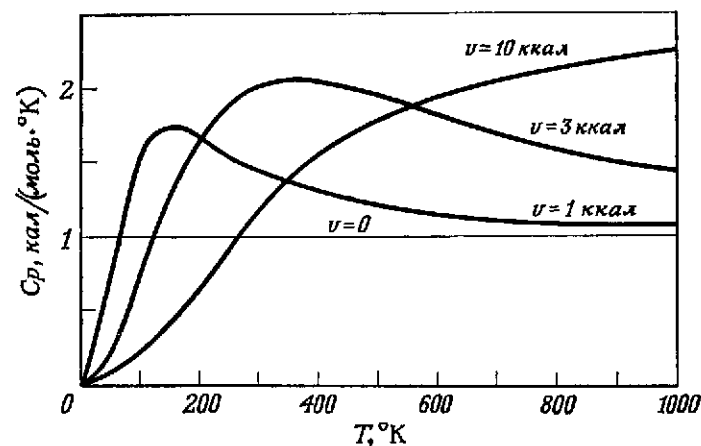
Таблица II.3

$\omega_i, \text{см}^{-1}$	g_i	C°/R
611	1	0,5116
955	2	0,4392
1305	1	0,0762
1444	2	0,0948
2972	1	0,0001
3057	2	0,0002
Вклад колебательных степеней свободы		1,122
Вклад поступательных и вращательных степеней свободы всей молекулы		3,000
Переход от C_v к C_p		1,000
		5,122

Суммарное рассчитанное значение C_p°/R для идеального газообразного CH_3Br равно $5,122 \times 1,9873 = 10,18$ кал/(моль·°K).

Иногда, помимо рассмотренных выше поступательной, вращательной и колебательной энергий, необходимо учитывать энергию внутреннего вращения, т. е. энергию, связанную с вращением групп атомов в молекуле вокруг некоторой валентной связи. Если энергия вращения группы атомов в молекуле намного меньше энергии потен-

циального барьера, то вращение такого типа будет заторможенным и молекула будет испытывать крутильные колебания около некоторого положения равновесия. С повышением температуры энергия крутильных колебаний увеличивается до тех пор, пока она не окажется равной значению энергии потенциального барьера, после чего начинается заторможенное вращение. По мере увеличения температуры вращение молекулы становится все более и более свободным. Такая картина изображена графически на рис. II.10.

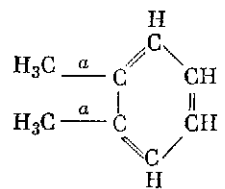


Р и с. II.10. Вклад в теплоемкость как функция высоты потенциального барьера заторможенного вращения метильной группы (по Герцбергу [589]).

В случае небольших потенциальных барьеров вклад в теплоемкость за счет заторможенного вращения проходит через резкий максимум при низких температурах и значительно превосходит величину вклада в теплоемкости за счет свободного вращения; при повышении температуры величина барьера приближается к энергии свободного вращения. При увеличении высоты потенциального барьера максимальное значение вклада в теплоемкость за счет эффекта внутреннего вращения может превосходить максимальное значение вклада энергии гармонического вибратора. Величину потенциального барьера обычно определяют из измерений теплоемкости газов при одной температуре или из экспериментальных значений энтропии при некоторой температуре. Зная значение потенциального барьера при одной температуре, нетрудно рассчитать вклад в теплоемкости за счет заторможенного вращения при любой другой температуре. В настоящее время не существует общего надежного метода определения потенциальных барьеров, препятствующих вращению. Однако, как видно из табл. II.4, для оценки этих величин имеются полезные эмпирические закономерности. Существующие методики

Таблица II.4

Энергия потенциальных барьеров внутреннего вращения

Вещество	Структура и связь	Барьер ^{a)} , ккал	Литера- тура
<i>Углеводороды</i>			
Этан	$\text{H}_3\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\text{CH}_3$	<i>a</i> 2,88 (T) <i>a</i> 3,03 (S)	[4157] [866]
Пропан	$\text{H}_3\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\overset{a}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{a}{\text{C}}-\text{CH}_3$	<i>a</i> 3,4 (T) <i>a</i> 3,3 (T)	[4157] [31]
2-Метилпропан	$\text{H}_3\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\overset{a}{\text{C}}\text{H}-\overset{a}{\text{C}}-\text{CH}_3$ CH_3	<i>a</i> 3,87 (T) <i>a</i> 3,62 (T) <i>a</i> 3,9 (M)	[38] [4164] [873]
2,2-Диметилпропан	$\text{H}_3\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\overset{a}{\text{C}}-\overset{a}{\text{C}}-\text{CH}_3$ CH_3 CH_3	<i>a</i> 4,54 (T) <i>a</i> 4,30 (T)	[29] [4164]
Пропилен	$\text{H}_3\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\text{CH}=\text{CH}_2$	<i>a</i> 1,95 (T) <i>a</i> 1,98 (M) <i>a</i> 2,0 (S)	[751] [870] [410]
2-Метилпропен	$\text{H}_3\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\overset{a}{\text{C}}=\text{CH}_2$ CH_3	<i>a</i> 2,35 (T) <i>a</i> 2,21 (M) <i>a</i> 2,12 (S)	[751] [850] [408]
Бутадиен-1,2	$\text{H}_3\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\text{CH}=\text{C}=\text{CH}_2$	<i>a</i> 1,65 (T) <i>a</i> 1,59 (M)	[44] [874]
Бутин-1	$\text{H}_3\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\text{CH}_2-\text{C}\equiv\text{CH}$	<i>a</i> 3,0 (T)	[39]
Бутин-2	$\text{H}_3\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\text{C}\equiv\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\text{CH}_3$	<i>a</i> < 0,5 (T) <i>a</i> < 0,5 (T) <i>a</i> < 0,1 (S)	[758] [4638] [181, 756, 800]
Толуол	$\text{H}_3\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\text{C}_6\text{H}_5$	<i>a</i> 0 (T)	[1314]
о-Ксилол		<i>a</i> 1,8 (T)	[577]

Продолжение табл. II.4

Вещество	Структура и связь	Барьер ^{a)} , ккал	Литера- тура
<i>Кислородсодержащие соединения</i>			
Метилловый спирт	$\text{H}_3\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\text{OH}$	<i>a</i> 1,1 (T) <i>a</i> 1,1 (M)	[674] [673, 1455]
Этиловый спирт	$\text{H}_3\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\overset{b}{\text{C}}\text{H}_2-\text{OH}$	<i>a</i> 3,3 (T) <i>b</i> 0,8 (T)	[536] [536]
Изопропиловый спирт	$\text{H}_3\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\overset{b}{\text{C}}\text{H}-\text{OH}$ CH_3	<i>a</i> 4,0 (T) <i>b</i> 0,8 (T)	[538] [538]
Бутиловый спирт третичный	$\text{H}_3\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\overset{b}{\text{C}}-\overset{a}{\text{C}}-\text{CH}_3$ OH CH_3	<i>a</i> 3,8 (T) <i>b</i> 0,9 (T)	[124] [124]
Метилловый эфир	$\text{H}_3\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\text{O}-\overset{a}{\text{C}}-\text{CH}_3$	<i>a</i> 2,7 (T) <i>a</i> 2,72 (M) <i>a</i> 2,63 (S)	[31] [722] [408]
Окись пропилена	$\text{H}_3\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\overset{\text{O}}{\text{C}}-\text{CH}_2$	<i>a</i> 2,56 (M) <i>a</i> 2,52 (S)	[588] [410]
Ацетальдегид	$\text{H}_3\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\text{CHO}$	<i>a</i> 1,0 (T) <i>a</i> 1,17 (M) <i>a</i> 1,18 (S)	[1167] [407] [587]
Ацетон	$\text{H}_3\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\text{CO}-\overset{a}{\text{C}}-\text{CH}_3$	<i>a</i> 1,0 (T) <i>a</i> 0,78 (M) <i>a</i> 0,83 (S)	[1135] [1456] [408]
Уксусная кислота	$\text{H}_3\text{C}-\overset{a}{\text{C}}-\text{CO}_2\text{H}$	<i>a</i> 2,5 (T) <i>a</i> 0,5 (M)	[1587] [1463]
Фенол	$\text{HO}-\overset{a}{\text{C}}-\text{C}_6\text{H}_5$	<i>a</i> 3,4 (S) <i>a</i> 3,2 (M)	[392] [788]

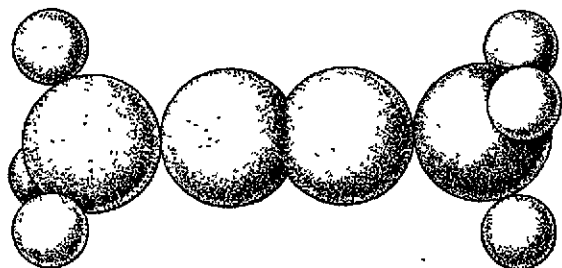
Вещество	Структура и связь	Барьер ^{a)} , ккал	Литература
<i>Серусодержащие соединения</i>			
Метантиол	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{SH}$	<i>a</i> 1,27 (T) <i>a</i> 1,27 (M)	[1271, 1316] [790]
Этантиол	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{CH}_2 \overset{b}{-} \text{SH}$	<i>a</i> 3,31 (T) <i>b</i> 1,64 (T)	[962] [962]
2-Проантиол	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \underset{\text{CH}_3}{\underset{ }{\text{C}}} \overset{b}{-} \text{SH}$	<i>a</i> 3,95 (T) <i>b</i> 1,39 (T)	[955] [955]
2-Метил-2-пропантиол	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \underset{\text{CH}_3}{\underset{ }{\text{C}}} \overset{b}{\overset{\text{SH}}{ }} \overset{a}{-} \text{CH}_3$	<i>a</i> 5,10 (T) <i>b</i> 1,36 (T)	[963] [963]
Метилсульфид	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{S} \overset{a}{-} \text{CH}_3$	<i>a</i> 2,10 (T) <i>a</i> 2,09 (S) <i>a</i> 2,18 (M) <i>a</i> 2,13 (M)	[958] [408] [354] [1143]
Тиофенол	$\text{HS} \overset{a}{-} \text{C}_6\text{H}_5$	<i>a</i> 0 (T)	[1319]
<i>Азотсодержащие соединения</i>			
Метиламин	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{NH}_2$	<i>a</i> 1,98 (M)	[1346]
Диметиламин	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{NH} \overset{a}{-} \text{CH}_3$	<i>a</i> 3,46 (T) <i>a</i> 3,28 (S)	[32] [408]
Триметиламин	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \underset{\text{CH}_3}{\underset{ }{\text{N}}} \overset{a}{-} \text{CH}_3$	<i>a</i> 4,27 (T) <i>a</i> 4,40 (M) <i>a</i> 4,41 (S)	[42] [872] [408]
N-Метилметилен-имин	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{N} = \text{CH}_2$	1,97 (M)	[1277]
Нитрометан	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{NO}_2$	<i>a</i> 0 (T) <i>a</i> 0 (M)	[964] [1466]

Вещество	Структура и связь	Барьер ^{a)} , ккал	Литература
Метилнитрат	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{O} \overset{b}{-} \text{NO}_2$	<i>a</i> 0 (T) <i>a</i> 2,3 (M) <i>b</i> 0 (T) <i>b</i> 9,1 (M)	[524] [330] [524] [330]
2-Метилпиридин	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{C}_5\text{H}_4\text{N}$	<i>a</i> 0 (T)	[1315]
3-Метилпиридин	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{C}_5\text{H}_4\text{N}$	<i>a</i> 0 (T)	[1310]
Анилин	$\text{H}_2\text{N} \overset{a}{-} \text{C}_6\text{H}_5$	<i>a</i> 3,43 (T) <i>a</i> 3,54 (S)	[579] [391]
<i>Галогенсодержащие соединения</i>			
Этил фтористый	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{CH}_2\text{F}$	<i>a</i> 3,33 (S) <i>a</i> 3,30 (M)	[1274] [586]
1,1-Дифторэтан	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{CHF}_2$	<i>a</i> 3,18 (M) <i>a</i> 3,21 (S)	[586] [407]
1,1,1-Трифторэтан	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{CF}_3$	<i>a</i> 3,34 (T) <i>a</i> 3,20 (T) <i>a</i> 3,04 (S)	[1402] [1270] [204]
Гексафторэтан	$\text{F}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{CF}_3$	<i>a</i> 3,96 (T)	[673]
Бензотрифторид	$\text{F}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{C}_6\text{H}_5$	<i>a</i> 0 (T)	[1301]
Этил хлористый	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{CH}_2\text{Cl}$	<i>a</i> 3,7 (T) <i>a</i> 3,69 (M) <i>a</i> 3,69 (S)	[518] [1296] [410]
1,1-Дихлорэтан	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{CHCl}_2$	<i>a</i> 3,75 (T) <i>a</i> 3,75 (S)	[862] [302]
1,1,1-Трихлорэтан	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{CCl}_3$	<i>a</i> 2,7 (T) <i>a</i> 2,8 (S)	[1261] [377]
Этил бромистый	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{CH}_2\text{Br}$	<i>a</i> 3,68 (M)	[430]
Этил иодистый	$\text{H}_3\text{C} \overset{a}{-} \text{CH}_2\text{I}$	<i>a</i> 3,2 (M)	[723]

^{a)} Обозначения (T), (S) и (M) соответствуют величинам потенциальных барьеров, полученным на основе термических данных, данных в области далекой инфракрасной спектроскопии и микроволновой спектроскопии соответственно. В таблице приведены ссылки на оригинальные работы по определению величин барьеров на основе термических данных, однако некоторые значения несколько изменены в целях соответствия более правильным отнесениям колебательных частот или моментов инерции.

термодинамического расчета, весьма грубые для оценки небольших значений потенциальных барьеров, вполне применимы для вычисления высоких потенциальных барьеров.

Кистяковский и Райс [758] определили теплоемкость газообразного диметилацетилена, молекула которого схематически изображена на рис. II.11. Значительное удаление атомов водорода метильных групп друг от друга обеспечивает свободное вращение одной метильной группы относительно другой в этой молекуле. Для молекулы диметилацетилена Кистяковский и Райс [758] получили следующие



Р и с. II.11. Схематическое изображение молекулы диметилацетилена.

значения фундаментальных частот (в см^{-1}) и их мультиплетностей (в скобках): 213 (2), 371 (2), 725 (1), 1029 (2), 1050 (2), 1126 (1), 1380 (2), 1448 (2), 1468 (2), 2270 (1), 2916 (1), 2966 (2), 2976 (3). Изученная молекула содержит 10 атомов и нелинейна, поэтому она обладает $(3 \times 10) - 6 = 24$ колебательными степенями свободы. При отсутствии потенциального барьера каждой степени свободного внутреннего вращения можно приписывать значения энергии и теплоемкости, равные соответственно $E_{\text{вр}} = RT/2$ и $C_{\text{вр}} = R/2 = = 0,994 \text{ кал}/(\text{моль} \cdot ^\circ\text{К})$.

Вклад поступательной и вращательной энергии всей молекулы в теплоемкость диметилацетилена составит $3R$. Полное значение теплоемкости диметилацетилена при $336,07^\circ\text{К}$ будет определяться суммой вкладов, приведенных в табл. II.5.

Таким образом, вычисленное значение $C_p^{336,07}$ диметилацетилена в состоянии идеального газа равно $10,211 \times 1,9873 = 20,29 \text{ кал}/(\text{моль} \cdot ^\circ\text{К})$. Эта величина в пределах ошибок эксперимента согласуется со значением $C_p^\circ = 20,21 \text{ кал}/(\text{моль} \cdot ^\circ\text{К})$, полученным Кистяковским и Райсом, и указывает на наличие заметного свободного вращения метильных групп в молекуле диметилацетилена.

Вандеркуи и Де Врис [1527] измерили теплоемкость газообразного 1,1,1-трифторэтана, молекула которого изображена на рис. II.12 и для температуры 300°К нашли значение C_v , равное $16,83 \pm \pm 0,18 \text{ кал}/(\text{моль} \cdot ^\circ\text{К})$. Нилсен, Классен и Смит [1070] исследовали спектр частот этой молекулы и определили следующие фундаментальные частоты колебаний (в см^{-1}) и их мультиплетности (в скобках): 238 (1), 365 (2), 541 (2), 603 (1), 830 (1), 969 (2), 1232 (2), 1278 (1),

Таблица II 5

$\omega_i, \text{см}^{-1}$	g_i	C°/R
213	2	1,8674
317	2	1,6287
725	1	0,4732
1029	2	0,4862
1050	2	0,5614
1126	1	0,1905
1380	2	0,1905
1448	2	0,1569
1468	2	0,1479
2270	1	0,0057
2916	1	0,0006
2966	2	0,0010
2976	3	0,0014

Вклад колебательной энергии	5,711
Вклад энергии поступательного движения и вращения всей молекулы	3,000
Переход от C_v к C_p	1,000
Вклад энергии внутреннего вращения молекулы	0,500
	10,211

1408 (1), 1443 (2), 2978 (1), 3036 (2). Эта нелинейная молекула содержит восемь атомов и обладает $(3 \times 8) - 6 = 18$ колебательными степенями свободы. Нилсен, Классен и Смит отнесли частоту 238 (1) к частоте крутильных колебаний вокруг связи $\text{C} - \text{C}$. В данном расчете это предположение будет рассмотрено и обсуждено несколько позднее. Остальные вклады в теплоемкость этой молекулы при 300°К приведены в табл. II.6.

Таким образом, C_v равно $7,413 \times 1,9872 = 14,731 \text{ кал}/(\text{моль} \cdot ^\circ\text{К})$. Из сравнения вычисленных и найденных величин следует, что рассчитанное значение меньше экспериментального на величину, равную $16,83 - 14,73 = 2,10 \text{ кал}/(\text{моль} \cdot ^\circ\text{К})$. Эту разность можно рассматривать как вклад в теплоемкость за счет заторможенного вращения групп атомов вокруг центральной связи $\text{C} - \text{C}$ с учетом сил, действующих между ними. Действительно, величина $2,10 \text{ кал}/(\text{моль} \times ^\circ\text{К})$ значительно больше величины $1,782 \text{ кал}/(\text{моль} \cdot ^\circ\text{К})$, рассчитанной для частоты крутильных колебаний, равной 238 см^{-1} , а также более чем в два раза превышает вклад в теплоемкость за счет свободного внутреннего вращения и объясняется взаимодействием групп $-\text{CF}_3$ и $-\text{CH}_3$ в молекуле 1,1,1-трифторэтана.

Таблица II.6

$\omega_i, \text{см}^{-1}$	g_i	C°/R
365	2	1,5590
541	2	1,1788
603	1	0,5265
830	1	0,3074
969	2	0,4200
1232	2	0,1908
1278	1	0,0825
1408	1	0,0527
1443	2	0,0948
2978	1	0,0001
3036	2	0,0002

Вклад колебательных степеней свободы (без крутильных колебаний) 4,413
 Вклад поступательных и вращательных степеней свободы всей молекулы 3,000

 7,413

Поскольку метильная группа вращается относительно группы CF_3 , можно предположить, что при вращении она будет преодолевать

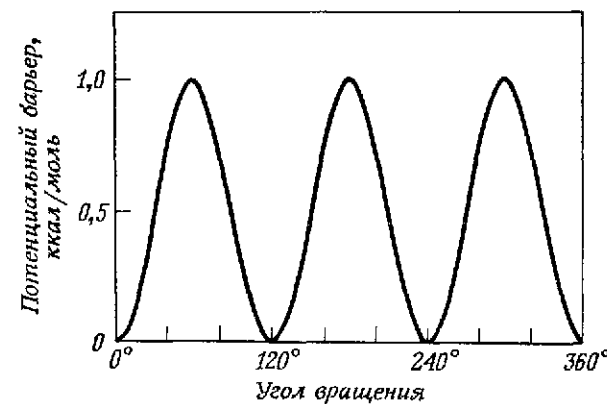
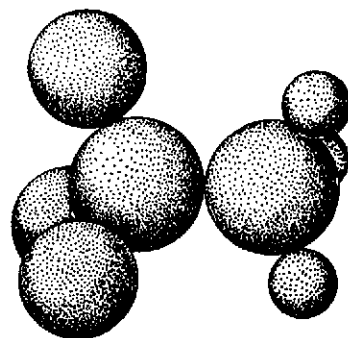


Рис. II.13. Энергия потенциального барьера как функция угла внутреннего вращения.

некоторый косинусоидальный потенциальный барьер V с максимумом вблизи 120° (рис. II.13). Этот пример является частным случаем задачи о вращении симметричного волчка, соединенного с жестким остовом, впервые рассмотренной Питцером и Гвинном [1162]. Питцер и Гвинн разработали общий квантовомеханический подход к этой проблеме с учетом различных значений потенциального барьера



a

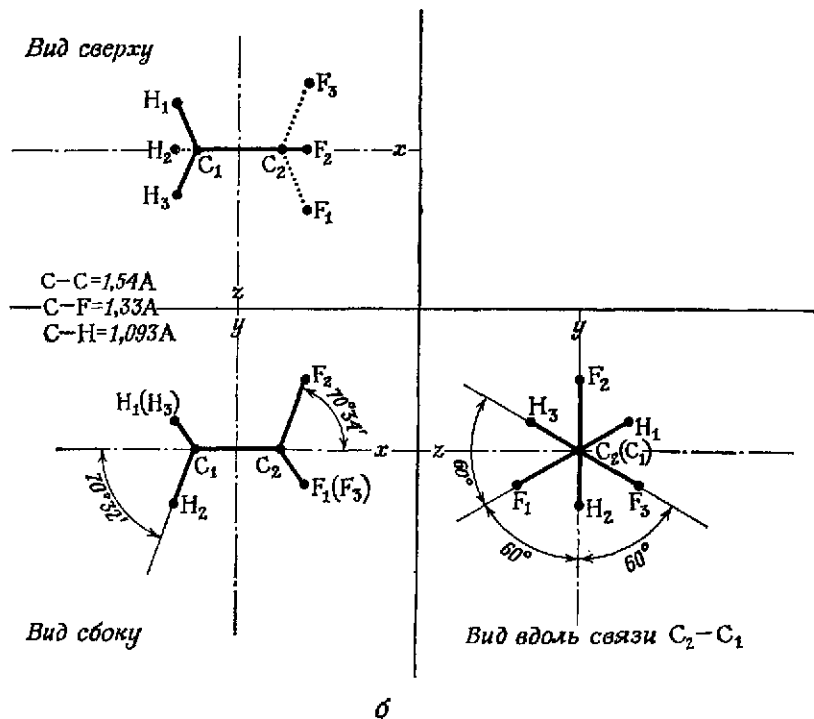


Рис. II.12. Схематическое изображение (a) и ортографическая проекция (б) молекулы 1,1,1-трифторэтана.

и рассчитали вклады такого заторможенного волчка в различные термодинамические функции. Полученные ими значения термодинамических функций приведены в приложении (табл. П.7 — П.10) как функции безразмерных величин (V/RT) и $1/Q_f$, причем

$$\frac{1}{Q_f} = \frac{h\sigma_r}{(8\pi^2 I_r kT)^{1/2}} = \frac{n}{2,7935 \cdot 10^{19} (I_r T)^{1/2}}, \quad (\text{II.11})$$

где Q_f — сумма по состояниям волчка с числом симметрии σ_r , n — число максимумов потенциальной энергии, возникающих при одном полном обороте вращающейся группы, а I_r — приведенный момент инерции двух вращающихся групп А и В*. Если А и В симметричны относительно оси вращения, то

$$\frac{1}{I_r} = \frac{1}{I_A} + \frac{1}{I_B}.$$

Момент инерции I по определению равен сумме произведений вращающихся масс m_i на квадрат кратчайших расстояний центров этих масс d_i от оси вращения:

$$I = \sum m_i (d_i)^2. \quad (\text{II.12})$$

Обычно принято вычислять момент инерции, используя значение межатомных расстояний в единицах Ангстрема ($1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ см}$) и атомные веса, выраженные в граммах на молекулу. Поскольку связи в метильной группе расположены под тетраэдрическими углами ($109^\circ 28'$) и длина связи С — Н равна $1,08 \text{ \AA}$, момент инерции вокруг оси внутреннего вращения будет равен

$$I_{\text{CH}_3} = \frac{3 \times 1,008 (1,08 \sin 71^\circ)^2}{6,023 \times 10^{23} \times 10^{16}} = 5,232 \times 10^{-40} \text{ г-см}^2.$$

Бранд и Ливингстон [161] методом дифракции электронов определили длину связи С — F и $\angle \text{CCF}$ в молекуле 1,1,1-трифторметана; они оказались равны $1,33 \text{ \AA}$ и $111,5^\circ$ соответственно. Используя эти данные, нетрудно вычислить момент инерции группы —CF₃:

$$I_{\text{CF}_3} = \frac{3 \times 19,00 (1,33 \sin 68,5^\circ)^2}{6,023 \times 10^{23} \times 10^{16}} = 144,90 \times 10^{-40} \text{ г-см}^2.$$

Отсюда для приведенного момента инерции находим

$$I_r = \left[\frac{1}{5,232 \times 10^{-40}} + \frac{1}{144,90 \times 10^{-40}} \right]^{-1} = 5,050 \times 10^{-40} \text{ г-см}^2.$$

Подставляя эти значения в выражение (II.11), получим для 300° K

$$\frac{1}{Q_f} = \frac{3}{2,7935 \times 10^{19} (5,050 \times 10^{-40} \times 300)^{1/2}} = 0,2759.$$

* Подробнее об этом см.: И. Н. Годнев, Вычисление термодинамических функций по молекулярным данным, ГОНТИ, М., 1956. — Прим. перев.

В табл. П.7 (см. приложение) величине вклада за счет заторможенного внутреннего вращения, равного $2,10 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}$, соответствует значение V/RT , равное 3,76 или 5,91, и величина потенциального барьера, равная 2242 или 3523 кал/моль . Для окончательного выбора необходимы дополнительные данные, которые были получены Расселом, Голдингом и Иостом [1270] из измерений теплоемкостей при низких температурах. Найденная ими величина потенциального барьера, равная 3450 кал/моль , хорошо согласуется с одним из значений, приведенных выше, а также с величинами потенциального барьера 3290 кал/моль (Нилсен, Классен и Смит [1070]) и 3250 кал/моль (Томпсон и Темпл [1493]).

Питцер [1156] рассмотрел более сложный случай расчета термодинамических свойств несимметричных волчков, связанных с жестким остовом. Приведенные выше таблицы применимы и здесь. Позднее Килпатрик и Питцер [752] предложили методику расчета термодинамических функций для общего случая одного или нескольких волчков любой симметрии. Астон [31] рассмотрел методики расчета для молекул, обладающих некоторой разностью энергии между вращающимися изомерами. Скотт и Мак-Каллох [1317] предложили таблицы таких вкладов в термодинамические функции для ряда изомеров.

В последнее время были разработаны два полезных метода определения величин барьеров внутреннего вращения. Так, Лин и Сьюлен [875] рассмотрели применение микроволновой спектроскопии к проблемам внутреннего вращения. Фатели и Миллер [407, 408, 410] разработали теорию и предложили практический метод расчета барьеров на основании данных инфракрасной спектроскопии.

Вулф [1632] предложил метод определения высоты барьеров в потенциальных функциях, препятствующих внутреннему вращению метильных групп, или, другими словами, спектроскопически неактивных колебательных частот на основании только термических данных для твердой фазы. Он показал, что величины потенциальных барьеров, найденные этим методом, согласуются со значениями, рассчитанными из сравнения энтропий в газовой фазе, и могут быть получены с большей точностью.

Величины потенциальных барьеров для некоторых классов органических соединений приведены в табл. II.4. Данные для большинства изученных молекул получены методами термохимии и спектроскопии. Как видно, найденные разными методами величины потенциальных барьеров, за исключением данных для уксусной кислоты и метилнитрата, хорошо согласуются друг с другом.

Ряд других методов расчета вкладов заторможенного вращения в термодинамические функции был предложен Прайсом [1186], Уилсоном [1620] и Халфордом [563].

Оценка теплоемкости газов по эмпирическим и полуэмпирическим формулам для тех случаев, когда не хватает экспериментальных данных, описана в гл. VI.

Уравнения теплоемкости

Поскольку данные по теплоемкостям являются основой для многих термических и термохимических расчетов, полезно представить их в наиболее удобном для расчетов виде. Температурная зависимость теплоемкости сложна, поэтому в настоящее время не существует «наилучшего» математического выражения, описывающего такую зависимость. В ограниченном интервале температур теплоемкость любой фазы можно представить адекватно в виде

$$C_p = a + bT + cT^2, \quad (\text{II.13})$$

где a , b и c — эмпирические константы. Эмпирические коэффициенты параболического уравнения (II.13) легко определить, подставляя

Таблица II.7

Теплоемкость *n*-бутана ^{a)}

T, °K	C _p
298,15	23,29
300	23,40
400	29,60
500	35,34
600	40,30

^{a)} Данные Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Виментста [1248] [кал/(моль °K)]

в это уравнение экспериментальные значения теплоемкостей при трех температурах (T_1, C_{p1}) (T_2, C_{p2}) и (T_3, C_{p3}) и решая систему трех уравнений с тремя неизвестными. В таком случае имеем

$$\frac{C_{p1}}{(T_1 - T_2)(T_1 - T_3)} + \frac{C_{p2}}{(T_2 - T_1)(T_2 - T_3)} + \frac{C_{p3}}{(T_3 - T_2)(T_3 - T_1)} = c,$$

$$\frac{C_{p1} - C_{p2}}{T_1 - T_2} [-(T_1 - T_2)c] = b$$

и

$$(C_{p1} - bT_1) - c(T_1)^2 = a.$$

Подставив в эти уравнения приведенные в табл. II.7 экспериментальные значения теплоемкости бутана при трех температурах,

лучим

$$T_1 = 300, \quad C_{p1} = 23,40,$$

$$T_2 = 400, \quad C_{p2} = 29,60,$$

$$T_3 = 500, \quad C_{p3} = 35,34.$$

$$\frac{23,40}{100 \times 200} + \frac{29,60}{100 \times (-100)} + \frac{35,34}{100 \times 200} = -0,000023 = c,$$

$$\frac{23,40 - 29,60}{300 - 400} \times [-(300 + 400)(-0,000023)] = 0,0781 = b,$$

$$(23,40 - 23,43) + 2,07 = 2,04 = a,$$

откуда

$$C_p = 2,04 + 0,0781T - 0,000023T^2.$$

Проверка (при 400° K):

$$C_p = a + bT + cT^2 = 2,04 + 31,24 - 3,68 = 29,60 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}.$$

Параболическая зависимость такого типа используется как при интерполяции экспериментальных данных (особенно сглаженных значений теплоемкости для ряда последовательных значений температур), так и для интегрирования. Обе операции можно легко выполнить на обычной счетной машине. Исходя из теоретических соображений, Бернштейн [116] показал, что теплоемкость газообразных веществ лучше описывается эмпирической зависимостью типа

$$C_p = a' + b'T^{-1} + c'T^{-2}, \quad (\text{II.14})$$

где a' , b' и c' — эмпирические константы, отличающиеся от соответствующих констант в выражении (II.13). Наиболее удобным для описания зависимости теплоемкостей от температуры всех фаз, особенно выше 300° K, оказалось выражение

$$C_p = a'' + b''T + c''T^{-2}, \quad (\text{II.15})$$

Простая единообразная математическая запись таких уравнений значительно упрощает операции сложения, вычитания и интегрирования. Кроме того, некоторые члены этих уравнений удобнее других при использовании эмпирических уравнений теплоемкостей в расчете энергий Гиббса. В настоящей книге для удобства данные по теплоемкостям, обработанные методами, описание которых дано в гл. VIII, приведены в виде таблиц.

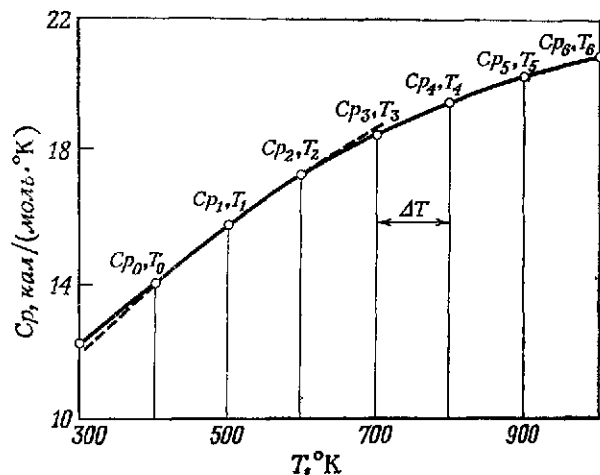
Энтальпия

Энтальпия, обозначаемая буквой H и определяемая соотношением $H = E + PV$, используется для решения многих теоретических и практических задач. Подобно энергии, энтальпия является термодинамической функцией состояния системы. Абсолютное значение энтальпии определить нельзя, поскольку оно включает абсолютную величину внутренней энергии. Часто припи-

Начиная интегрирование с температуры T_0 , получим

$$H_{T_2} - H_{T_0} = \frac{\Delta T}{3} [C_{p0} + 4C_{p1} + C_{p2}]. \quad (\text{II.20})$$

Обычно часть кривой зависимости теплоемкости газообразного вещества от температуры в некотором интервале температур ΔT можно аппроксимировать прямой линией, что позволяет непосредственно



Р и с. II.14. Применение правила парабол Симпсона для интегрирования теплоемкостей.

рассчитать величину ΔH для этого интервала температур. Например, выбирая некоторый интервал температур $T_1 - T_0$, рассчитываем для него значение $(H_{T_1} - H_{T_0})$ и, вычитая полученное значение из выражения (II.20), находим величину $(H_{T_2} - H_{T_1})$ и т. д. Проиллюстрируем рассмотренный графический метод расчета изменения энтальпии на примере бутана, значения теплоемкости которого приведены в табл. II.7. Изменение энтальпии бутана в интервале температур от 298,15 до 300° К составляет $1,85 \times (23,29 + 23,40)/2 = 43$ кал/моль; предполагая, что теплоемкость в интервале температур от 300 до 400° К изменяется линейно, получим

$$H_{400} - H_{300} = 100 \times (23,40 + 26,60)/2 = 2650 \text{ кал/моль.}$$

Подставляя соответствующие значения C_p в выражение (II.19), для удвоенного интервала температур находим

$$H_{500} - H_{300} = 100 \frac{[23,40 + 4(29,60) + 35,34]}{3} = 5907 \text{ кал/моль,}$$

откуда

$$H_{600} - H_{400} = 5907 - 2650 = 3257 \text{ кал/моль.}$$

Для следующего удвоенного интервала температур получим

$$H_{800} - H_{400} = 100 \frac{[29,60 + 4(35,34) + 40,30]}{3} = 7042 \text{ кал/моль.}$$

Следовательно,

$$H_{600} - H_{500} = 7042 - 3257 = 3785 \text{ кал/моль.}$$

Уменьшение интервала температур ΔT повышает точность этого метода. При отсутствии линейного изменения теплоемкости от температуры в интервале 300—400° К отвечающие этому интервалу температур значения изменений энтальпии можно рассчитать, используя интервалы в 50°. Это потребует единственного дополнительного табличного значения C_p при 350° К.

Для удобства интерполяции вместо величин изменения энтальпии в таблицах часто приводят значения функции энтальпии

$$(H_T - H_0)/T \quad \text{или} \quad (H_T - H_{298})/T.$$

Изменение энтальпии в химических реакциях и методы ее определения рассмотрены в следующей главе.

Энтальпия фазовых переходов

При повышении температуры кристаллического твердого вещества происходит увеличение амплитуды колебаний атомов в решетке. В результате этого кристаллическая решетка вещества становится неустойчивой и при более или менее постоянной температуре переходит в другую более устойчивую модификацию с поглощением некоторого количества тепла. Эта температура обычно называется температурой фазового перехода T_t , а тепло, поглощаемое при постоянном давлении, называется энтальпией фазового перехода ΔH_t . В настоящее время не существует адекватной общей теории фазовых переходов, хотя различные типы фазовых переходов были обнаружены более чем для одной трети органических соединений, подробно изученных органическими методами. Так, Дэффет [319] приводит около 1200 органических соединений, у которых с помощью различных экспериментальных методов обнаружено явление полиморфизма. Полиморфные формы можно подразделить на два типа: а) кристаллические структуры, обладающие различной упаковкой молекул в решетке, и б) структуры, обладающие различной конформацией и ориентацией молекул в узлах решетки. Молекулярный и макроскопический подходы к явлению полиморфизма органических соединений, а также классификация типов фазовых переходов были рассмотрены Вестрамом и Мак-Каллохом [1598].

Большинство кристаллических твердых веществ плавится при определенной температуре, поскольку при этой температуре термическая энергия, сообщаемая кристаллическому веществу, превышает энергию связей молекул в кристалле, в результате чего твердое вещество превращается в жидкость. В том случае, когда давление равно 1 атм, эта температура называется точкой плавления T_m , — тепло, связанное с этим превращением, — энтальпией плавления

ΔH_m . Если кристаллы плавящегося вещества находятся в равновесии только с жидкой и газообразной формами чистого вещества при давлении его насыщенного пара, то такая равновесная температура называется тройной точкой $T_{тр}$.

Обычно энтальпии фазовых переходов и энтальпии плавления непосредственно определяются методами адиабатной калориметрии или рассчитываются через энтропию на основании третьего закона (глава IV), тем не менее полезные результаты часто можно получить с помощью других методов. Например, энтальпия плавления вещества может быть найдена по понижению его температуры плавления при добавлении растворенного вещества, смешивающегося только с жидкой фазой исследуемого вещества.

Для систем, подчиняющихся законам идеальных бинарных растворов, энтальпия (ΔH_m) и температуры плавления чистого растворителя (T_m) и раствора (T) связаны соотношением *

$$\log N_1 = \frac{\Delta H_m}{2,3026R} \left(\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T} \right), \quad (\text{II.21})$$

которое легко можно получить из условия равенства химических потенциалов вещества в состоянии равновесия. Например, чистый мономер стирола, плавящийся при $242,52^\circ \text{K}$, при добавлении 0,0375-мольной доли бензола образует идеальный раствор, замерзающий при температуре $240,84^\circ \text{K}$. Подставляя эти величины в выражение (II.21), получим

$$-0,01660 = \frac{\Delta H_m}{4,576} \left(\frac{1}{242,52} - \frac{1}{240,84} \right).$$

Найденная отсюда величина ΔH_m , равная 2640 кал/моль , согласуется с калориметрическим значением 2630 кал/моль , полученным Бриккелем [168]. В этом случае совпадение величин ΔH_m , найденных методом понижения температуры идеального бинарного раствора и калориметрически, является хорошим. Однако если изучаемая система не подчиняется законам идеальных растворов, то расхождение между двумя величинами теплот может быть значительным. Полученные результаты могут быть также искажены за счет частичной растворимости растворенного вещества в твердой фазе.

Для расчета температурной зависимости ΔH_t и ΔH_m при постоянном давлении можно использовать уравнение Кирхгофа (III.3)

$$\left(\frac{\partial \Delta H_m}{\partial T} \right)_P = C_p(l) - C_p(s) = \Delta C_{mp},$$

* Для разбавленных растворов (мольная доля растворенного вещества N_2 мала) обычно полагают, что ΔH_m не зависит от концентрации раствора. Это допущение позволяет использовать уравнение Клапейрона — Клаузиуса в сочетании с законом Рауля для расчета энтальпий плавления и кипения чистых веществ. — Прим. перев.

которое рассматривается в гл. III. Тем не менее в общем случае, когда температура и объем могут изменяться, уравнение

$$\frac{d\Delta H_m}{dT} = \Delta C_{mp} + \frac{\Delta H_m}{T}$$

лучше описывает температурную зависимость энтальпии плавления. Если не учитывать последний член, то это может внести ошибку определение ΔC_{mp} , по величине превышающую 40% вклада, который дает температурный коэффициент приведенного уравнения.

Энтальпия испарения

Давление пара, находящегося в равновесии с жидкостью, увеличивается с ростом температуры. При давлении пара, равном 1 атм , жидкость закипает и полностью переходит в пар с поглощением

энтальпии испарения ΔH_v при температуре T_b , называемой нормальной точкой кипения. Жидкость в замкнутом сосуде можно нагреть выше T_b вплоть до критической температуры T_c . При этой температуре две фазы вещества, находящиеся в термодинамическом равновесии, будут тождественными по своим физическим свойствам, и величина ΔH_v становится равной нулю *. В табл. II.8 приведены значения энтальпии испарения бензола. Графическая зависимость $\Delta H_v = f(T)$ показана на рис. II.15. Следует отметить резкое уменьшение величины ΔH_v при приближении системы к критическому состоянию.

Соотношение, описывающее динамическое равновесие между газовой и конденсированной фазами чистого вещества, впервые было получено Клапейроном в виде

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\Delta H_v}{T\Delta V}, \quad (\text{II.22})$$

где ΔH_v — энтальпия испарения, а ΔV — разность объемов газообразной и конденсированной фаз. Если конденсированная фаза — твердое вещество, то изменение энтальпии рассматриваемого процес-

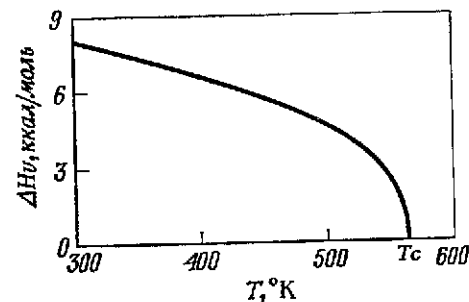


Рис. II.15. Энтальпия испарения бензола.

* Точка на кривой фазового равновесия, отвечающая T_c , называется критической точкой и характеризуется критическим давлением P_c , критической температурой T_c , критическим объемом V_c или критической плотностью ρ_c . — Прим. перев.

Таблица II.8

Энтальпия испарения бензола [426, 1089, 1248]
 $T_c = 562,65^\circ \text{K}$, $P_c = 48,7 \text{ атм}$

P_r	ΔH_v , кал/моль	T_r	P_r	ΔH_v , кал/моль	T_r
0,0004801	8416	0,4736	0,1144	6248	0,7501
0,0006674	8354	0,4835	0,1274	6149	0,7599
0,0009123	8291	0,4934	0,1427	6049	0,7698
0,001229	8228	0,5032	0,1586	5947	0,7797
0,001633	8164	0,5131	0,1755	5844	0,7896
0,002142	8100	0,5230	0,1941	5739	0,7994
0,002772	8035	0,5329	0,2143	5632	0,8093
0,003550	7969	0,5427	0,2361	5523	0,8192
0,004495	7902	0,5526	0,2589	5411	0,8291
0,005649	7833	0,5625	0,2831	5295	0,8389
0,007019	7763	0,5723	0,3088	5174	0,8488
0,008651	7692	0,5822	0,3374	5047	0,8587
0,01057	7619	0,5921	0,3683	4914	0,8686
0,01282	7545	0,6020	0,4000	4774	0,8784
0,01543	7470	0,6118	0,4338	4627	0,8883
0,01844	7393	0,6217	0,4705	4472	0,8982
0,02194	7314	0,6316	0,5089	4308	0,9081
0,02584	7233	0,6415	0,5497	4133	0,9179
0,03036	7151	0,6513	0,5937	3944	0,9278
0,03528	7068	0,6612	0,6394	3736	0,9377
0,04077	6983	0,6711	0,6896	3502	0,9475
0,04709	6896	0,6810	0,7415	3232	0,9574
0,05400	6807	0,6908	0,7967	2911	0,9673
0,06201	6717	0,7007	0,8539	2515	0,9772
0,07031	6626	0,7106	0,9144	2001	0,9870
0,08008	6534	0,7204	0,9786	1275	0,9969
0,09047	6440	0,7303	1,0000	0	1,0000
0,1022	6345	0,7402			

са будет равно энтальпии сублимации ΔH_s . В первом приближении при постоянной температуре

$$\Delta H_s = \Delta H_m + \Delta H_v. \quad (\text{II.23})$$

При низких давлениях можно пренебречь объемом конденсированной фазы по сравнению с объемом пара и использовать закон идеальных газов. После подстановки величины $V = RT/P$ в уравнение (II.22) и соответствующих преобразований получим уравнение Клаузиуса — Клапейрона

$$\frac{dP}{P dT} = \frac{\Delta H_v}{RT^2}. \quad (\text{II.24})$$

Это уравнение можно представить в виде

$$-R \frac{d(\ln P)}{d(1/T)} = \Delta H_v. \quad (\text{II.25})$$

При небольших изменениях температуры и давления отношение dP/dT можно заменить на $\Delta P/\Delta T$; в этом случае значения \bar{P} и \bar{T} будут соответствовать некоторым средним значениям давления и температуры в интервале ΔP и ΔT . Сделав такую замену в уравнении (II.24), получим

$$\frac{RT^2 \Delta P}{\bar{P} \Delta T} = \Delta H_v. \quad (\text{II.26})$$

Тиммерманс [1501] приводит значение T_m для фенола, равное $313,90^\circ \text{K}$; Бидискомб и Мартин [129] измерили давление пара жидкого и твердого фенола. Поскольку давление пара жидкого фенола определяли в интервале температур $394\text{--}455^\circ \text{K}$, экстраполяция полученного авторами [129] уравнения Антуана (I.12) к температуре плавления фенола приводит к занижению экстраполированных величин по сравнению с давлением пара, измеренным над твердым фенолом, на величину около $0,06 \text{ мм рт. ст.}$ Введение небольшой поправки в коэффициент уравнения Антуана приводит к совпадению давлений паров твердого и жидкого фенола в тройной точке. Полученные в работе Бидискомба и Мартина [129] величины давлений пара твердого и жидкого фенола с соответствующей поправкой приведены в табл. II.9. Подстановка этих величин в уравнение (II.26) позволяет

Таблица II.9

T , °K	P , мм рт. ст.	
311,15	1,0907	} Твердая фаза
313,15	1,2920	
314,15	1,4146	} Жидкая фаза
316,15	1,6320	

рассчитать энтальпии сублимации и испарения фенола при соответствующих средних температурах 312,15 и 315,15° К:

$$\Delta H_s = \frac{1,9872 \times 0,2013 \times (312,15)^2}{1,4913 \times 2,00} = 16\,379 \text{ кал/моль},$$

$$\Delta H_v = \frac{1,9872 \times 0,2174 \times (315,15)^2}{1,5233 \times 2,00} = 14\,083 \text{ кал/моль}.$$

Подставляя найденные величины ΔH_s и ΔH_v в выражение (II.23), получим энтальпию плавления фенола

$$\Delta H_m = 16\,379 - 14\,083 = 2296 \text{ кал/моль}.$$

Эту величину можно сравнить со значением 2530 кал/моль, полученным Тиммермансом [1503] криоскопическим методом, а также с величиной 2752 кал/моль, определенной калориметрически Андоном, Коупселом, Херингтоном и Маргином [19].

Трутон [1518] предложил грубое эмпирическое соотношение между нормальными температурами кипения жидкостей и их энтальпиями испарения

$$\frac{\Delta H_v}{T_b} = 21 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°К)}.$$

Это соотношение применимо к неполярным жидкостям, не образующим ассоциированных молекул в газовой фазе. Общий метод расчета энтальпий испарения, основанный на предположении о том, что молекулы вещества, находящиеся в некотором одинаковом приведенном состоянии, обладают одинаковыми свойствами, был разработан Отмером [1093]. Согласно этому методу, выбирается некоторое стандартное вещество (обозначенное звездочкой), для которого известны энтальпия испарения как функция температуры, критическая температура (T_c) и критическое давление (P_c). Из соотношения

$$\Delta H_v = \Delta H_v^* \cdot \frac{T_c \log Pr}{T_c^* \log Pr^*} \quad (\text{II.27})$$

вычисляется энтальпия испарения другого вещества для приведенной температуры $Tr = T/T_c$. Например, если выбрать бензол в качестве стандартного вещества, нетрудно рассчитать энтальпию испарения фтористого бензола при 357,89° К (нормальная точка кипения). Доуслин, Мур, Доусон и Уаддингтон [343] приводят для фтористого бензола следующие критические константы: $T_c = 560,07^\circ \text{ К}$ и $P_c = 44,91 \text{ атм}$, откуда $Tr = 0,6390$ и $Pr = 0,02227$. Для бензола: $T_c^* = 562,65^\circ \text{ К}$, $P_c^* = 48,7 \text{ атм}$ и $Tr^* = 0,6390$, откуда $\Delta H_v^* = 7253 \text{ кал/моль}$ и $Pr^* = 0,02432$. Подставляя приведенные величины в уравнение (II.27), получим

$$\Delta H_v = \frac{7253 \times 560,07 \times \log 0,02227}{562,65 \times \log 0,02432} = 7391 \text{ кал/моль}.$$

рассчитанное значение ΔH_v примерно на 1% меньше величины 7391 кал/моль, определенной Скоттом, Мак-Каллохом, Гудом, Мессерли, Пеннингтоном, Кипхеллоу, Хоссенлоппом, Доуслином и Уаддингтоном [1318]. Применение правила Трутона дает $\Delta H_v = 21 \times 357,89 = 7515 \text{ кал/моль}$, величину, менее чем на 1% превышающую расчетную.

Скотт и сотр. [1318] приводят для фтористого бензола следующее уравнение Антуана:

$$\lg P \text{ (мм)} = 6,95208 - \frac{1248,083}{t + 221,827}.$$

Из этого уравнения получаем

$T, ^\circ \text{К}$	356,82	357,89	358,95
$P, \text{мм}$	735	760	785

Подстановка этих значений в уравнение Клаузиуса — Клапейрона (II.26) дает

$$\Delta H_v = \frac{50 \times (357,89)^2 \times 7,9872}{760 \times (358,95 - 356,82)} = 7860 \text{ кал/моль}.$$

Это значение более чем на 5% превышает измеренную величину энтальпии испарения. Расхождение объясняется приближениями, которые используются при выводе уравнения Клаузиуса — Клапейрона.

Более точное значение энтальпии испарения можно найти из уравнения

$$\Delta H_v = \frac{RT^2}{P} \left(\frac{dP}{dT} \right) \left[1 - \frac{T_c^3 P}{T^3 P_c} \right]^{1/2}, \quad (\text{II.28})$$

впервые полученного Хаггенмазером [560] из уравнения (II.24) с учетом фактора сжимаемости (в скобках). Дифференцирование уравнения Антуана (I.12) приводит к следующему выражению:

$$\frac{dP}{dT} = \frac{2,303BP}{(T+C-273,15)^2}, \quad (\text{II.29})$$

где температура T выражена в градусах Кельвина.

Комбинируя выражения (II.28) и (II.29), получим

$$\Delta H_v = \frac{4,5757T^2 B}{(T+C-273,15)^2} \left[1 - \frac{T_c^3 P}{T^3 P_c} \right]^{1/2}. \quad (\text{II.30})$$

Подставляя в это уравнение данные для фтористого бензола при 357,89° К, находим

$$\Delta H_v = \frac{4,5757 \times (357,89)^2 \times 1248,083}{(357,89 + 221,83 - 273,15)^2} \left[1 - \frac{(560,07)^3 \times 1,00}{(357,89)^3 \times 44,91} \right]^{1/2} = 7443 \text{ кал/моль}.$$

Таким образом, вычисленное значение ΔH_v находится в хорошем соответствии с измеренной величиной.

Методы экспериментального определения энтальпии испарения были описаны в этой главе ранее. В табл. II.10 приведены значения

Таблица II.10
Энтальпия испарения гептана^{a)}

P , мм рт. ст.	T , °К	Номер опыта	ΔH_v , кал/моль	
			опыт	расчет по уравне- нию Кла- пейрона
597,7	363,63	3	7715±2	7734
391,2	350,48	3	7938±5	7945
195,2	331,21	4	8244±2	8245

^{a)} Данные Уаддингтона, Тодда и Хаффмана [1552]

энтальпии испарения гептана, полученные Уаддингтоном, Тоддом и Хаффманом [1552] в проточном калориметре. Там же для сравнения приведены величины ΔH_v , рассчитанные по уравнению Клапейрона (II.22) с учетом объемов газовой фазы, найденных из уравнения состояния, и объемов жидкости, полученных из измерения плотностей жидкой фазы.

Для идеальных газов общая производная энтальпии испарения по температуре вдоль кривой насыщения в результате исчезновения ряда членов уравнения близка к величине

$$\frac{\Delta H_v}{T} = \Delta C_{vp}.$$

Соответствующая производная для реального газа была получена Глестеном [492].

Тепло, выделяющееся или поглощающееся при образовании соединения из элементов в результате различных химических реакций, называется энтальпией (теплотой) образования и обозначается символом ΔH_f . Данные по теплотам образования необходимы при проектировании новых и совершенствовании уже действующих химических производств, а также для оценки теплотворной способности различных видов ракетных топлив и топлив для двигателей внутреннего сгорания. В современной химической технологии точные значения энтальпии образования важны для решения вопроса о возможности самопроизвольного протекания той или иной реакции в заданных условиях и определения численных значений констант равновесия. Знание энтальпий образования важно для решения ряда теоретических проблем, связанных с определением энергии связи, резонансной энергии и природы химической связи. Поэтому не удивительно, что в этом столетии определению теплот образования химических соединений уделялось значительное внимание*.

Следует, однако, отметить, что многие из имеющихся в настоящее время данных часто недостаточно надежны для точных термохимических расчетов. Авторы первых термохимических работ, как правило, не указывали чистоту используемых в опытах веществ, а неполное описание калориметрических методик в значительной степени затрудняет введение в полученные результаты соответствующих поправок, которые весьма существенны. Следует также отметить, что отсутствие общепринятых стандартных веществ затрудняло сравнение точности результатов, полученных в разных лабораториях. В качестве примера можно привести положение, сложившееся в термохимии галоген- и серусодержащих соединений, которое только отчасти было улучшено за последнее время. Таким образом, сейчас весьма сложно провести обработку полученных ранее значений энтальпии образования, которые часто могут быть использованы только как грубые оценочные величины. В качестве примера интересно сравнить

* В советской литературе вопросы термохимии различных классов органических соединений подробно рассмотрены в книге: С. М. Скуратов, В. П. Колесов, А. Ф. Воробьев, Термохимия, ч. II, Изд-во МГУ, М., 1966.— Прим. перев.

значения энтальпий образования, предложенные Парксом и Хаффманом в 1932 г. [1105], с современными величинами [1248]. Для газообразного этана Паркс и Хаффман [1105] приводят величину $\Delta H_f^\circ = -23\,460$ кал/моль; в настоящее время принята $\Delta H_f^\circ = -20\,236$ кал/моль. Для газообразного пропилена эти авторы [1105] приводят значение $\Delta H_f^\circ = 4550$ кал/моль; современное значение равно 4879 кал/моль. В первом случае имеется серьезное расхождение в энтальпии образования, равное около 3000 кал/моль, во втором случае совпадение значительно лучше. Следует отметить, что в обоих случаях в качестве исходных данных были использованы теплоты сгорания, полученные экспериментально Томсенем [1495].

С развитием химии переработки нефти потребовались более точные и надежные данные о термодинамических свойствах углеводородов. За последние годы были сделаны большие успехи в определении термодинамических свойств этих соединений*. Точно определенные энтальпии образования углеводородов оказались весьма ценной основой для рассмотрения термохимических величин других классов органических соединений. Некоторые термохимические закономерности, обнаруженные в рядах углеводородов, могут быть использованы для оценки термодинамических величин сходных по составу и строению кислород-, азот-, галоген- и серосодержащих органических соединений, а также для анализа несогласованности и ошибок в экспериментальных данных, опубликованных разными авторами.

Энтальпия реакции

Если реакция образования соединения из элементов сопровождается выделением тепла из системы в окружающую среду, то энтальпии образования этого соединения ΔH_f , согласно принятому соглашению, приписывают отрицательный знак. И наоборот, если система поглощает тепло из окружающей среды, энтальпии образования соединения из элементов обычно приписывают положительный знак. Для полного энергетического описания реакции необходимо учитывать температуру и агрегатное состояние исходных и конечных веществ. Согласно международному соглашению, энтальпии элементов в их стандартном состоянии (ΔH_f°) при всех температурах приняты равными нулю. В табл. III.1 приведены энтальпии образования из элементов некоторых важных соединений.

В 1840 г. Г. И. Гесс [592] показал, что энтальпия реакции — аддитивная величина и не зависит от промежуточных стадий реак-

* В СССР систематические исследования по термодинамике различных типов углеводородов (парафинов, олефинов, ароматических и нафтеновых углеводородов) были начаты в 40-х годах в Государственном институте высоких давлений под руководством А. В. Фроста и А. А. Введенского. См., например: А. В. Фрост, Избранные труды, т. I, Изд-во МГУ, М., 1960; А. А. Введенский, Термодинамические расчеты нефтехимических процессов, Гостехиздат, 1960. — Прим. перев.

Таблица III.1

Энтальпии образования

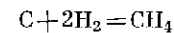
Реакции	ΔH_f° , ккал/моль	Литература
$C(\text{graphite}) + \frac{1}{2} O_2(g) = CO(g)$	-26,416	[1249]
$C(\text{graphite}) + O_2(g) = CO_2(g)$	-94,052	[1249]
$H_2(g) + \frac{1}{2} O_2(g) = H_2O(l)$	-68,317	[1249]
$\frac{1}{2} H_2(g) + \frac{1}{2} Cl_2(g) = HCl(g)$	-22,063	} -39,885 [1249]
$HCl(g) + 600H_2O(l) = HCl \cdot 600H_2O(l)$	-17,822	
$\frac{1}{2} H_2(g) + \frac{1}{2} Br_2(l) = HBr(g)$	-8,66	} -28,775 [1249]
$HBr(g) + 600H_2O(l) = HBr \cdot 600H_2O(l)$	-20,115	
$\frac{1}{2} H_2(g) + \frac{1}{2} F_2(g) = HF(g)$	-64,92	} -77,03 [833]
$HF(g) + 50H_2O(l) = HF \cdot 50H_2O(l)$	-12,11	
$S(\text{rhombic}) + \frac{3}{2} O_2(g) = SO_3(g)$	-94,45	} -212,20 [1249]
$SO_3(g) + H_2(g) + \frac{1}{2} O_2(g) + 115H_2O(l) = H_2SO_4 \cdot 115H_2O(l)$	-117,75	

ции, а зависит лишь от начального и конечного состояния системы. Этот закон позволяет определить изменение энтальпии реакции ΔHr , так как по определению

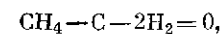
$$\Delta Hr^\circ = \sum \nu_i H_i^\circ,$$

где ν_i — число молей каждого вещества, участвующего в химической реакции (т. е. стехиометрический коэффициент в уравнении данной реакции). Важно подчеркнуть, что число ν_i положительно для продуктов реакции и отрицательно для исходных веществ*. Вводя

* Если бы формулы записи химических уравнений определяли математики, а не химики, то реакцию



они, вероятно, записали бы в виде



или в более общем виде

$$\sum \nu_i \mathcal{S}_i = 0,$$

где ν_i — стехиометрический коэффициент, смысл которого определен выше, а \mathcal{S}_i — некоторая величина, соответствующая молю i -го вещества.

понятие энтальпии образования, запишем приведенное выше выражение в виде

$$\Delta H_r^\circ = \sum \nu_i \Delta H_{f_i}^\circ \quad (\text{III.1})$$

Рассчитаем с помощью этого выражения изменение энтальпии реакции этерификации при 298° К, используя в качестве исходных данных

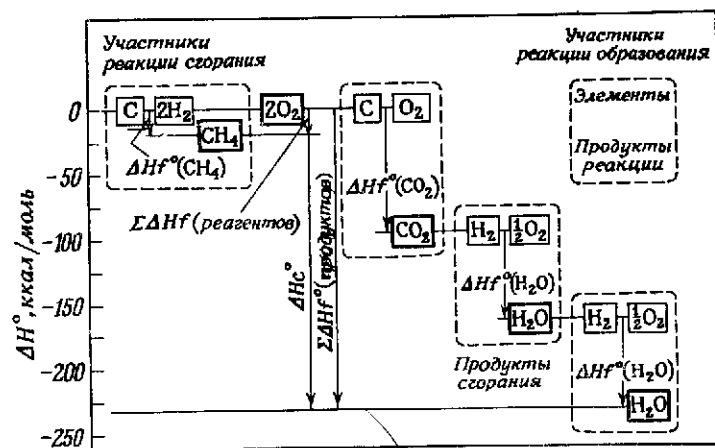
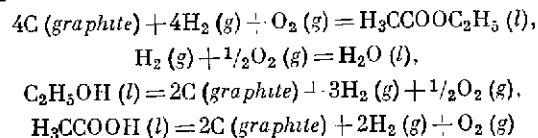


Рис. III.1. Схема расчета энтальпии образования метана по энтальпии сгорания.

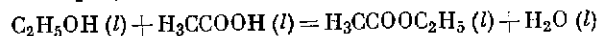
следующие энтальпии образования (в ккал/моль):

$$\begin{aligned} \text{C}_2\text{H}_5\text{OH} (l) &= -66,4, & \text{H}_3\text{CCOOH} (l) &= -116,0, \\ \text{H}_3\text{CCOOC}_2\text{H}_5 (l) &= -115,1 & \text{H}_2\text{O} (l) &= -68,3. \end{aligned}$$

Запишем уравнения реакций образования и распада веществ, участвующих в реакции этерификации, следующим образом:



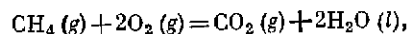
Для реакции этерификации



получим

$$\Delta H_r^\circ = -115,1 - 68,3 + 66,4 + 116,0 = -1,0 \text{ ккал.}$$

Энтальпии образования при 298° К можно также рассчитать из данных по энтальпиям сгорания (ΔH_c). Например, для реакции



участники которой находятся в стандартных состояниях, $\Delta H_c^\circ = -212,797 \text{ ккал/моль}$. Подставляя в выражение (III.1) соответствующие значения ΔH_f° для $\text{CO}_2 (g)$ и $\text{H}_2\text{O} (l)$ из табл. III.1, находим

$$-212,797 = -94,052 + 2(-68,317) - [\Delta H_f^\circ \text{CH}_4 + 2(0)],$$

где ноль соответствует энтальпии образования газообразного кислорода. Решая это уравнение, получим энтальпию образования метана при 298° К, равную $-17,889 \text{ ккал/моль}$. Подробная схема вычисления энтальпии образования метана по данным энтальпий образования и сгорания исходных веществ приведена на рис. III.1.

Зависимость энтальпии реакции от температуры

При решении термодинамических задач часто возникает необходимость рассчитать энтальпию реакции при различных температурах. Пусть при температуре T_1 величина энтальпии реакции известна и равна ΔH_{rT_1} , но реакция протекает с достаточной скоростью при температуре T_2 . Нагреем реагирующие вещества от температуры T_1 до температуры T_2 и проведем реакцию при температуре T_2 . Энтальпия реакции при этой температуре будет равна ΔH_{rT_2} . Тогда, учитывая соотношение (III.1), получим

$$\Delta H_{rT_2} - \Delta H_{rT_1} = \sum \nu_i [\Delta H_{fT_2} - \Delta H_{fT_1}]_i, \quad (\text{III.2})$$

где значение $[\Delta H_{fT_2} - \Delta H_{fT_1}]$ соответствует изменению энтальпий веществ за счет изменения их теплоемкостей в интервале температур $T_1 - T_2$. Используя определение теплоемкости при постоянном давлении [уравнение (II.3)], нетрудно представить уравнение (III.2) в виде

$$\Delta H_{rT_2} - \Delta H_{rT_1} = \sum \nu_i \int_{T_1}^{T_2} C_{p_i} dT.$$

Учитывая, что $\sum \nu_i C_{p_i} = \Delta C_p$, полученное выражение можно записать в более компактной форме

$$\Delta H_{rT_2} = \Delta H_{rT_1} + \int_{T_1}^{T_2} \Delta C_p dT. \quad (\text{III.3})$$

Уравнение (III.3) впервые было получено Г. Р. Кирхгофом в 1858 г. и названо его именем.

Представив зависимости теплоемкости реагирующих веществ и продуктов реакции от температуры в виде уравнений (II.13), зависимость ΔC_p от T в уравнении (III.3) можно заменить следующим образом:

$$\Delta C_p = \sum \nu_i (a + bT + cT^2)_i = \Delta a + \Delta bT + \Delta cT^2. \quad (\text{III.4})$$

В таком случае интегрирование выражения (III.3) дает

$$\Delta H_{r_{T_2}} = \Delta H_{r_{T_1}} + \Delta a (T_2 - T_1) + \frac{\Delta b}{2} (T_2^2 - T_1^2) + \frac{\Delta c}{3} (T_2^3 - T_1^3).$$

Подставляя зависимости теплоемкостей исходных веществ и продуктов реакции от температуры в виде уравнения (II.15) в выражение

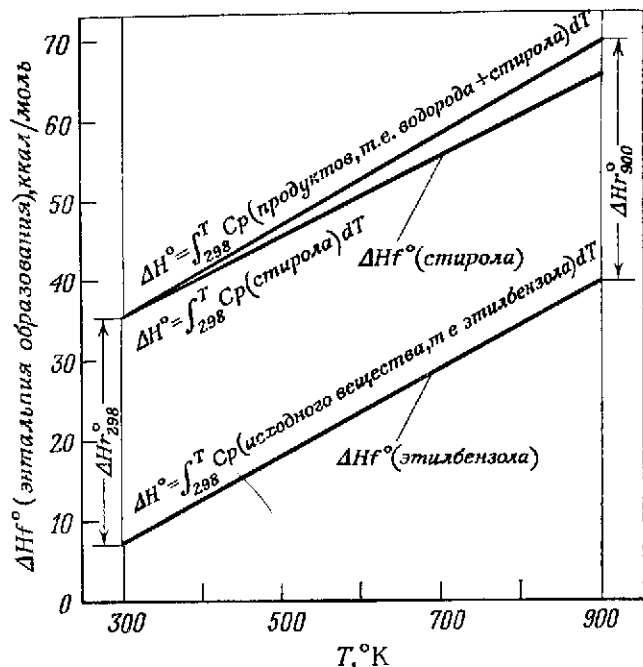


Рис. III.2. Иллюстрация закона Кирхгофа.

Следует отметить, что энтальпия образования водорода (элемента в его стандартном состоянии) равна нулю при всех температурах

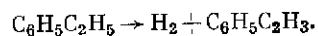
для ΔC_p в уравнении (III.3), находим

$$\Delta C_p = \Delta a'' + \Delta b'' T + \Delta c'' T^2.$$

После интегрирования уравнения (III.3) окончательно получим

$$\Delta H_{r_{T_2}} = \Delta H_{r_{T_1}} + \Delta a'' (T_2 - T_1) + \frac{\Delta b''}{2} (T_2^2 - T_1^2) - \Delta c'' (T_2^{-1} - T_1^{-1}).$$

В качестве примера расчета температурной зависимости энтальпии реакции по уравнению (III.2) рассмотрим реакцию крекинга этилбензола с образованием водорода и стирола:



Численные значения энтальпий этих веществ приведены в табл. III.2 и могут быть использованы для расчета изменения

Таблица III.2

Данные для расчета изменения энтальпии реакции крекинга этилбензола

Соединение	Состояние	$\Delta H_f^{\circ 298}$, ккал/моль	$H_{900}^{\circ} - H_{298}^{\circ}$, ккал/моль	Источник
Этилбензол	(g)	7,12	32,82	Гл. IX
Водород	(g)	0,00	4,22	» VIII
Стирол	(g)	35,22	30,32	» IX

энтальпии реакции крекинга при 900° К. Подставляя данные энтальпии образования при 298° К в уравнение (III.4), находим изменение энтальпии реакции крекинга в газовой фазе, протекающей при этой температуре:

$$\Delta H_{r_{298}}^{\circ} = 35,22 - 7,12 = 28,10 \text{ ккал/моль.}$$

При 298° К реакция крекинга протекает с поглощением 28,10 ккал/моль. Используя значения энтальпий, приведенные в табл. III.2, получим

$$\Delta H_{r_{900}}^{\circ} = 28,10 + [4,22 + 30,32 - 32,82] = 29,82 \text{ ккал/моль.}$$

Следовательно, при 900° К реакция крекинга протекает с поглощением 29,82 ккал/моль. Проведенные расчеты схематически изображены на рис. III.2.

Определение энтальпий образования по значениям энтальпий сгорания

Одним из наиболее важных методов определения энтальпий образования органических соединений является измерение энтальпий сгорания их в кислороде. Широкое использование различных вариантов этого метода обусловлено тем, что для очень большого числа органических соединений реакция сгорания в кислороде — процесс, удобный для калориметрического измерения. Преимуществом этого метода состоит в сравнительной легкости протекания реакции окисления и простоте идентификации конечных продуктов реакции для многих органических соединений*.

* Для многих органических соединений, содержащих, помимо углерода, азота и водорода, другие элементы, например галогены, серу, кремний, бор и др., процесс сгорания является значительно более сложным и часто сопровождается побочными реакциями. Для соединений такого типа сгорание может происходить не полностью, с образованием весьма сложных конечных продуктов. Эти обстоятельства в значительной степени затрудняют проведение эксперимента и часто вынуждают экспериментатора использовать другие калориметрические методы (см. ниже). — Прим. перев.

К недостаткам этого метода можно отнести то, что рассчитанные по энтальпиям сгорания энтальпии образования органических соединений, как правило, оказываются небольшими величинами по сравнению с энтальпиями сгорания и обычно содержат большие относительные погрешности. В связи с этим небольшие относительные ошибки в экспериментально найденных энтальпиях сгорания или присутствие в образце незначительного количества примеси часто могут вызвать значительно большую относительную погрешность в рассчитанной энтальпии образования по сравнению с прямым определением этой величины.

Теплота сгорания обычно определяется путем сжигания вещества при постоянном объеме и высоком давлении кислорода в специальных калориметрических бомбах или при постоянном давлении (около 1 атм) в токе кислорода. Использование калориметров сгорания в токе кислорода ограничивается главным образом газообразными соединениями или соединениями, обладающими большим давлением насыщенного пара при температурах калориметрических измерений.

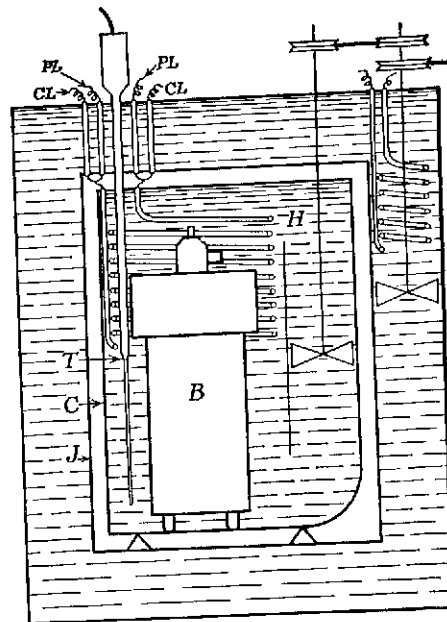
Поскольку определение энтальпий сгорания газообразных и летучих жидких веществ методом бомбовой калориметрии является весьма трудоемким экспериментом, оба метода находят применение для определения энтальпий сгорания различных органических соединений.

Определение энтальпий сгорания веществ методом бомбовой калориметрии

Тепло, выделяющееся при реакции сгорания, обычно определяется по подъему температуры калориметра, представляющего собой калориметрический сосуд с перемешиваемой жидкостью и погруженной в нее бомбой. Впервые эта методика была предложена и подробно описана Диккинсоном [327]. Калориметр окружен изотермической оболочкой, служащей для поддержания в течение опыта постоянной температуры. Джессап и Грин [690] описали типичный калориметр такого типа, схематически изображенный на рис. III.3. На рис. III.4 приведена схема самоуплотняющейся калориметрической бомбы (фирма «Парр»). В работах Хаббарда, Ноултона и Хаффмана [635], Прозена [1191], Джессапа [689], Прозена и Россини [1199], Купса, Ван Неса, Кенти и Динске [272], Пилчера и Саттона [1147], Челлонера, Гандри и Митхема [208], Эйткена, Боксолла и Кука [6], Бьеллерупа [135, 137] и Кейта и Мейкла [731] рассматриваются отдельные методические приемы и предлагаются некоторые улучшения в аппаратуре или методике проведения эксперимента. Многие вопросы бомбовой калориметрии подробно

обсуждаются в двух недавно опубликованных монографиях [247, 1362] *.

Бомбовые калориметры можно калибровать с помощью электрической энергии так, как это описано в ряде цитированных выше работ. Поскольку аппаратура, необходимая для измерения электрической энергии с требуемой точностью, не всегда доступна, Национальное бюро стандартов США предложило использовать для калибровки калориметров специальные образцы бензойной кислоты.



Р и с. III.3. Схема бомбового калориметра Джессапа и Грина [690]. В — калориметрическая бомба, С — калориметр; Н — нагреватель, J — оболочка калориметра, Т — термометр сопротивления; PL — потенциальподводящие провода, CL — токоподводящие провода.

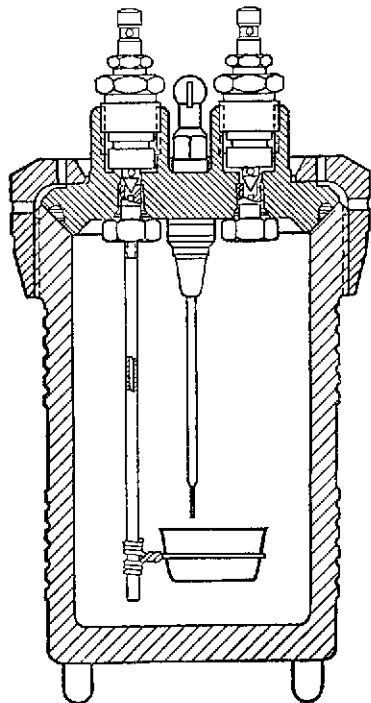
Теплоты сгорания таких стандартных образцов, снабженных соответствующими паспортами, известны с очень большой точностью и проверяются Национальным бюро стандартов США. Использование бензойной кислоты в качестве эталона для определения теплового значения калориметра позволило избежать ряда систематических ошибок, так как условия опытов по калибровке калориметров и по сжиганию веществ очень близки. В качестве эталонов были предложены и другие вещества, однако ни одно из них не исследовано с необходимой тщательностью.

* См. также работы советских ученых в области бомбовой калориметрии. Например, М. М. Попов, Термометрия и калориметрия, М., 1954; С. М. Скурата, В. П. Колесов, А. Ф. Воробьев, Термохимия, Изд-во МГУ, М., 1966. — Перевод.

Типичные условия проведения calorиметрического опыта по сжиганию:

- 1 г вещества берут в расчете на $\frac{1}{3}$ л емкости бомбы;
- начальное давление кислорода равно 30 атм;
- количество воды, добавляемое перед опытом в бомбу для насыщения парами воды ее внутреннего пространства, берут из расчета 1 г на $\frac{1}{3}$ л емкости бомбы.

Поскольку образующаяся в процессе горения двуокись углерода растворяется в воде, а поведение газов значительно отличается от идеального, количество тепла, выделяющегося в результате реакции горения, не равно количеству тепла, которое отвечает разности внутренней энергии исходных и конечных веществ в стандартном состоянии чистых жидкостей и идеальных газов. В настоящее время для приведения измеренного теплового эффекта к стандартным условиям вместо устаревших поправок Уошберна [1578], применимых только к соединениям, содержащим атомы углерода, водорода и кислорода, обычно используют метод Прозена [1191] или уравнение, полученное Коксом, Челлонером и Митхемом [288] для соединений, содержащих атомы углерода, водорода, кислорода и азота. В случае серу- и гало-



г и с. III.4. Самоуплотняющаяся calorиметрическая бомба (фирма «Парр») для определения энтальпии сгорания.

генсодержащих соединений иногда используют более сложную методику учета поправок, предложенную Хаббардом, Скоттом и Уаддингтоном [637]. Однако эту методику нельзя считать достаточно удачной, поскольку для вычисления по ней некоторых термохимических поправок требуется введение ряда трудно определяемых параметров. В случае фторсодержащих соединений необходимые для полного учета поправок по методу Хаббарда дополнительные данные были получены Коксом и Хедом [292], для бромсодержащих соединений — Бьеллерапом [136].

Обычно о массе сгоревшего в бомбе вещества судят по его навеске, взятой для сжигания; однако для образцов, содержащих примеси,

более точным является определение количества выделяющейся при сгорании двуокиси углерода методом газовой хроматографии (Прозен и Россини [1199]). Образцы летучих, гигроскопичных или медленно окисляющихся на воздухе веществ обычно помещают в закрытые сосуды. Джессап [686], а также Купс, Малдер, Динске и Смиттенберг [269] рекомендуют для этой цели специальные толкостенные гибкие стеклянные ампулы; методику использования полимерных пленок описали Гуд и Скотт [513], а также Мейкл и Мейрик [897].

Метод calorиметрии сгорания доведен в настоящее время до высокой степени совершенства и позволяет определять количество выделяющегося в calorиметре тепла с точностью 0,01%. Однако суммарная погрешность получаемых результатов ограничивается точностью определения продуктов сгорания.

Соединения, содержащие только атомы углерода, водорода и кислорода, как правило, сгорают до чистой двуокиси углерода и воды. Наличие в соединении азота приводит к образованию небольших количеств азотной кислоты, растворяющейся в воде. Азотную кислоту можно легко определить аналитически и ввести соответствующую термохимическую поправку.

Продукты, образующиеся при сгорании серу- или галогенсодержащих соединений, часто оказываются весьма агрессивными по отношению к материалу бомбы и ее деталям. Поэтому для плакировки внутренней поверхности бомбы и изготовления ее деталей необходимо использовать относительно инертные материалы, такие, как платина или тантал. При сжигании хлор- или бромсодержащих соединений образуется смесь элементарного галогена и галогеноводородной кислоты. Для полного превращения в галогеноводородную кислоту перед сжиганием в бомбу вводят некоторое количество восстановителя, например водного раствора мышьяковистого ангидрида или дихлоргидрата гидразина. Последние исследования Смита, Скотта и Мак-Каллоха [1387] показали, что платиновая плакировка катализирует распад дихлоргидрата гидразина, поэтому использование этого реагента в платинированных бомбах недопустимо. Для определения теплот сгорания хлорсодержащих соединений используют методику сжигания в стационарной бомбе, причем раствор восстановителя наносят на стеклоткань [635] или кварцевое волокно [1384]*. Однако определяемые с помощью стационарных бомб энтальпии сгорания часто неточны из-за различной концентрации кислотного раствора в разных частях бомбы и отсутствия полного равновесия между образовавшимися газами и раствором. Стационарную calorиметрическую бомбу применяют также для определения теплот сгорания серусодержащих соединений. Хаббард, Катц и Уаддингтон [633] предложили методику, исключая-

* Это увеличивает поверхность контакта газообразного хлора с раствором восстановителя непосредственно вблизи зоны горения вещества. — Прим. перев.

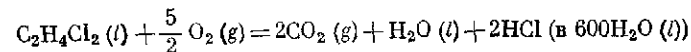
шую добавление воды в бомбу перед началом эксперимента; по мнению авторов, образующаяся в туманообразном состоянии серная кислота оседает на стенках бомбы в виде раствора одинаковой концентрации. В настоящее время эти методики следует считать устаревшими, особенно после создания качающейся бомбы, впервые сконструированной Поповым и Широких [1180], и вращающейся бомбы, описанной Суннером [1442] и Хаббардом, Катцем и Уаддингтоном [633]. Применение калориметров с так называемыми подвижными бомбами обеспечивает быстрое и полное восстановление свободного галогена и достижение равновесия между жидким раствором и газообразными продуктами.

Соединения, содержащие менее 50% фтора, образуют в качестве конечных продуктов сгорания только фтористый водород. При сгорании соединений, содержащих большее количество фтора, может также образоваться четырехфтористый углерод. Методы определения энтальпий образования фторорганических соединений, а также анализ продуктов их сгорания описаны в работах Гуда, Скотта и Уаддингтона [514] и Гуда, Доуслина, Скотта, Джорджа, Лейцины, Доусона и Уаддингтона [508].

Иодсодержащие соединения сгорают с образованием элементарного иода, двуокиси углерода и воды, поэтому для определения их энтальпий сгорания можно использовать как стационарные калориметрические бомбы, так и калориметры с вращающимися бомбами.

В качестве примера расхождения данных по энтальпиям образования, полученных разными авторами методом бомбовой калориметрии, рассмотрим имеющиеся величины для 1,2-дихлорэтана. Энтальпию образования этого соединения недавно определили Зинке и Сталл [1359] методом сжигания в калориметрической бомбе. После введения всех необходимых поправок эти авторы приводят значение $\Delta H_{298}^{\circ} (l)$, равное $-39,6 \pm 0,4$ ккал/моль. В качестве второго значения можно использовать величину $\Delta E_{293}^{\circ} (l)$, равную $-3004,3$ ккал/г, полученную Смитом, Бьеллерапом, Круком и Уестермарком [1384]. Введенную ими поправку ($-3,0$ ккал/г), связанную с изменением теплоты окисления мышьяковистого ангидрида с 19,6 на 18,6 ккал/эке, следует несколько уточнить, поскольку в более поздней работе Бьеллерап, Суннер и Вадсо [142] приводят для этой реакции более точное значение (19,35 ккал/эке). Таким образом, поправка для As_2O_3 будет составлять только $-0,8$ ккал/г. Используемое в работе [1384] для калибровки калориметра значение теплоты сгорания стандартных образцов бензойной кислоты специально не проверялось, тем не менее есть основания полагать, что было взято правильное значение, поскольку для получения по крайней мере части экспериментальных данных были использованы образцы Национального бюро стандартов. Смит и сотрудники показали, что небольшой дополнительный вклад в поправку Уошберна можно оценить величиной порядка $-0,5$ ккал/г. После введения этих двух поправок

энергия сгорания $\Delta E_{293}^{\circ} (l)$ равна $-3001,6$ ккал/г, или, принимая молекулярный вес 1,2-дихлорэтана равным 98,968 г, для реакции



получим $\Delta E_{293}^{\circ} (l) = -297,06$ ккал/моль.

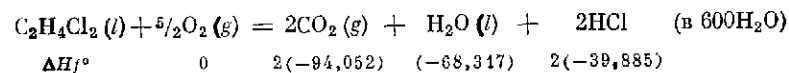
Комбинируя выражения (I.6), (I.7) и (I.9), находим следующее выражение для расчета энтальпии сгорания при постоянном давлении:

$$\Delta H = \Delta E + \Delta nRT,$$

где Δn — изменение числа молей газообразных веществ в процессе реакции. Для рассматриваемого случая $\Delta n = 0,5$, откуда $\Delta H_{293}^{\circ} (l) = -297,06 - 0,30 = -297,36$ ккал/моль. Питчер [1151] определил теплоемкость жидкого 1,2-дихлорэтана, равную 30,80 ккал/(моль·°К); Россини, Питчер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] приводят для теплоемкости кислорода и двуокиси углерода значения 7,017 и 8,874 ккал/(моль·°К) соответственно. Из данных Гукера и Шминке [545] по теплоемкостям разбавленных растворов хлористого водорода в чистой воде находим значение кажущейся мольной теплоемкости хлористого водорода (в 600 H₂O): $C_p (HCl \cdot 600H_2O) = -25,4$ ккал/(моль·°К). Используя указанные величины, нетрудно рассчитать изменение теплоемкости для участников реакции горения: $\Delta C_p = -63,3$ ккал/°К. Применяя уравнение Кирхгофа (III.3), находим

$$\Delta H_{298}^{\circ} (l) = \Delta H_{293}^{\circ} + \Delta C_p \Delta T = -297,36 - 0,32 = -297,68 \text{ ккал/моль.}$$

В табл. III.1 находим соответствующие значения энтальпий образования каждого вещества и пишем их под уравнением реакции горения



и, используя выражение III.1, получаем

$$-297,68 = 2(-94,052) + 2(-39,885) + (-68,317) - (\Delta H_f^{\circ} C_2H_4Cl_2),$$

$$\Delta H_{298}^{\circ} C_2H_4Cl_2 (l) = -38,5 \text{ ккал/моль.}$$

Найденное значение ΔH_{298}° на 1,1 ккал отличается от величины, полученной Зинке и Сталлом. Значение ΔH_{298}° , определенное другим методом, который будет описан несколько ниже, прекрасно согласуется с данными Зинке и Сталла и указывает на наличие в величине энтальпии образования 1,2-дихлорэтана, полученной Смитом и сотрудниками, систематической ошибки, очевидно связанной с присутствием примесей в исследованном образце.

Определение энтальпии сгорания органических веществ в газообразном и парообразном состояниях

Энтальпия сгорания может быть определена путем измерения подъема температуры калориметра, представляющего собой специальную камеру, помещенную в перемещаемую воду. В этой камере газообразная смесь кислорода и вещества реагирует в пламени при постоянном давлении. Этот метод был широко использован Томсенем, однако началом применения его в прецизионной калориметрии следует считать работу Прозена, Марона и Россипи [1198] по измерению энтальпии образования бутадиена. Реакционный сосуд, использованный этими авторами, схематически изображен на рис. III.5. Поскольку количество тепла, выделяющееся в опытах по сгоранию в токе кислорода, линейно зависит от времени, кривую время — температура можно с большой точностью воспроизвести калибровкой электрическим током. Исследователи, не располагающие аппаратурой, необходимой для очень точных электрических измерений, могут использовать для калибровки реакцию взаимодействия водорода с кислородом. Количество воды, образующейся в этой реакции весьма точно определяется прямым взвешиванием воды, оставшейся в калориметре, унесенной остаточным газом и поглощенной специальными ловушками с перхлоратом магния

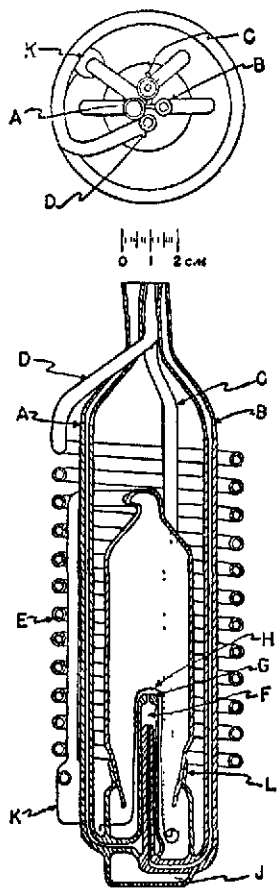
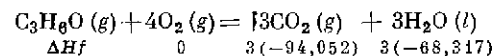


Рис III.5 Схема реакционного сосуда Прозена Марона и Россипи [1198] для определения энтальпии сгорания газообразных и легко испаряющихся веществ в токе кислорода

или фосфорным ангидридом. Для приведения измеряемой величины к стандартному состоянию необходимо внести следующие поправки а) на теплоту испарения воды, унесенной газом; б) на электрическую энергию, сообщенную калориметру искровым разрядом при зажигании, и в) на испарившуюся воду, насыщающую пространство калориметра. Более подробное описание методики калориметрических измерений можно найти в работах Россипи [1238, 1239].

В последнее время интересным применением метода сжигания органических веществ в токе газообразного окислителя явилось определение энтальпии сгорания метана во фторе, выполненное Жессапом, Мак-Коски и Нельсоном [691], и энтальпии сгорания метана, измеренной Ноултоном и Прозеном [769].

Проиллюстрируем метод определения энтальпии образования по данным калориметрии сжигания в токе кислорода и сравним его с другими методами. Милс и Хант [1000] измерили энтальпию сгорания паров ацетона. Их калориметр был проградуирован по теплоте горения водорода в кислороде, причем для воды использовали значение $\Delta H_f^{\circ}(l) = -68,318 \text{ ккал/моль}$. Принимая молекулярный вес воды равным 18,0156, получим $-3792,16 \pm 0,19 \text{ ккал/г}$. Недавно Вагман, Килпатрик, Тейлор, Питцер и Россипи [1562] нашли значение $\Delta H_f^{\circ}(l)$ для воды, равное $-3792,04 \pm 0,53 \text{ ккал/г}$. Введение поправки в эту величину приводит к уменьшению значений энтальпии сгорания, найденных Милсом и Хантом, на 0,003%. Это расхождение пренебрежимо мало и лежит в пределах экспериментальной ошибки $\pm 0,05\%$. Определение энтальпии сгорания паров ацетона проводилось при парциальном давлении около 200 мм рт. ст., близком к парциальному давлению ацетона при 298° К. Величину энтальпии сгорания $\Delta H_c^{\circ}(g, 200 \text{ мм}) = -435,32 \pm 0,20 \text{ ккал/моль}$, определенную Милсом и Хантом при этих условиях, можно использовать для расчета энтальпии образования ацетона исходя из реакции



Подставляя необходимые величины в выражение (III,1), получим $-435,32 = 3(-94,052) + 3(-68,317) - [\Delta H_f^{\circ} \text{C}_3\text{H}_6\text{O} (g)]$, откуда

$$\Delta H_f^{\circ} \text{C}_3\text{H}_6\text{O} (g, 200 \text{ мм}) = -51,787 \pm 0,20 \text{ ккал/моль.}$$

Используя данные Пеннингтона и Кобе [1135] по энтальпии испарения и поправку на неидеальное поведение газообразного ацетона, с помощью полученного значения можно определить энтальпию образования жидкого ацетона и ацетона в состоянии идеального газа. Энтальпия испарения ацетона при 300,42° К равна $7,372 \pm 0,002 \text{ ккал/моль}$. Зная ΔC_p процесса испарения [$\Delta C_p = -12 \text{ ккал/(моль} \cdot \text{°К)}$], эту величину можно привести к температуре 298° К и рассчитать энтальпию испарения ацетона при 298° К, равную $7,399 \text{ ккал/моль}$. Комбинируя энтальпию испарения и энтальпию образования газообразного ацетона, находим $\Delta H_f^{\circ}(l) = -59,19 \pm 0,20 \text{ ккал/моль}$.

Для расчета энтальпии образования ацетона в состоянии идеального газа используем следующее термодинамическое соотношение:

$$H_{P_2} - H_{P_1} = \int_{P_1}^{P_2} \left[V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \right] dP. \quad (\text{III.5})$$

В качестве уравнения состояния примем выражение

$$V = \frac{RT}{P} + B.$$

Температурную зависимость константы B вычислим из данных Пеннингтона и Кобе:

$$B = -40,4e^{(1164/T)}.$$

Отсюда

$$H_{P_2} - H_{P_1} = \int_{P_1}^{P_2} \left[B - T \left(\frac{\partial B}{\partial T} \right)_P \right] dP.$$

Полагая, что при очень малых давлениях состояние реального газа близко к состоянию идеального газа, для 298° К получим

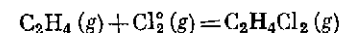
$$H_0 - H'_{200 \text{ мм}} = 50 \text{ кал/моль}.$$

Вводя эту поправку в значение энтальпии образования газообразного ацетона, найденное Милсом и Хантом при 200 мм рт. ст., определяем величину $\Delta H_{298}^{\circ}(g)$, равную $-51,74 \pm 0,20$ ккал/моль. При такой записи энтальпии образования надстрочный градус указывает на то, что исходные и конечные вещества находятся в стандартном состоянии идеальных газов при давлении 1 атм, а чистые жидкости или твердые вещества — под давлением 1 атм.

Определение энтальпии образования по теплотам реакции

В ряде случаев прямое экспериментальное определение энтальпии реакции может дать более точные результаты в определении энтальпии образования органических веществ, чем вычисление ее на основе энтальпий сгорания. Кистяковский и сотрудники провели целую серию работ [261, 334, 335, 759—762] по определению теплот реакций присоединения водорода по связям С — С и С — О. В работе Лейчера, Эмери, Бомфолка и Парка [824] описан специальный калориметр, сконструированный для определения теплот гидрирования метил-, этил- и винилхлоридов. В другой группе работ были определены теплоты присоединения бромистого водорода к пропилену и циклопропану [829, 834], к изомерам бутена [822] и к фторолефинам [830]. Были изучены также реакции присоединения хлора [831, 832] и брома [823] к фторолефинам. Кистяковский и сотрудники измерили теплоты реакций присоединения хлора и брома к олефинам [259, 260], а также теплоты реакций гидролиза ангидридов ряда кислот [258]. Скинер и сотрудники измерили теплоты гидролиза ацетилгалогенидов [198, 1188], хлорированных ацилхлоридов [1187], бензоилгалогенидов [197], а также трихлор- и трибромуксусного альдегида [1189]. Исследовано также большое число металлоорганических соединений.

Следует отметить, что величины теплот реакций обычно немного меньше энтальпий сгорания, поэтому точность в определении энтальпий образования, рассчитанных из термохимических данных по теплотам реакций, полученных с меньшей относительной точностью, оказывается вполне сравнимой с точностью определения энтальпий образования, найденных из энтальпий сгорания. В качестве примера используем энтальпию реакции присоединения хлора к этилену, определенную Конном, Кистяковским и Смитом [259], для расчета энтальпии образования 1,2-дихлорэтана. Для реакции

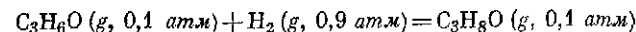


$\Delta H_{r_{335}} = -43\,653 \pm 120$ кал. В работах Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248], Поттера [1183] и Гуинна и Питцера [556] приведены значения теплоемкостей этилена, хлора и газообразного 1,2-дихлорэтана. Вычисленное из этих данных среднее значение ΔC_p участников рассматриваемой реакции в интервале 298—355° К равно $0,4$ кал/(моль·°К). Используя уравнение Кирхгофа (III.3), для энтальпии реакции при 298° К получим

$$\Delta H_{r_{298}} = -43\,653 - (0,4 \times 57) = -43\,676 \pm 120 \text{ кал/моль}.$$

Мак-Дональд [968] нашел, что величина энтальпии испарения 1,2-дихлорэтана при 298° К равна 8470 ± 20 кал/моль. Прозен и Россини [1204] приводят значение энтальпии образования газообразного этилена при 298° К ($12\,496 \pm 66$ кал/моль). Комбинируя эти величины, для энтальпии образования 1,2-дихлорэтана получим $\Delta H_{f_{298}}^{\circ}(l) = -39,65 \pm 0,20$ ккал/моль. Это значение хорошо согласуется с приведенной выше величиной энтальпии образования, определенной Зинке и Сталлом методом калориметрии сгорания. Следует отметить, что точность в определении энтальпии сгорания составляет 0,14%; точность в определении энтальпии реакции гидрирования равна 0,28%. Тем не менее ошибка в приводимом значении энтальпии образования, полученном из данных по хлорированию, в два раза меньше ошибки в энтальпии образования, определенной из данных по горению.

Долливер, Грэм, Кистяковский, Смит и Воган [334] измерили энтальпию реакции гидрирования ацетона до пропанола-2 при 335° К. Для реакции



они нашли

$$\Delta H_{r_{335}} = -13\,343 \pm 100 \text{ кал/моль}.$$

Уильямсон и Харрисон [1617] измерили энтальпию испарения пропанола-2 при 353,33° К и 702 мм рт. ст. и получили $9625 \pm \pm 12$ кал/моль. Уравнение состояния для газообразного пропанола-2 было предложено Кречмером и Уайб [811]. Гинпингс и Корручини [486] определили энтальпию жидкого пропанола-2, а Паркс,

Мосли и Петерсон [1116] и Паркс и Манчестер [1111] измерили его теплоу сгорания в жидком состоянии. Комбинируя эти данные, получим энтальпию образования ацетона.

Как следует из данных, приведенных в таблицах, изменение теплоемкости ΔC_p участников реакций гидрирования близко к $-4 \text{ кал/моль} \cdot ^\circ\text{К}$. Используя эту величину, нетрудно рассчитать энтальпию реакции при $353,33^\circ \text{К}$: $\Delta H_{r,353,33} = -13\,343 + (4 \times \times 1,67) = -13\,336 \pm 100 \text{ кал/моль}$. Кречмер и Уайб приводят для пропанола-2 следующее уравнение состояния:

$$V = \frac{RT}{P} + B + DP^2,$$

где $B = -300 - 0,755e^{2483/T} \text{ мл/моль}$,

$$D = (2,70 \times 10^{-5}) - (3,16 \times 10^{-15}) e^{9215/T} \text{ мл/(мм}^2 \cdot \text{моль)}.$$

Используя соотношение (III.5) и приведенные выше данные, получим

$$H_{P_2} - H_{P_1} = B(P_2 - P_1) + \frac{1}{3} D(P_2^3 - P_1^3) - T \left(\frac{\partial B}{\partial T} \right)_P \times \\ \times (P_2 - P_1) - \frac{1}{3} T \left(\frac{\partial D}{\partial T} \right)_P (P_2^3 - P_1^3).$$

Подставляя значения B и D и их частные производные при $353,33^\circ \text{К}$ и значениях P_2 и P_1 , равных соответственно 702 и 76 мм рт. ст. , и выражая полученное значение в калориях на моль, находим

$$H_{P_2} - H_{P_1} = -226 \text{ кал/моль}.$$

Поправки на состояние идеального газа для ацетона и водорода по величине меньше 10 кал/моль и ими можно пренебречь. Значения энтальпий ацетона и водорода в состоянии идеального газа при $353,33^\circ \text{К}$ можно получить интерполяцией данных, приведенных в следующей главе. Используя закон Гесса, запишем следующий набор реакций:

	ΔH_r , кал/моль
$\text{C}_3\text{H}_8\text{O}(g, 353^\circ) + \text{H}_2(g, 353^\circ) = \text{C}_3\text{H}_8\text{O}(g, 0,1 \text{ атм.}, 353^\circ)$	-13 336
$\text{C}_3\text{H}_8\text{O}(g, 0,1 \text{ атм.}, 353^\circ) = \text{C}_3\text{H}_8\text{O}(g, 0,924 \text{ атм.}, 353^\circ)$	-226
$\text{C}_3\text{H}_8\text{O}(g, 0,924 \text{ атм.}, 353^\circ) = \text{C}_3\text{H}_8\text{O}(l, 353^\circ)$	-9 625
$\text{C}_3\text{H}_8\text{O}(l, 353^\circ) = \text{C}_3\text{H}_8\text{O}(l, 298^\circ)$	-2 364
$\text{H}_2(g, 298^\circ) = \text{H}_2(g, 353^\circ)$	381
$\text{C}_3\text{H}_8\text{O}(g, 298^\circ) = \text{C}_3\text{H}_8\text{O}(g, 353^\circ)$	1 054
$\text{C}_3\text{H}_8\text{O}(g, 298^\circ) + \text{H}_2(g, 298^\circ) = \text{C}_3\text{H}_8\text{O}(l, 298^\circ)$	-24 416

Комбинируя полученное значение энтальпии реакции с величиной энтальпии образования пропанола-2 ($\Delta H_{f,298}^\circ(l) = -76\,190 \pm \pm 80 \text{ кал/моль}$), для ацетона находим

$$\Delta H_{f,298}^\circ(g) = -52\,074 \text{ кал/моль}.$$

В проведенном расчете использованы данные, взятые из большого числа работ, поэтому весьма трудно точно оценить ошибку в приводимой для газообразного ацетона величине $\Delta H_{f,298}^\circ$; тем не менее ее вполне можно принять равной $\pm 250 \text{ кал/моль}$. Следует отметить, что полученное значение $\Delta H_{f,298}^\circ$ достаточно хорошо согласуется с величиной энтальпии образования, полученной Милсом и Хантом [1000] методом калориметрии сжигания в токе кислорода и равной $-51\,740 \text{ кал/моль}$.

Определение энтальпий образования по равновесным данным

Энтальпии образования можно рассчитать с помощью уравнения Вант-Гоффа (V.19), используя экспериментальные значения констант равновесия. Примером такого типа исследований может служить опубликованная недавно работа Кабберли и Мюллера [297] по определению величины ΔH_f° из равновесных данных для реакции гидрирования спиртов, а также работы Хоулетта [619, 620] и Абрамса и Девиса [1] по определению энтальпий образования из констант равновесия реакций дегалогенирования этил-, изопропил- и трет-бутилхлоридов и дегалогенирования диодэтана. Для определения величины ΔH_f° по равновесным данным можно использовать три метода. Рассмотрим каждый из них на примере данных по равновесию реакции дегидрирования пропанола-2, полученных Колбом и Баруеллом [791] (табл. III.3), и данных Раффа и Ли [1267], полученных для равновесия $\text{CF}_4 - \text{CO}_2 - \text{CF}_2\text{O}$. Эти работы специально выбраны для иллюстрации ошибок в определении ΔH_f° , которые могут возникать при расчете величин ΔH_r по второму закону термодинамики.

В основе первого метода расчета лежит предположение о независимости энтальпии реакции от температуры в некотором исследованном интервале температур. В таком приближении интегрирование уравнения Вант-Гоффа дает

$$\lg Kp = \frac{-\overline{\Delta H_r}}{4,5758T} + I',$$

где $\overline{\Delta H_r}$ — среднее значение энтальпии реакции в исследованном интервале температур, а I' — константа интегрирования. При температурах эксперимента поведение газов можно считать почти идеальным и полностью пренебречь отклонением от идеальности. Это позволяет непосредственно использовать в расчете измеренные

Таблица III.3

Равновесные данные для газофазной реакции
Пропанол-2 = Ацетон + Водород^{a)}

T, °K	Kp	1000/T	lg Kp
-------	----	--------	-------

Равновесные данные, полученные при приближении к равновесию со стороны избытка ацетона и водорода

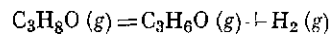
417,8	0,132	2,393	-0,8794
422,7	0,156	2,366	-0,8069
433,4	0,234	2,307	-0,6308
452,2	0,454	2,211	-0,3429
464,3	0,748	2,154	-0,1261
472,8	0,975	2,115	-0,0110
491,6	1,59	2,034	0,2014

Равновесные данные, полученные при приближении к равновесию со стороны избытка пропанола-2

416,7	0,124	2,400	-0,9066
422,7	0,154	2,366	-0,8125
436,4	0,276	2,291	-0,5591
444,8	0,356	2,248	-0,4486
452,2	0,435	2,211	-0,3615
455,7	0,525	2,194	-0,2798
464,3	0,683	2,154	-0,1656
472,8	0,959	2,115	-0,0182
491,6	1,57	2,034	0,1959

^{a)} Данные Колба и Баруелла [791], давление выражено в атмосферах.

константы равновесия. Построив график зависимости константы равновесия от температуры в координатах $\lg Kp - 1/T$, получим прямую линию (рис. III.6.), угол наклона которой равен $-\overline{\Delta H_r}/4,5758$. Используя данные Колба и Баруелла, для реакции



получим

$$\overline{\Delta H_r}_{416-492} = 13980 \text{ кал/моль.}$$

С помощью уравнения (III.2) можно рассчитать величину $\overline{\Delta H_r}^\circ$ при 298°K. Из соответствующих таблиц раздела II путем интерполяции

находим

$$\begin{aligned} \Delta H_r^\circ_{298} &= \Delta H_r^\circ_{454} - [(H^\circ_{464} - H^\circ_{298})_{\text{ацетон}} + (H^\circ_{454} - H^\circ_{298})_{\text{водород}} - \\ &\quad - (H^\circ_{454} - H^\circ_{298})_{\text{пропанол-2}}], \\ \Delta H_r^\circ_{298} &= 13980 - (3323 + 1084 - 3958) = 13500 \text{ кал/моль.} \end{aligned}$$

Расчет энтальпии из равновесных данных, полученных Раффом и Ли, для реакции



оказывается более сложным.

Экспериментальные значения приведены в табл. III.4 и представлены графически в координатах $\lg Kp - 1/T$ на рис. III.7. Наблю-

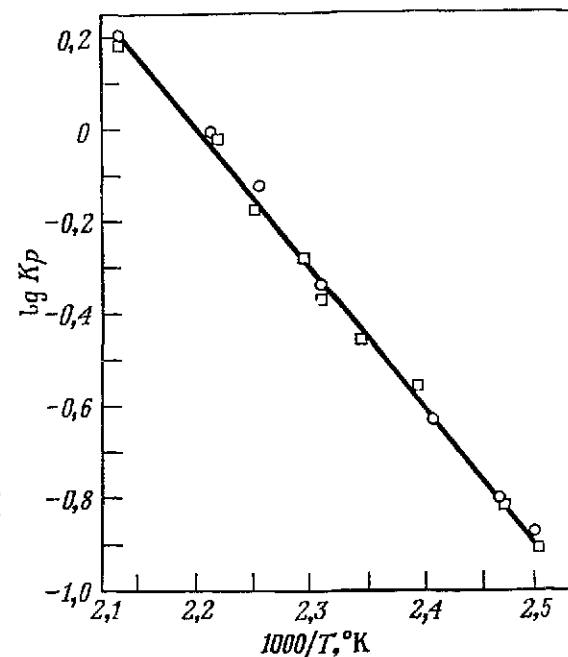


Рис. III.6. Зависимость константы равновесия газофазной реакции от температуры.
Пропанол-2 = Ацетон + Водород.

дается значительный разброс экспериментальных величин, но наклон прямой линии на графике соответствует тому наклону, который Рафф и Ли использовали для расчета энтальпии, и отвечает значению $\overline{\Delta H_r}^\circ_{923-1473}$ равному 26 ккал/моль. Без достаточного критического анализа эта величина была ошибочно использована Дузом [360] и Нойгебауером [1058] для определения энтальпии образования карбонилфторида. Однако, как будет показано несколько позднее,

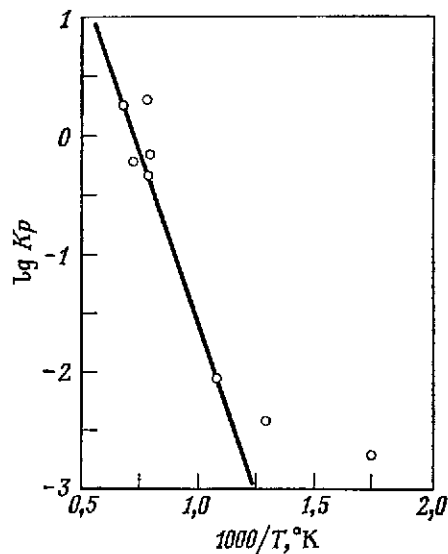
Таблица III.4

Равновесные данные для газовой реакции
 $2\text{CF}_2\text{O} = \text{CO}_2 + \text{CF}_4$ а)

Катализатор	T, °K	Kp	1000/T	lg Kp
Ni	573	0,00195	1,745	-2,710
Ni	773	0,00391	1,294	-2,408
Ni	923	0,00897	1,083	-2,047
Pt	1273	0,4659	0,786	-0,332
Pt	1273	0,6975	0,786	-0,156
Pt	1373	0,5952	0,729	-0,225
Pt	1473	1,805	0,679	0,256
Pt	1273	2,04	0,786	0,309

а) Данные Раффа и Ли [1267], давление выражено в атмосферах

полученная Раффом и Ли величина ΔH_r° содержит значительную ошибку и искажена за счет слишком большого вклада константы равновесия при 923° K.

Р и с. III.7. Экспериментальные данные Раффа и Ли [1267] для реакции $2\text{CF}_2\text{O} = \text{CO}_2 + \text{CF}_4$. Давление выражено в атмосферах.

Второй метод является более общим и позволяет учитывать изменение величины ΔH с температурой путем подстановки выра-

жения (III.3) в уравнение (V.19):

$$\frac{d \ln K_p}{dT} = \frac{\Delta H_0}{RT^2} + \frac{1}{RT^2} \int_0^T \Delta C_p dT. \quad (\text{III.6})$$

Если зависимость теплоемкостей исходных веществ и продуктов реакции задана в виде

$$C_p = a + bT + cT^2,$$

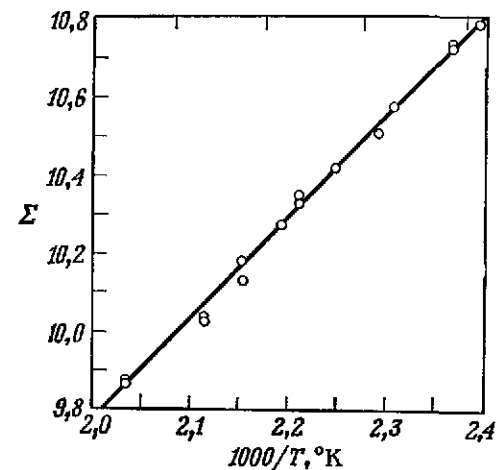
подстановка их в выражение (III.6) после интегрирования дает

$$\lg K_p = \frac{-\Delta H_0}{4,5758T} + \frac{\Delta a}{1,9873} \lg T + \frac{\Delta b}{9,1514} T + \frac{\Delta c}{27,454} T^2 + I.$$

Отсюда

$$\frac{\Delta H_0}{4,5758T} - I = -\lg K_p + \frac{\Delta a}{1,9873} \lg T + \frac{\Delta b}{9,1514} T + \frac{\Delta c}{27,454} T^2. \quad (\text{III.7})$$

Подбирая подходящие уравнения зависимости теплоемкости от температуры для трех веществ, участвующих в реакции, изучен-

Р и с. III.8. Зависимость Σ от температуры для газовой реакции

Пропанол-2 = Ацетон + Водород.

ной Колбом и Баруеллом,⁴ получим

$$\text{Пропанол-2: } C_p^\circ = 3,06 + 68,3 \cdot 10^{-3}T - 23,5 \cdot 10^{-6}T^2,$$

$$\text{Ацетон: } C_p^\circ = 5,04 + 45,2 \cdot 10^{-3}T - 7,0 \cdot 10^{-6}T^2,$$

$$\text{Водород: } C_p^\circ = 6,14 + 3,7 \cdot 10^{-3}T - 4,0 \cdot 10^{-6}T^2,$$

откуда

$$\Delta C_p^\circ = 8,12 - 19,4 \cdot 10^{-3}T + 12,5 \cdot 10^{-6}T^2.$$

Подставляя найденное значение ΔC_p° в выражение (III.7), находим

$$\Sigma = -\lg K_p + 4,086 \lg T - 2,12 \cdot 10^{-3}T + 0,455 \cdot 10^{-6}T^2.$$

Для каждой экспериментальной величины K_p можно рассчитать соответствующее значение Σ правой части уравнения (III.7) (табл. III.5). Из наклона прямой, построенной в координатах $\Sigma - 1/T$, получаем значение ΔH_0 (рис. III.8). Тогда энтальпию реакции⁴ при любой другой температуре можно вычислить из выражения (III.3).

Таблица III.5

Вычисление значений для газофазной реакции
Пропанол-2 = Ацетон + Водород ^{a)}

T, °K	lg K _p	1000/T	4,086 lg T	2,12 · 10 ⁻³ T	0,455 T ²	Σ
417,8	-0,879	2,393	10,710	0,886	0,079	10,782
422,7	-0,807	2,366	10,730	0,896	0,081	10,722
433,4	-0,631	2,307	10,744	0,919	0,085	10,571
452,2	-0,343	2,211	10,850	0,959	0,093	10,327
464,3	-0,126	2,154	10,897	0,984	0,098	10,137
472,8	-0,011	2,115	10,929	1,002	0,100	10,038
491,6	0,201	2,034	10,998	1,042	0,110	9,865
416,7	-0,907	2,400	10,705	0,883	0,079	10,808
422,7	-0,813	2,366	10,730	0,896	0,081	10,728
436,4	-0,559	2,291	10,787	0,925	0,087	10,508
444,8	-0,449	2,248	10,821	0,943	0,090	10,417
452,2	-0,362	2,211	10,850	0,959	0,093	10,345
455,7	-0,280	2,194	10,863	0,966	0,094	10,271
464,3	-0,166	2,154	10,897	0,984	0,098	10,176
472,8	-0,018	2,115	10,929	1,002	0,100	10,045
491,6	0,196	2,034	10,998	1,042	0,110	9,870

^{a)} Данные Колба и Баруелла [791]; давление выражено в атмосферах.

Для рассматриваемой реакции наклон прямой в координатах $\Sigma - 1/T$ дает

$$\Delta H_0 = 15\,108 \text{ кал/моль.}$$

Подставляя выражение для ΔC_p° в уравнение (III.3), получим

$$\Delta H_T^\circ = \Delta H_0 - 8,12T + 0,0097T^2 - (4,2 \cdot 10^{-6}T^3),$$

откуда

$$\Delta H_{T_{298}} = 15\,108 - 2421 + 862 - 111 = 13\,438 \text{ кал/моль.}$$

Полученное значение хорошо согласуется с величиной, вычисленной по первому методу. Следует отметить, что предположение о постоянстве ΔH_T в некотором исследованном интервале температур, как правило, не вносит существенных ошибок в расчет теплот реакций, протекающих с участием органических веществ. Основная трудность обоих методов заключается в выборе критерия, необходимого

для проведения «наилучшей» прямой линии через экспериментальные точки *.

Если термодинамические функции, т. е. теплоемкость, энтропия и энтальпия исходных веществ и продуктов реакции, известны или могут быть оценены с достаточной точностью, энтальпию реакции

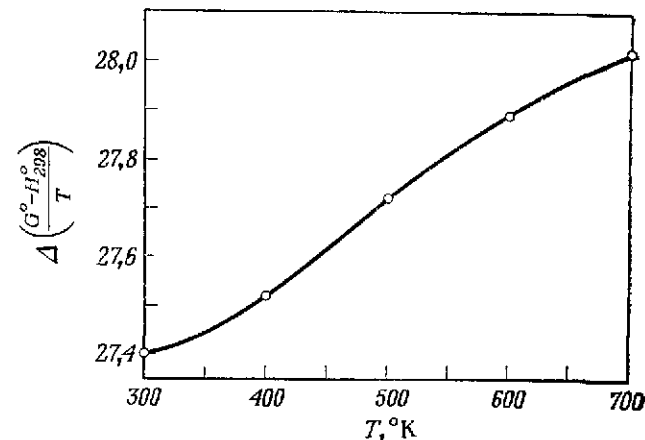


Рис. III.9. Изменение функции энергии Гиббса для газофазной реакции
Пропанол-2 = Ацетон + Водород.

гораздо удобнее рассчитать третьим методом, основанным на использовании функции энергии Гиббса. Эта функция обсуждается в гл. V. Необходимое для расчета соотношение можно представить в виде

$$\frac{\Delta H_{T_{298}}^\circ}{T} = -R \ln K_p + \sum v_i \left(\frac{G_T^\circ - H_{298}^\circ}{T} \right)_i.$$

Функции энергии Гиббса для ацетона, водорода и пропанола-2 приведены в соответствующих таблицах для интервалов 100°. Вместо интерполяции функции энергии Гиббса для каждого участника реакции удобнее вычислить изменение функции энергии Гиббса

$$\Delta \left(\frac{G_T^\circ - H_{298}^\circ}{T} \right) = \sum v_i \left(\frac{G_T^\circ - H_{298}^\circ}{T} \right)_i$$

для каждого интервала в 100° и, построив зависимость этой функции от температуры, интерполировать ее графически. На рис. III.9 такая зависимость показана для реакции образования пропанола-2 из ацетона и водорода. При построении таких зависимостей необходимо учитывать, что все функции энергии Гиббса и их изменения по определению имеют минимум при 298° К.

* В настоящее время эта задача достаточно строго решается методом регрессионного анализа. См., например, В. П. Спиридонов, А. А. Лопаткин, Математическая обработка физико-химических данных, Изд-во МГУ, М., 1970; А. Н. Корнилов, В. А. Соколов, Л. М. Видавский, ЖФХ, XL1, 3096, 3102 (1967); XLIII, 2224 (1969). — Прим. перев.

Если функция энергии Гиббса известна, нетрудно рассчитать значение ΔHr_{298}° для каждого экспериментального значения K_p (табл. III.6). Как видно, отсутствие тенденции к увеличению или

Таблица III.6

Анализ данных термического равновесия газофазной реакции
Пропанол-2 = Ацетон + Водород^{а)}

T, °K	K_p	$\frac{\Delta Gr^\circ}{T}$ ^{б)}	$\frac{\Delta (G_T^\circ - H_{298}^\circ)}{T}$ ^{б)}	ΔHr_{298}° ^{в)}
Равновесные данные, полученные при приближении к равновесию со стороны избытка ацетона и водорода				
417,8	0,132	4,02	27,55	13 190
422,7	0,156	3,69	27,56	13 209
433,4	0,234	2,89	27,58	13 206
452,2	0,454	1,57	27,62	13 200
464,3	0,748	0,58	27,65	13 107
472,8	0,975	0,05	27,67	13 106
491,6	1,59	-0,92	27,70	13 165

Среднее: 13 169

Равновесные данные, полученные при приближении к равновесию со стороны избытка пропанола-2

416,7	0,124	4,15	27,55	13 209
422,7	0,154	3,72	27,56	13 222
436,4	0,276	2,56	27,59	13 157
444,8	0,356	2,05	27,61	13 193
452,2	0,435	1,65	27,62	13 236
455,7	0,525	1,28	27,63	13 174
464,3	0,683	0,76	27,65	13 191
472,8	0,959	0,08	27,67	13 120
491,6	1,57	-0,90	27,70	13 175

Среднее: 13 186

Общее среднее: 13 180

а) Данные Голба и Баруелла [791]; давление выражено в атмосферах.

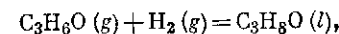
б) В кал/(моль·°K).

в) В кал/моль.

уменьшению ΔHr_{298}° с изменением температуры указывает на отсутствие систематических ошибок в экспериментальных данных, а хорошее совпадение средних значений ΔHr_{298}° , рассчитанных из констант равновесий, полученных при подходе к равновесию с разных сторон, свидетельствует о достижении этого равновесия. Полученное значение ΔHr_{298}° , как правило, значительно меньше величин, опреде-

ленных другими методами. Следует подчеркнуть, что при выборе окончательного значения ΔHr_{298}° следует отдавать предпочтение величине, вычисленной на основании третьего закона, поскольку она найдена с учетом термодинамических функций, определенных из независимых измерений низкотемпературных теплоемкостей, теплоемкостей паров или спектроскопических данных.

Используя приведенную в начале этой главы энтальпию испарения пропанола-2 при 298° K, равную 10 960 кал/моль, и комбинируя ее со средним значением ΔHr_{298}° для реакции



получим $\Delta Hr_{298}^\circ = -24 140$ кал/моль. Эта величина хорошо согласуется с прямым определением энтальпии реакции гидрирования.

Более интересный пример — расчет энтальпии реакции из данных по равновесию, полученных Раффом и Ли. В этом случае функция энергии Гиббса постепенно изменяется с температурой, а линейная интерполяция между интервалами в 100° оказывается достаточно точной. Из данных, приведенных в табл. III.7, видно, что

Таблица III.7

Анализ данных термического равновесия
для газофазной реакции
 $2CF_2O = CO_2 + CF_4$ ^{а)}

Катализатор	T, °K	$\frac{\Delta Gr^\circ}{T}$ ^{б)}	$\frac{\Delta (G_T^\circ - H_{298}^\circ)}{T}$ ^{б)}	ΔHr_{298}° ^{в)}
Ni	573	12,40	-9,89	1 440
Ni	773	11,02	-9,71	1 010
Ni	923	9,37	-9,52	-140
Pt	1273	1,52	-9,24	-9 830
Pt	1273	0,71	-9,24	-10 860
Pt	1373	1,03	-9,16	-11 160
Pt	1473	-1,17	-9,09	-15 113
Pt	1273	-1,42	-9,24	-13 570

а) Данные Раффа и Ли [1267].

б) В кал/(моль·°K).

в) В кал/моль.

значение 26 ккал/моль, полученное Раффом и Ли с использованием первого метода, значительно отличается от величин ΔHr_{298}° , рассчитанных для каждой из температур с использованием известных термодинамических функций участвующих в реакции веществ. Наклон линии, проведенной через первые три значения констант равновесия, полученных с пикелевым катализатором, в координатах

$\lg K_p - 1/T$, заметно отличается от наклона прямой, проходящей через остальные пять экспериментальных точек, полученных с платиновым катализатором при значительно более высокой температуре. Как видно из приведенных данных, константы равновесия реакции, изученной Раффом и Ли, при низких температурах очень малы, поэтому их трудно измерить достаточно точно. Кроме того, не исключено, что при этих температурах полностью не достигалось состояние равновесия. Поэтому наиболее достоверным из всех значений ΔH_{298}° , приведенных в табл. III.7, следует считать значение, рассчитанное из пяти последних констант равновесия, т. е.

$$\Delta H_{298}^\circ(g) = -12 \pm 3 \text{ ккал/моль.}$$

Комбинируя полученное значение с энтальпией образования двуокиси углерода и четырехфтористого углерода для энтальпии образования карбонилфторида, получим

$$\Delta H_{298}^\circ(g) = -152,5 \pm 3 \text{ ккал/моль.}$$

Это значение хорошо согласуется с величиной $-153 \pm 0,20$ ккал/моль, найденной Вартебергом [1572] из теплоты реакции гидролиза CF_2O . Следует отметить, что использованная Дузом [360] для расчета энтальпии образования газообразного CF_2O величина $\Delta H_{298}^\circ = -26$ ккал/моль привела к ошибочному значению $\Delta H_{298}^\circ(g)$, равному -169 ккал/моль. Таким образом, применение функции энергии Гиббса позволяет получить из равновесных данных такую полезную информацию, какую не могут дать достаточно надежно два первых описанных метода.

Определение энтальпий образования другими методами

Для определения энтальпий образования некоторых молекул можно использовать ряд специальных методов. Так, Гейдон [461] и Герцберг [590] предложили применять для определения энергий диссоциации двухатомных молекул спектроскопические данные. Комбинируя величины энергий диссоциации и энтальпий образования газообразных одноатомных элементов, нетрудно рассчитать энтальпии образования двухатомных молекул. Методы определения свободных энергий свободных радикалов описаны Шварцем [1462].

РАСЧЕТ ЭНТРОПИИ

Второй закон термодинамики

Второй закон термодинамики позволяет ввести новую функцию состояния — энтропию. Этот термин, предложенный Клаузиусом [231] в 1865 г., происходит от греческого τρολ'η (что в переводе означает «поворачивать кругом» или «изменять») и используется в краткой формулировке второго закона термодинамики, данной Клаузиусом: «Энтропия вселенной стремится к максимуму»*. Математическое выражение второго закона термодинамики с помощью линейных интегралов для обратимых и необратимых процессов может быть представлено в виде

$$\int_{1_{\text{rev}}}^2 \frac{\delta Q}{T} = f(1, 2) > \int_{1_{\text{actual}}}^2 \frac{\delta Q}{T}. \quad (\text{IV.1})$$

Это выражение можно сформулировать следующим образом: при переходе системы из состояния 1 в состояние 2 линейный интеграл от $\delta Q/T$ для обратимых процессов зависит только от исходного и конечного состояния системы и по своей величине больше соответствующего интеграла для любого реального процесса, связанного с необратимым переходом системы из состояния 1 в состояние 2. Под обратимым процессом подразумевают такой процесс, который протекает под действием бесконечно малой движущей силы (таким образом, изменение направления процесса происходит при бесконечно малом изменении этой силы). Обратимые процессы протекают бесконечно медленно и поэтому являются гипотетическими, предельными случаями реальных или самопроизвольных процессов, которые характеризуются конечными движущими силами и скоростями. Наличие конечных движущих

* Клаузиус, как известно, неправильно трактовал второй закон термодинамики как абсолютный закон природы. В настоящее время бесспорно доказано, что нет никаких оснований переносить законы термодинамики и статистической физики конечных изолированных систем на бесконечную во времени и пространстве вселенную. Правильно сформулированный постулат Клаузиуса гласит, что единственным результатом любой совокупности процессов не может быть переход теплоты от менее нагретого тела к более нагретому. Подробнее об этом см., например: В. Г. Левич, Курс теоретической физики, т. I, изд-во «Наука», М. 1969. — Прим. перев.

сил реальных процессов в свою очередь приводит к их неэффективности, обусловленной потерей энергии системы за счет трения. Как следует из приведенного выражения (IV.1), с математической точки зрения $1/T$ является интегрирующим множителем определенного (или интегрируемого) или неопределенного дифференциала δQ . Второй закон термодинамики позволяет построить абсолютную термодинамическую шкалу температур (T). Знак неравенства в выражении (IV.1) служит основой для оценки термодинамического равновесия и различия между обратимыми и необратимыми процессами, в то время как знак равенства позволяет ввести новую термодинамическую функцию — энтропию, определяемую как

$$S_2 - S_1 = \int_{1_{rev}}^2 \frac{\delta Q}{T},$$

и указать способ ее расчета. В дифференциальной форме

$$dS_{rev} = \frac{\delta Q}{T}. \quad (IV.2)$$

В этом выражении нижний индекс rev указывает на то, что величину ΔS можно вычислить только на основании теплот обратимых процессов.

Изменение энтропии при нагревании системы

Если система нагревается при постоянном объеме, то $dQ_V = C_V dT$ и

$$dS_V = \frac{C_V dT}{T}.$$

Если аналогичный процесс протекает при постоянном давлении, то $dQ_P = C_P dT$ и

$$dS_P = \frac{C_P dT}{T}. \quad (IV.3)$$

Из приведенных соотношений видно, что размерность энтропии совпадает с размерностью теплоемкости, т. е. равна калориям на моль на градус Кельвина [$кал/(моль \cdot ^\circ K)$]. В практических расчетах энтропийную единицу часто обозначают э. е. Интегрирование выражения (IV.3) по температуре дает

$$S_{T_2} - S_{T_1} = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_P dT}{T}. \quad (IV.4)$$

Энтропия смешения

Шоттки и Вагнер [1291] показали, что энтропия смешения взаимодействующих компонентов раствора или взаимодействующих идеальных газов* может быть представлена выражением

$$\Delta S = -R \sum (n_i \ln N_i), \quad (IV.5)$$

где n_i — число молей, а N_i — мольная доля i -х частиц. Энтропия образования 1 моля смеси идеальных газов равна

$$\Delta S = -R \sum (N_i \ln N_i).$$

Следовательно, в случае бинарной смеси, для которой

$$N_1 = N_2 = 0,5, \quad \Delta S = -R (N_1 \ln N_1 + N_2 \ln N_2) = 1,38 \text{ кал}/(\text{моль} \cdot ^\circ K)$$

Энтропия фазовых переходов

Изменения энтропии, связанные с такими фазовыми переходами, как энантиотропные твердофазные превращения, плавление, сублимация или испарение, можно легко вычислить из выражения (IV.2), поскольку они не зависят от температуры. Используя в качестве примера расчет энтропии процесса плавления, находим

$$\Delta S_m = \frac{\Delta H_m}{T}. \quad (IV.6)$$

Вследствие ограничений, налагаемых обратимыми процессами [выражение (IV.2)], расчет изменений энтропии фазовых переходов будет правилен только при условии, если все рассматриваемые фазы находятся в равновесии. Для λ -фазовых переходов или фазовых переходов по Шоттки, которые характеризуются неизотермическим изменением энтальпии, необходимо учитывать соответствующий интеграл от теплоемкости.

Влияние давления на энтропию

Изменение давления влияет на величину энтропии газа, что необходимо учитывать в термодинамических расчетах. Как показано в гл. V, нетрудно получить уравнение

$$\left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_T = - \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P, \quad (IV.7)$$

связывающее зависимость энтропии от давления при постоянной температуре с зависимостью объема от температуры при постоянном давлении. Из этого уравнения следует, что

$$dS = - \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P dP,$$

* При этом предполагают, что давление каждого газа до смешения равно конечному давлению газовой смеси

или для конечного изменения энтропии вещества при изменении давления от начального P_1 до конечного P_2

$$S_2 - S_1 = - \int_{P_1}^{P_2} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P dP. \quad (\text{IV.8})$$

Нетрудно заметить, что в случае идеального газа ($PV = RT$) $\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = \frac{R}{P}$. Подстановка этого значения в выражение (IV.8) дает

$$S_2 - S_1 = -R \ln \left(\frac{P_2}{P_1} \right). \quad (\text{IV.9})$$

Таким образом, поскольку сжатие газа приводит к увеличению его упорядоченности, при возрастании давления от P_1 до P_2 энтропия газа уменьшается на величину $S_2 - S_1$. Так, например, если давление пара хлорбензола при $298,15^\circ \text{K}$ составляет $11,5 \text{ мм рт. ст.}$ [1432], то уменьшение энтропии при сжатии хлорбензола от давления $11,5 \text{ мм рт. ст.}$ до давления 760 мм рт. ст. при этой температуре составит $-1,9873 \ln \frac{760}{11,5} = -8,328 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}$.

При рассмотрении свойств реального газа необходимо подставить в выражение (IV.8) уравнение состояния реального газа. Такие уравнения могут иметь достаточно сложный вид (см., например, Барроу [76] и Уелгнер и Питцер [1588])*. Так, дифференцирование уравнения состояния Бертоло приводит к выражению

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = \frac{R}{P} \left[1 + \frac{27}{32} \frac{PTc^3}{PcT^3} \right],$$

при подстановке которого в уравнение (IV.8) получим

$$S_2 - S_1 = R \left[1 + \frac{27}{32} \frac{RTc^3}{PcT^3} \right] \int_{P_1}^{P_2} \frac{dP}{P} \quad (\text{IV.10})$$

Рассмотрим реальный газ, находящийся при начальном давлении P_1 , и дадим ему расширяться до некоторого давления P_2 , настолько малого, что для всех практических расчетов поведение газа при этом давлении можно рассматривать как идеальное. Затем снова сожмем этот идеальный газ до давления P_1 . В этом процессе величина S_1 — энтропия реального газа, величина S_2 — энтропия идеального газа в стандартном состоянии (S°). Из уравнения (IV.10) и соответствующего уравнения для идеального газа получим

$$S - S_1 = \frac{27}{32} \frac{RTc^3}{PcT^3} P_1. \quad (\text{IV.11})$$

* См. также Э. А. Мелвин-Хьюз Физическая химия, ч. 2, ИЛ. М 1962. — Приж. перев.

Величина $S^\circ - S_1$ представляет собой изменение энтропии в гипотетическом процессе перехода реального газа при давлении P_1 в состояние идеального газа при том же самом давлении. Эту величину часто называют поправкой на неидеальность газа.

Для циклопентана Астон, Финк и Шуман [35] приводят значения T_c , равное 520°K , и P_c , равное $44,2 \text{ атм.}$ Используя эти данные, авторы [35] рассчитали по (IV.11) значение поправки на неидеальность циклопентана при 1 атм. , которая оказалась равной $0,084 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}$.

Третий закон термодинамики

Значения энтропии при температурах, близких к абсолютному нулю, необходимы для решения практических и теоретических термохимических задач, и это в значительной степени стимулировало появление дополнительного постулата, так называемого третьего закона термодинамики. В 1906 г. Нернст [1053] пришел к выводу, что изменение энтропии химической реакции вблизи абсолютного нуля пренебрежимо мало. В 1912 г. Планк [1168] показал, что кристаллическая решетка индивидуального вещества при абсолютном нуле характеризуется максимальной степенью упорядоченности и в связи с этим должна обладать нулевой энтропией. Симон [1350] и позднее Уилкс [1613] рассмотрели развитие этой концепции начиная с тепловой теоремы Нернста и до наших дней. Тепловая теорема Нернста и ее практическое использование были подробно обсуждены Астоном [30]. Льюис и Ренделл [860] раскрыли квантОВО-механическую природу этого постулата и указали на его применимость к химическим системам:

«Если энтропию каждого элемента в некотором кристаллическом состоянии принять равной нулю при температуре 0°K , то каждое вещество при определенной температуре T будет обладать некоторым конечным положительным значением энтропии; однако при температуре абсолютного нуля энтропия может оказаться равной нулю. Такая ситуация имеет место в случае совершенных кристаллических веществ».

Третий закон термодинамики был подтвержден многочисленными химическими и физическими исследованиями, причем вещества, энтропия которых при абсолютном нуле не равнялась нулю, обладали вполне объяснимыми отклонениями от совершенного кристаллического состояния. Анализ значений энтропий органических веществ был проведен Вестрамом и Мак-Каллохом [1598]. Как и следовало ожидать, газы, жидкости, метастабильные стеклообразные фазы, вещества с замороженной разупорядоченностью и растворы не подчиняются третьему закону; нулевой энтропией обладают вещества, находящиеся во внутреннем термодинамическом равновесии при

0° К. Те вещества, которые при 0° К не образуют упорядоченных кристаллических твердых фаз, не имеют $S_0^{\circ} = 0^*$. В качестве примера веществ, не обладающих нулевой энтропией, можно привести смеси *цис*- и *транс*-изомеров, оптически активные изомерные вещества, образующие твердые растворы, и разупорядоченные твердые фазы. «Абсолютное» значение энтропии совершенного кристаллического вещества при температуре T° К можно вычислить, интегрируя выражение (IV.4) в пределах от нуля до T° К и подставляя $S_0^{\circ} = 0$. Строго говоря, для расчета энтропии смесей при 0° К необходимо использовать выражения типа (IV.5). Однако в простых химических реакциях соотношения изотопов и ядерных спиновых состояний не меняются, поэтому обычно такими вкладами в энтропию (и энергию Гиббса) пренебрегают. В таблицах, как правило, приводят практические значения энтропий, используемые в химической термодинамике. Все энтропии, приведенные в данной книге, являются практическими.[‡]

Вычисление энтропии на основе третьего закона термодинамики

Для вычисления абсолютных значений энтропии обычно необходимы экспериментальные значения теплоемкости в интервале от 0° К до исследуемой температуры. Поскольку измерение теплоемкости вблизи абсолютного нуля представляет значительные экспериментальные трудности, в литературе практически отсутствуют значения теплоемкостей ниже 4—10° К. Значение энтропии в этой области часто определяют методом экстраполяции, подставляя уравнение теплоемкости Дебая (II.7) в выражение (IV.4).

В табл. П.6 (см. приложение) приведены значения θ_D и соответствующие им энтропии. В табл. П.1 приведены экстраполированные значения измеренных теплоемкостей 1,2,4-триметилбензола, рассчитанные в предположении пяти степеней свободы и $\theta_D = 103,7^{\circ}$. Таким образом, θ_D/T для 15° К равно 6,91, и для каждой степени свободы $S_{15} = 0,146$ кал/(моль·°К). В таком случае суммарная энтропия при 15° К равна 0,729 кал/(моль·°К), что хорошо согласуется со значением, приведенным Патнамом и Килпатриком [1208].

Выше было показано, что данные по теплоемкостям можно экстраполировать с помощью комбинации функций Дебая и Эйнштейна. а именно

$$3D\left(\frac{80,5}{T}\right) + 6E\left(\frac{155}{T}\right).$$

* Этот вопрос был подробно рассмотрен в работе А. В. Фроста «Расчет химических равновесий газовых реакций» [Успехи химии, 2, 445 (1933)] в связи с использованием третьего закона термодинамики для расчетов химических равновесий. — Прим. перев.

необходимые значения θ_D и θ_E нетрудно рассчитать, используя табл. П.3 П.6, приведенные в приложении. Для 15° К [в кал/(моль·°К)] имеем:

$$\frac{80,5}{T} = 5,366 \text{ дает для } \frac{3D}{T} \quad 0,838$$

$$\frac{155}{T} = 10,333 \text{ дает для } \frac{6E}{T} \quad 0,004$$

Суммарная рассчитанная энтропия при 15° К 0,842

Эта величина примерно на 10% превышает значение, вычисленное по эмпирическому методу, использованному Патнамом и Килпатриком.

Общее выражение для энтропии

Используя приведенные выше термодинамические соотношения, общее выражение для расчета температурной зависимости энтропии вещества, находящегося в стандартном состоянии и характеризующегося энантиотропным превращением при температуре T_t , точкой давления T_m и нормальной точкой кипения T_b , можно представить в виде

$$S_{1000} = S_0 + \int_{0^{\circ}\text{К}}^{T_t} \frac{C_p(\text{II}) dT}{T} + \frac{\Delta H_t}{T_t} + \int_{T_t}^{T_m} \frac{C_p(\text{I}) dT}{T} + \frac{\Delta H_m}{T_m} + \int_{T_m}^{T_b} \frac{C_p(\text{l}) dT}{T} + \frac{\Delta H_v}{T_b} + \int_{T_b}^{1000} \frac{C_p(\text{g}) dT}{T}. \quad (\text{IV.12})$$

Вычисление энтропии по данным низкотемпературных теплоемкостей

Энтропии чистых кристаллических веществ можно рассчитать по данным измерения теплоемкостей. Значения теплоемкостей, полученные с помощью криогенных и газовых калориметров различных типов, описанных в гл. II, позволяют рассчитать энтропию и ее изменения в процессе фазовых переходов.

В низкотемпературном калориметре, аналогичном описанному выше, Гатри, Скотт, Хаббард, Катц, Мак-Каллох, Гросс, Уильямсон и Уаддингтон [551] определили теплоемкость жидкого и твердого фурана, его энтальпии плавления и испарения, а также давление пара и теплоемкость газообразного фурана. Полученные данные

графически изображены на рис. IV.1. В табл. IV.1 приведен расчет энтропии жидкого фурана на основе третьего закона термодинамики с использованием этих данных.

Таблица IV.1

Энтропия фурана^{a)}

T, °K		S
0—12	Экстраполяция по Дебаю, $\theta = 95,5^\circ$; 3,5 степени свободы	0,347
12—150,0	Кристаллическое состояние II, графическое интегрирование $\int C_{\text{satd}} d \ln T$	18,076
150,0	Превращение, 489,2/150,0	3,262
150,0—187,55	Кристаллическое состояние I, графическое интегрирование $\int C_{\text{satd}} d \ln T$	4,047
187,55	Плавление, 908/187,55	4,846
187,55—298,15	Жидкость, графическое интегрирование $\int C_{\text{satd}} d \ln T$	11,638
298,15	Энтропия жидкости	42,22 ± 0,08
298,15	Испарение, 6561/298,15	22,005
298,15	Сжатие, $R \ln (P/760)$	-0,471
		0,112
298,15	Отклонение от состояния идеального газа	63,86 ± 0,11
298,15	Энтропия идеального газа	61,03
298,15	Энтропия, определенная спектроскопическим методом	

^{a)} Данные Гатри и сотр. [551] [кал/(моль·°K)].

Расчет энтропии методом статистической механики

Ввиду экспериментальных трудностей определения теплоемкости газов вначале были известны термодинамические свойства только нескольких газов. Применение квантовой теории к описанию энергетических соотношений молекул газов привело к развитию надежных методов расчета термодинамических свойств простых газообразных веществ. В настоящей книге дается лишь краткий обзор этих методов, поскольку вопросы, связанные с математическим выводом отдельных формул, обоснованием методов и границами их применения, можно легко найти в классических работах по ста-

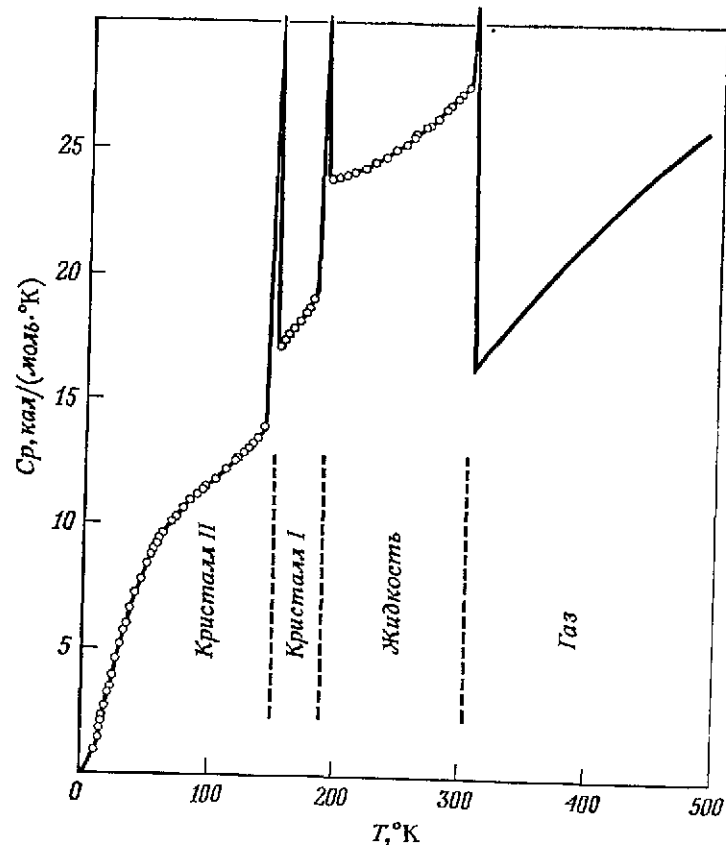


Рис. IV.1. Теплоемкость фурана.
По данным Гатри, Скотта, Хаббарда, Натца, Мак-Каллоха, Гросса, Уильямсона и Уаддингтона [551]

статистической механике и статистической термодинамике [436, 602, 603, 842, 942, 1036, 1292, 1619] *.

Различные возможные энергетические состояния молекулы обычно с большой степенью точности можно рассматривать как независимые. Кроме того, можно вычислить распределение энергии между такими состояниями молекулы с помощью математических соотношений, называемых функциями распределения. Соответствующее суммирование по всем функциям распределения позволяет вычислить термодинамические характеристики газа. Так, абсолютную энтропию всей молекулы (S_{tot}) можно представить в виде суммы энтропии поступательного движения молекулы (S_{tr}), энтропии вращательного движения всей молекулы (S_{or}), энтропии внутреннего вращения (S_{ir}) и энтропии колебательного движения S_{vib}

$$S_{\text{tot}} = S_{\text{tr}} + S_{\text{or}} + S_{\text{ir}} + S_{\text{vib}}. \quad (\text{IV.13})$$

Рассмотрим методы расчета каждого энтропийного составляющего.

Энтропия поступательного движения

Сакур [1273] в 1911 г. предложил выражение для расчета энтропии моноатомного газа, хорошо согласующееся с экспериментальными данными. Любая газообразная молекула обладает только тремя поступательными степенями свободы, поэтому одно и то же выражение дает поступательный вклад в энтропию любой молекулы.

Поступательная энтропия равна

$$S_{\text{tr}} = \frac{3}{2}R \ln M + \frac{3}{2}R \ln T + R \ln V + \frac{5}{2}R + C,$$

где M — молекулярный вес газа, T — абсолютная температура, V — мольный объем, R — постоянная идеального газа, отнесенная на один моль, и C — константа для всех веществ. Спустя год Тетроде [1480] показал, что константа C имеет вид

$$R \ln \frac{(2\pi k)^{3/2}}{h^3 N^{3/2}} = -16,0412 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)},$$

где k — константа идеального газа, отнесенная к одной молекуле, h — постоянная Планка, а N — число Авогадро. Комбинируя два приведенных выражения, получим уравнение Сакура — Тетроде:

$$S_{\text{tr}} = \frac{3}{2}R \ln M + \frac{3}{2}R \ln T + R \ln V - 11,0731 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}, \quad (\text{IV.14})$$

* См. также В. М. Грязнов, А. В. Фрост, Статистические методы расчета термодинамических величин, изд-во Всесоюзного химического общества им. Д. И. Менделеева, М., 1949; И. Н. Годнев, Вычисление термодинамических функций по молекулярным данным, Гостехтеоретиздат, М., 1956; А. Г. Самойлович, Термодинамика и статистическая физика, Гостехтеоретиздат, М., 1955 — Прим. перев.

которое в случае идеального газа при температуре 298,15°K и давлении 1 атм принимает вид

$$S_{\text{tr}} = 6,8637 \log M + 25,8182 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}. \quad (\text{IV.15})$$

Энтропия вращения

Для определения термодинамических функций молекул необходимо знать моменты инерции вокруг центра массы молекулы, как двухатомной, линейной многоатомной, так и неллинейной. Для такого расчета требуются атомные массы, межатомные расстояния и валентные углы в молекуле. Большая часть этих данных обычно определяется методом электронной дифракции. Анализ данных, полученных этим методом начиная с середины 1954 г., был проведен Уиландом [1602]. Им были составлены специальные таблицы, содержащие сведения о длинах связи и углах для более чем 600 органических молекул. Величины, приведенные в табл. IV.2, получены усреднением измеренных значений для данной длины связи или валентного угла молекулы, взятых из каталога Уиланда. Эти величины можно использовать для аппроксимации структур неисследованных молекул.

Для расчета моментов инерции линейных молекул необходимо определить только положение центра массы молекулы и провести суммирование моментов инерции каждого атома, поскольку момент инерции i -го атома равен

$$I_i = (m_i d_i)^2,$$

где d_i — расстояние (в сантиметрах) от i -го атома до центра массы молекулы, а m_i — масса атома в граммах. Линейная молекула может вращаться вокруг двух перпендикулярных осей, поэтому ее моменты инерции будут равны друг другу:

$$I_y = I_z = \sum (m_i d_i^2). \quad (\text{IV.16})$$

Методы расчета моментов инерции неллинейных многоатомных молекул более сложны. Впервые они были рассмотрены Хиршфельдером [608]. Хиршфельдер предложил метод, суть которого сводится к следующему. Из данных по массам, углам и расстояниям строится пространственная диаграмма, с помощью которой определяется положение каждого атома относительно трех координатных осей x , y и z . Затем для каждого атома записываются картезианские координаты x_i , y_i и z_i и вычисляется произведение трех главных моментов инерции, равное детерминанту:

$$I_x I_y I_z = \begin{vmatrix} A & -D & -E \\ -D & B & -F \\ -E & -F & C \end{vmatrix} = ABC - AF^2 - CD^2 - 2DEF - RE^2,$$

Таблица IV.2

Длина связей и валентные углы^{a)}

Связь	Длина, А	Валентные углы			
		тетраэдрический	плоский	линейный	другие
<i>Простые связи</i>					
H—C	1,08	—C—H 109°	=C/H 120°	≡C—H 180°	
H—N	1,02	—N—H 109°			=N/H 108°
H—O	0,96				—O—H 105°
H—Si	1,48	—Si—H 109°			
H—P	1,42	—P—H 100°			=P/H 100°
H—S	1,33				—S—H 96°
C—C (цепь)	1,53	—C—C 109°	=C/C 120°	≡C—C 180°	
C—C (в ароматическом соединении)	1,39		=C/C 120°		
C—N (цепь)	1,45	—C—N 109°	=C/N 120°	≡C—N 180°	=C=N 180°
C—N (кольцо)	1,34		=C/N 120°	≡C—O 180°	
C—O	1,40	—C—O 111°	=C/O 120°		
C—Si	1,88	—C—Si 111°			C—P—C 100°
C—P	1,90				—S—C 103°
C—S	1,80	S—C—S 114°			
C—F	1,35	—C—F 109°	=C/F 120°	≡C—F 180°	
C—Cl	1,75	—C—Cl 109°	=C/Cl 120°	≡C—Cl 180°	
C—Br	1,91	—C—Br 109°	=C/Br 120°	≡C—Br 180°	
C—I	2,06	—C—I 109°	=C/I 120°	≡C—I 180°	
N—N	1,47		N—N/H 127°		
N—O	1,37				=N/O 110°
N—S (цепь)	1,75				—N/S 107°
N—S (кольцо)	1,60				—N/S 104°

Продолжение табл. IV.2

Связь	Длина, А	Валентные углы			
		тетраэдрический	плоский	линейный	другие
N—Cl	1,69				—N/Cl 110°
O—O	1,46		O—O/H 102°		
O—P	1,65		O—P/O 99°		P—O/P 128°
O—S	1,70		O—S/O 120°		S—O/S 120°
O—Cl	1,69				S—S 105°
S—S	2,07				
<i>Двойные связи</i>					
C=C	1,34		C=C 120°	=C=C 180°	
C=N	1,22		N=C 120°	=C=N 180°	
C=O	1,22		O=C 120°	=C=O 180°	
C=S	1,61		S=C 120°	=C=S 180°	
N=N (цепь)	1,26		N=N 120°		
N=N (кольцо)	1,39		N=N 120°		
N=O	1,22		N=N 120°		
S=O	1,44		O=S 120°		
P=O	1,54				
<i>Тройные связи</i>					
C≡C	1,20			C≡C— 180°	
C≡N	1,15			N≡C— 180°	
N≡N	1,11			N≡N= 180°	

а) Усредненные значения по данным Уиланда [1602].

где

$$A = \sum m_i (y_i^2 + z_i^2) - \frac{1}{M} \left(\sum m_i y_i \right)^2 - \frac{1}{M} \left(\sum m_i z_i \right)^2,$$

$$B = \sum m_i (x_i^2 + z_i^2) - \frac{1}{M} \left(\sum m_i x_i \right)^2 - \frac{1}{M} \left(\sum m_i z_i \right)^2,$$

$$C = \sum m_i (x_i^2 + y_i^2) - \frac{1}{M} \left(\sum m_i x_i \right)^2 - \frac{1}{M} \left(\sum m_i y_i \right)^2,$$

$$D = \sum m_i x_i y_i - \frac{1}{M} \left(\sum m_i x_i \right) \left(\sum m_i y_i \right),$$

$$E = \sum m_i x_i z_i - \frac{1}{M} \left(\sum m_i x_i \right) \left(\sum m_i z_i \right),$$

$$F = \sum m_i y_i z_i - \frac{1}{M} \left(\sum m_i y_i \right) \left(\sum m_i z_i \right),$$

$$M = \sum m_i = \text{молекулярный вес в граммах.}$$

(IV.17)

Обычно удобнее выражать массы в граммах и расстояния в ангстремах (10^{-8} см) и обозначать такие моменты инерции штрихом, например I' . Тогда

$$I_x = \frac{I'_x}{6,023 \cdot 10^{23} \cdot (10^8)^2} = \frac{I'_x}{6,0231 \cdot 10^{39}},$$

откуда

$$I_x I_y I_z = \frac{I'_x I'_y I'_z}{218,504 \cdot 10^{117}}. \quad (\text{IV.18})$$

Другим фактором, который необходимо учитывать при вычислении энтропии, является число симметрии σ . В современных расчетах число симметрии разбивают на два слагаемых: на число симметрии молекулы в целом (σ_w) и число симметрии вращающейся части молекулы (σ_r). Полное число симметрии (σ_t) является произведением всех чисел симметрии молекулы

$$\sigma_t = \sigma_w \sigma_r. \quad (\text{IV.19})$$

Число симметрии σ_w можно определить как число положений, которые может занимать жесткая многоатомная молекула, совпадая при вращении со своей первоначальной конфигурацией. Например, для молекулы окиси углерода $\text{C}=\text{O}$ $\sigma_w = 1$. Для молекулы CO_2 $\text{O}=\text{C}=\text{O}$ $\sigma_w = 2$. Для такой тетраэдрической молекулы, как молекула метана CH_4 , $\sigma_w = 12$, поскольку для каждой из четырех ориентаций молекулы существует три собственные ориентации метильной группы. Для молекулы хлористого метила H_3CCl $\sigma_w = 3$, поскольку для одной ориентации молекулы можно указать три ориентации метильной группы, т. е. $1 \cdot 3$.

Если часть молекулы способна вращаться относительно остальной ее части, то симметрия вращающейся части может внести дополнительные нефиксированные положения. Это приводит к необходимости введения второго числа симметрии (σ_r). Так, например, жесткая молекула этана $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$ может вращаться вокруг оси, перпендикулярной связи $\text{C}-\text{C}$, поэтому обладает двумя одинаковыми положениями. В то же время вращение молекулы может происходить и вокруг связи $\text{C}-\text{C}$ на 360° через три одинаковых положения. Таким образом, $\sigma_w = 2 \cdot 3 = 6$. Помимо этого, одна метильная группа может вращаться на 360° вокруг второй неподвижной метильной группы, проходя через три одинаковых положения, так что $\sigma_r = 3$. Таким образом, $\sigma_t = 18$. Для молекулы разветвленного углеводорода с числом метильных групп, равным n , существует 3^n различных положения метильных групп в молекуле, поэтому $\sigma_r = 3^n$. Например, молекула неопентана C_5H_{12} обладает $\sigma_w = 12$ (как и у метана) и тремя дополнительными положениями каждой из четырех метильных групп, так что $\sigma_r = 3^4$ и $\sigma_t = 972$.

Аминогруппа (например, CNH_2) обладает структурой пирамиды и имеет σ_r , равное 1. Группа $\text{C}-\text{O}-\text{H}$ нелинейна и обладает

Таблица IV.3

Числа симметрии				
Молекула	σ_w	σ_r	σ_t	Литература
Бензол	12	1	12	[1477]
Толуол	1	6	6	[1477]
Этилбензол	1	6	6	[1477]
o-Ксилол	2	9	18	[1477]
m-Ксилол	2	9	18	[1477]
p-Ксилол	4	9	36	[1477]
1,3,5-Триметилбензол	6	27	162	[1477]
Гексаметилбензол	12	729	8748	[577]
Фенол	1	2	2	[392]
Анилин	1	2	2	[391]
Тиофенол	1	2	2	[1319]
Бифенил	4	2	8	[725]

$\sigma_r = 1$. В табл. IV.3 приведены числа симметрии для некоторых ароматических молекул.

Для линейной газообразной молекулы вклад в энтропию, обусловленный вращением всей молекулы, равен

$$S_{\text{от}}^{\circ} = R + R \ln \left(\frac{8\pi^2 I k T}{h^2 \sigma_w} \right). \quad (\text{IV.20})$$

Подстановка соответствующих констант в это уравнение приводит к выражению

$$S_{\text{от}}^{\circ} = 4,5758 [\lg (I \cdot 10^{39}) + \lg T - \lg \sigma_w] - 0,7804 \text{ кал}/(\text{моль} \cdot ^\circ\text{K}). \quad (\text{IV.21})$$

Для нелинейной газообразной молекулы вклад в энтропию от вращения всей молекулы составляет

$$S_{\text{от}}^{\circ} = 1,5R + R \ln \left[\frac{\pi^{3/2}}{\sigma_w} \left(\frac{8\pi^2 k T}{h^2} \right)^{3/2} (I_x I_y I_z) \right]^{1/2}.$$

Подстановка констант в это уравнение дает

$$S_{\text{от}}^{\circ} = 2,2879 \lg (I_x I_y I_z \cdot 10^{117}) - 4,5758 \lg \sigma_w + 6,8637 \lg T - 0,0332 \text{ кал}/(\text{моль} \cdot ^\circ\text{K}). \quad (\text{IV.22})$$

Энтропия внутреннего вращения

Помимо вращения всей молекулы, для многих газообразных соединений необходимо учитывать внутреннее вращение двух или более групп в молекуле. Вклад в энтропию за счет свободного вращения

одной группы молекулы равен

$$S_{\text{tr}}^{\circ} = 1/2 R + R \ln (8\pi^3 k I_r T)^{1/2}.$$

Подставляя значения соответствующих констант и выражая I_r (момент вращения фрагмента вокруг его оси) в $\text{г}\cdot\text{см}^2$, получим [в $\text{кал}/(\text{моль}\cdot^{\circ}\text{К})$]

$$S_{\text{tr}}^{\circ} = 3,0348 - 4,5758 \lg \sigma_r + 2,2879 \lg (I_r \cdot 10^{38}) + 2,2879 \lg T. \quad (\text{IV.23})$$

Если внутреннее вращение заторможено, удобно использовать таблицы, предложенные Питцером [1156] и Питцером и Гуинном [1162] и приведенные в приложении (табл. П.7—П.10). В случае симметричных волчков для расчета параметра $1/Q_f$ можно использовать уравнение (II.11), подставляя $n_r = \sigma_r$. Величину уменьшения энтропии вследствие влияния потенциального барьера V находят в таблицах. Если учитывать вклад свободного вращения по уравнению (IV.23), приведенные таблицы также можно использовать для несимметричных волчков, центр тяжести которых лежит вблизи оси вращения. Несимметричный волчок обычно связан с атомом углерода, который в свою очередь тетраэдрически связан с тремя другими группами, поэтому при полном повороте преодолевает три максимума потенциальной энергии. В первом приближении обычно полагают, что эти максимумы равны. В таком случае нетрудно вычислить параметр $1/Q_f$, используя выражение (II.11) при $n_r = 3$ и заимствуя величину уменьшения энтропии за счет потенциального барьера V из таблиц Питцера и Гуинна. Для вычисления вкладов в энтропию за счет заторможенного вращения внутренних ротаторов был предложен ряд других методов, например метод Халфорда [563]. Этот метод представлен в табл. П.12 и легко может быть использован для расчета.

Энтропия колебания

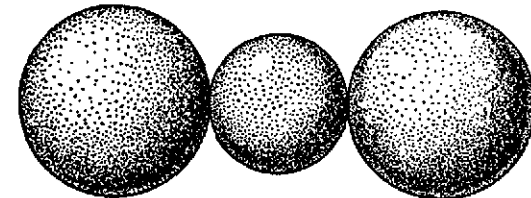
Эйнштейн на основе тех же теоретических предпосылок, из которых было выведено уравнение (II.6), получил следующее выражение для вклада каждого гармонического осциллятора в энтропию:

$$S_{\text{vib}} = R \left[\frac{x}{e^x - 1} - \ln (1 - e^{-x}) \right]. \quad (\text{IV.24})$$

В этом выражении $x = hc\omega/kT$, h — постоянная Планка, ω — волновое число колебательного движения (т. е. значение, обратное длине волны, выраженное в см^{-1}), k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура. Значения этой функции приведены в табл. П.3 (см. приложение). Для многоатомной молекулы суммирование вкладов от каждой нормальной координатной частоты с соответствующими энтропийными составляющими поступательного и вращательного движения дает полную энтропию молекулы. Рассмотрим несколько примеров, иллюстрирующих применение приведенных выше уравнений.

Линейная молекула сероуглерода схематически изображена на рис. IV.2; молекулярный вес 76,143. Из табл. IV.2 находим, что межатомное расстояние $\text{C} = \text{S}$ равно 1,61 А. Браун и Манов [175] для этого соединения приводят следующие колебательные частоты, выраженные в см^{-1} : 1523 (1), 655,5 (1), 396,8 (2). Числа, приведенные в скобках, соответствуют степени вырождения g_i . Число симметрии

Рис. IV.2. Схематическое изображение молекулы сероуглерода.



молекулы сероуглерода $\sigma_o = 2$. Подстановка этих значений в выражение (IV.15) дает при $298,15^{\circ}\text{К}$: $S_{\text{tr}} = 6,8637 \lg 76,143 + 25,8182 = 38,7331 \text{ кал}/(\text{моль}\cdot^{\circ}\text{К})$. Используя уравнение (IV.16), получим моменты инерции молекулы вокруг осей y и z :

$$I_y = I_z = 2 \left[\frac{32,066}{6,023 \cdot 10^{23}} \cdot (1,61 \cdot 10^{-8})^2 \right] = 2 (5,324 \cdot 10^{-23}) (2,592 \cdot 10^{-16}) = 27,60 \cdot 10^{-39} \text{ г}\cdot\text{см}^2.$$

Подставляя найденное значение момента инерции в выражение (IV.21), находим для температуры $298,15^{\circ}\text{К}$

$$S_{\text{or}}^{\circ} = 4,5758 (\lg 27,60 + \lg 298,15 - \lg 2) - 0,7804 = 15,758 \text{ кал}/(\text{моль}\cdot^{\circ}\text{К}).$$

Значения x для каждого из трех колебательных волновых чисел, отвечающих соответствующему энтропийному вкладу при $298,15^{\circ}\text{К}$, находим в приложении в табл. П.3. Принимая во внимание степень вырождения, получим значения, приведенные в табл. IV.4. Этот

Таблица IV.4

ω_i , см^{-1}	g_i	$x_i = \frac{hc\omega_i}{kT}$	$\frac{S_i^{\circ}}{R}$	$g_i S_i^{\circ}$, $\text{кал}/(\text{моль}\cdot^{\circ}\text{К})$
397	2	1,946	0,48992	1,9472
656	1	3,166	0,18248	0,3626
1523	1	7,350	0,00537	0,0106

$$S_{\text{vib}} = 2,320$$

$$S_{\text{or}} = 15,758$$

$$S_{\text{tr}} = 38,733$$

$$S_{\text{tot}} = 56,811$$

АТОМ	x_i	x_i^2	y_i	y_i^2	z_i	z_i^2
Br	-1,91 (1,09 cos72°)	3,6481	0 (1,09 sin72°)	0	0	0
H ₁	0,319	0,1018	1,0443 (-1,036 sin30°)	1,0733	0	0
H ₂	0,319	0,1018	-0,518	0,2683	-0,897 (-1,036 cos30°)	0,8046
H ₃	0,319	0,1018	-0,518	0,2683	+0,897	0,8046

АТОМ	$m_i x_i$	$m_i y_i$	$m_i z_i$
Br	-152,6396	0	0
H ₁	0,3215	1,0443	0
H ₂	0,3215	-0,5221	-0,9042
H ₃	0,3215	-0,5221	+0,9042

АТОМ	$m_i x_i y_i$	$m_i y_i z_i$	$m_i x_i z_i$
Br	0	0	0
H ₁	0,3331	0	0
H ₂	-0,1665	-0,4683	0,2884
H ₃	-0,1665	0,4683	-0,2884
	0	0	0

АТОМ	$m_i (x_i^2 + y_i^2)$	$m_i (y_i^2 + z_i^2)$	$m_i (x_i^2 + z_i^2)$
Br	291,4515	0	291,5415
H ₁	1,1857	1,0818	0,1026
H ₂	0,3731	1,0815	0,9136
H ₃	0,3731	1,0815	0,9136
	293,4734	3,2448	293,4713

$$\frac{1}{94,951} = 0,010532$$

$$A = 3,2448 - 0,010532(0) - 0,010532(0) = 3,2448,$$

$$B = 293,4713 - 0,010532(151,6751)^2 - 0,010532(0) = 51,1792,$$

$$C = 293,4734 - 0,010532(151,6751)^2 - 0,010532(0) = 51,1813,$$

$$D = 0 - 0,010532(0)(151,6751) = 0,$$

$$E = 0 - 0,010532(151,6751)(0) = 0,$$

$$F = 0 - 0,010532(0)(0) = 0.$$

$$I_x' I_y' I_z' = (3,2448)(51,1792)(51,1813) - 0 - 0 - 2(0) - 0 = 8499,5,$$

$$I_x I_y I_z = \frac{8499,5}{218,5 \cdot 10^{117}} = 38,899 \cdot 10^{-117},$$

$$I_y I_z = \frac{38,899 \cdot 10^{-117}}{5,399 \cdot 10^{-40}} = 7204 \cdot 10^{-80},$$

$$I_y = I_z = (7204 \cdot 10^{-80})^{1/2} = 84,88 \cdot 10^{-40} \text{ г} \cdot \text{см}^2$$

расчет является проверкой аналогичного расчета, выполненного Гроссом [295], причем полученная Гроссом величина энтропии оказалась равной 56,84 кал/(моль·°К). Браун и Манов [175] определили энтропию CS₂ на основании третьего закона термодинамики и нашли, что S_{319,35}⁰ этой молекулы в состоянии идеального газа равна 57,60 кал/(моль·°К). Пересчитывая эту величину для соответствующей температуры с помощью средних значений теплоемкости [11,01 × (319,35 - 298,15)]/308,75 = 0,76], находим энтропию сероуглерода S_{298,15}⁰, ideal gas = 56,84 кал/(моль·°К). Это значение в пределах экспериментальных ошибок хорошо согласуется с рассчитанной величиной.

Молекула бромистого метила схематически изображена на рис. II.9, молекулярный вес 94,951. Эган и Кемп [373] приводят для нее следующие межатомные расстояния и углы: C — Br, 1,91А; C — H, 1,09А; < H — C — H 111°. Из этих данных можно рассчитать < Br — C — H, равный 107°57'. Для молекулы бромистого метила число симметрии σ_w = 3. Вейсман, Бернштейн, Россер, Майстер и Клевеленд [1584] приводят для нее следующие фундаментальные частоты (в см⁻¹) и степени вырождения: 618 (1), 953 (2), 1290 (1), 1453 (2), 2965 (1), 3082 (2). Используя выражение (IV.15), при 298,15° К получим

$$S_{tr} = 6,8637 \lg 94,951 + 25,8182 = 39,3911 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°К)}.$$

Выражение (IV.16) позволяет рассчитать моменты инерции молекулы бромистого метила вокруг оси третьего порядка (или оси x):

$$I_x = \frac{3 \times 1,008 \times (1,09 \sin 72^\circ 3')^2}{6,023 \times 10^{23} \times (10^8)^2} = 5,399 \cdot 10^{-40} \text{ г} \cdot \text{см}^2.$$

Другие моменты инерции молекулы бромистого метила можно вычислить путем тщательного построения на диаграмме ее ортогографической проекции (рис. II.9). Подстановка необходимых величин в выражение (IV.17) приводит к набору цифровых значений, приведенных в табл. IV.5. Подстановка полученных величин в уравнение (IV.22) дает при 298,15°К

$$S_{or} = 2,2879 \lg 38,899 - 4,5758 \lg 3 + 6,8637 \lg 298,15 - 0,0332 = 18,405 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°К)}.$$

Колебательные вклады в энтропию легко определить из табл. II.3 (см. приложение), используя значения x, связанные с фундаментальными частотами (табл. IV.6).

Полученное путем расчета значение энтропии молекулы бромистого метила хорошо согласуется с калориметрической величиной, определенной Эганом и Кемпом [373] при 298,10° К и равной 58,61 ± 0,10 кал/(моль·°К).

Интересным примером внутреннего вращения является молекула 1,1,1-трифторэтана, схематически изображенная на рис. II.12.

Таблица IV.6

ω_i , см ⁻¹	g_i	$x_i = \frac{hc\omega_i}{kT}$	$\frac{S_i^0}{R}$	$g_i S_i^0$, кал/(моль·°К)
618	1	2,982	0,21125	0,4198
953	2	4,599	0,05681	0,2258
1290	1	6,255	0,01432	0,0285
1453	2	7,012	0,00722	0,0287
2965	1	14,039	0,00001	0,0000
3082	2	14,873	0,00001	0,0000

$S_{\text{vib}} = 0,703$
 $S_{\text{tr}} = 39,391$
 $S_{\text{or}} = 18,405$

 $S_{\text{tot}} = 58,499$

В качестве наиболее согласующихся из трех наборов значений межатомных расстояний и углов, приводимых Уиландом [1602], воспользуемся следующими: C — C, 1,54А, C — F, 1,33А, C — H, 1,09А; \angle FCF, 108,5°; \angle HCC, 109°28'. Из этих данных нетрудно рассчитать \angle FCC, равный 110°26'. Молекула 1,1,1-трифторэтана обладает числом симметрии $\sigma_w = 3$. Нилсен, Классен и Смит [1070] приводят для нее следующие фундаментальные колебательные частоты (выраженные в волновых числах, см⁻¹) и степени их вырождения (в скобках): 238 (1), 365 (2), 541 (2), 603 (1), 830 (1), 969 (2), 1232 (2), 1278 (1), 1408 (1), 1443 (2), 2978 (1), 3036 (2).

Подставляя значение молекулярного веса (84,046) в выражение (IV.15), нетрудно рассчитать величину поступательной энтропии газообразного 1,1,1-трифторэтана при 298,15° К:

$$S_{\text{tr}} = 6,8637 \lg 84,046 + 25,8182 = 39,0275 \text{ кал/(моль·°К)}.$$

Вычисление моментов вращения всей молекулы 1,1,1-трифторэтана с помощью уравнения (IV.16) значительно облегчается, если использовать графическое изображение ее ортогографической проекции (см. рис. II.12). Координаты молекулы, полученные методом графического построения, дают набор величин, приведенный в табл. IV.7. Подстановка этого значения в выражение (IV.22) дает (при 298,15° К)

$$S_{\text{or}} = 2,2879 \lg 3996,4 - 4,5758 \lg 3 + 6,8637 \lg 298,15 - 0,0332 = 23,0075 \text{ кал/(моль·°К)}.$$

Как показано на стр. 59, наименьшая колебательная частота 238 (1) в действительности является частотой крутильных колебаний групп H₃C и CF₃ вокруг связи C — C с потенциальным барьером

Таблица IV.7

Атом	x_i	x_i^2	v_i	v_i^2	z_i	z_i^2
H ₁	-0,770	0,593	0	0	0	0
H ₂	0,770	0,593	0	0	0	0
F ₁	1,237	1,530	-0,623	0,388	1,079	1,164
F ₂	1,237	1,530	1,246	1,552	0	0
F ₃	1,237	1,530	-0,623	0,388	-1,079	1,164
H ₁	-1,133	1,284	0,513	0,263	-0,889	0,790
H ₂	-1,133	1,284	-1,027	1,055	0	0
H ₃	-1,133	1,284	0,513	0,263	0,889	0,790

Атом	$m_i x_i$	$m_i v_i$	$m_i z_i$
C ₁	-9,248	0	0
C ₂	9,248	0	0
F ₁	23,503	-11,837	20,501
F ₂	23,503	23,674	0
F ₃	23,503	-11,837	-20,501
H ₁	-1,142	0,517	-0,896
H ₂	-1,142	-1,035	0
H ₃	-1,142	0,517	0,896
	67,083	0	0

Атом	$m_i x_i v_i$	$m_i v_i z_i$	$m_i x_i z_i$
C ₁	0	0	0
C ₂	0	0	0
F ₁	-14,642	-12,772	25,359
F ₂	20,284	0	0
F ₃	-14,642	12,772	-25,359
H ₁	-0,586	-0,460	1,015
H ₂	1,172	0	0
H ₃	-0,586	0,460	-1,015
	0	0	0

Атом	$m_i(x_i^2 + v_i^2)$	$m_i(v_i^2 + z_i^2)$	$m_i(x_i^2 + z_i^2)$
C ₁	7,122	0	7,122
C ₂	7,122	0	7,122
F ₁	36,442	29,488	54,186
F ₂	58,558	29,488	29,070

Продолжение табл. IV.7

АТОМ	$m_i(x_i^2 + y_i^2)$	$m_i(y_i^2 + z_i^2)$	$m_i(x_i^2 + z_i^2)$
F ₃	36,442	29,488	51,186
H ₁	1,559	1,061	2,091
H ₂	2,358	1,063	1,294
H ₃	1,559	1,061	2,091
	151,162	91,649	151,162
	$\frac{1}{84,046} = 0,011898,$		

$$A = 91,649 - 0,01190(0)^2 - 0,01190(0)^2 = 91,649,$$

$$B = 151,162 - 0,01190(67,083)^2 - 0,01190(0)^2 = 97,611,$$

$$C = 151,162 - 0,01190(67,083)^2 - 0,01190(0)^2 = 97,611,$$

$$D = 0 - 0,01190(67,083)(0) = 0,$$

$$E = 0 - 0,01190(67,083)(0) = 0,$$

$$F = 0 - 0,01190(0)(0) = 0.$$

$$I_x I_y I_z = (91,649)(97,611)(97,611) - (0) - (0) - (0) - (0) = 873223,$$

$$I_x I_y I_z = \frac{873223}{218,5 \cdot 10^{117}} = 3996,4 \cdot 10^{-117}.$$

3,52 ккал/моль, препятствующим этому вращению. Этот тип заторможенного вращения был рассмотрен Питцером и Гуинном [1162]. Авторы показали, что при подстановке необходимых данных в выражение (II.11), как это показано в примере на стр. 62, получим

$$\frac{1}{Q_f} = 0,2766 \text{ и } \frac{V}{RT} = 5,85.$$

Из табл. П.9 находим энтропийный вклад такого заторможенного ротатора S_{nr} , равный 2,022 кал/(моль·°К).

Колебательный вклад в энтропию определяем из фундаментальных частот и степеней вырождения с помощью табл. П.3. Полученные результаты приведены в табл. IV.8. Рассел, Голдинг и Иост [1270] из низкотемпературных калориметрических измерений при 224,40° К и давлении 0,9330 атм определили величину энтропии $63,814 \pm 0,10$ кал/(моль·°К). Поправка, связанная с неидеальностью газа (0,135), сжатием его до 1 атм ($R \ln 0,933 = -0,138$) и с изменением температуры от 224,40 до 298° К ($\int C_p d \ln T = 4,829$) (ср. [1070, 1527]), приводит к значению энтропии идеального газа $S_{298}^{\circ} = 68,640 \pm 0,15$ кал/(моль·°К). Таким образом, экспериментальная величина хорошо согласуется с вычисленной.

Таблица IV.8

$\omega_i,$ см ⁻¹	g_i	$x_i = \frac{hc\omega_i}{kT}$	$\frac{S_i^{\circ}}{R}$	$g_i S_i^{\circ},$ кал/(моль·°К)
365	2	1,761	0,55408	2,2022
541	2	2,611	0,28331	1,1260
603	1	2,910	0,22368	0,4445
830	1	4,006	0,09266	0,1841
969	2	4,676	0,05333	0,2120
1232	2	5,946	0,01822	0,0724
1278	1	6,168	0,01506	0,0299
1408	1	6,795	0,00873	0,0173
1443	2	6,964	0,00754	0,0299
2978	1	14,372	0,00001	0,0000
3036	2	14,652	0,00001	0,0000

$$S_{\text{vib}} = 4,318$$

$$S_{\text{tr}} = 39,027$$

$$S_{\text{or}} = 23,008$$

$$S_{\text{nr}} = 2,022$$

$$S_{298}^{\circ} (\text{ideal gas}) = 68,375$$

Расчет температурной зависимости энтропии

Существует два основных метода расчета энтропии вещества как функции от температуры. Один из них, справедливый как для газообразной, так и конденсированной фаз, основан на уравнении (IV.12). Для вычисления энтропии по этому методу необходимо иметь соответствующие экспериментальные данные по теплоемкости вещества и провести интегрирование температурной зависимости теплоемкости от 0° К до требуемой температуры. Значение энтропии, найденное таким образом, называется энтропией, полученной на основании третьего закона.

Другой метод расчета, применимый для газообразных веществ и приведенный на стр. 112—126, основан на использовании спектроскопических данных. Значения энтропий, полученные таким способом, часто называются спектроскопическими величинами. Спектроскопические величины более достоверны в тех случаях, когда хорошо известны необходимые для расчета исходные данные. Особенно надежными являются вычисленные значения энтропий для простых молекул, у которых отсутствует внутреннее вращение и для которых можно однозначно провести отнесение частот. Однако для больших

молекул, а также для молекул сложного строения надежность спектроскопического метода несколько понижается за счет неопределенности в исходных величинах и их толковании. Такими факторами являются:

- 1) отпесение частот [неполное или неоднозначное за счет сложности и (или) неточностей в эксперименте или расшифровке спектров];
- 2) детальная, точная конфигурация молекулы (т. е. наличие скошенных, *цис*- и *транс*-изомеров, а также правовращающей, левовращающей, рацематной и мезоформ для оптически активных веществ);
- 3) межатомные расстояния и углы;
- 4) энергии и формы потенциальных барьеров для внутреннего вращения (неизвестные или неточно определенные).

Если известно значение энтропии, полученное на основании третьего закона или из спектроскопических данных при какой-либо одной температуре, то величину энтропии при любой другой температуре нетрудно рассчитать по уравнению (IV.4). Как уже отмечалось выше, за исключением некоторых особых случаев, в данной книге в качестве стандартного состояния органических веществ выбрано состояние идеального газа. Подставляя уравнения теплоемкости для газообразных веществ (II.13) и (II.15) в уравнение (IV.4), получим

$$S_{T_2} = S_{T_1} + \int_{T_1}^{T_2} \left(\frac{a + bT + cT^2}{T} \right) dT = S_{T_1} + a \ln \frac{T_2}{T_1} + b(T_2 - T_1) + \frac{c}{2}(T_2^2 - T_1^2) \quad (IV.25)$$

$$\begin{aligned} S_{T_2} &= S_{T_1} + \int_{T_1}^{T_2} \left(\frac{a'' + b''T + c''T^{-2}}{T} \right) dT = \\ &= S_{T_1} + a'' \ln \frac{T_2}{T_1} + b''(T_2 - T_1) - \frac{c''}{2}(T_2^{-2} - T_1^{-2}), \end{aligned} \quad (IV.26) \quad 3$$

где константы a , b , c , a'' , b'' и c'' имеют те же значения, что и в уравнениях теплоемкости.

Так, например, теплоемкость жидкого этанола описывается уравнением

$$C_p = -10,83 + 0,118T + 0,000025T^2 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}.$$

Согласно измерениям Келли [733], энтропия жидкого этанола при 300° К равна 38,56 кал/(моль·°К). Подставляя эти данные в уравнение (IV.24), при 350°К получим

$$\begin{aligned} S_{350} &= 38,56 - 10,83 \ln \frac{350}{300} + 0,118(350 - 300) + 1,25 \times \\ &\times 10^{-5} [(350)^2 - (300)^2] = 43,20 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}. \end{aligned}$$

Рассчитанное на стр. 67 для такого же интервала температур изменение энтальпии жидкого этанола равно 1508 кал/моль. Для небольших интервалов температур по сравнению с \bar{T} (средней температурой интервала) $\Delta S \approx \Delta H/\bar{T}$ или $S_{350} - S_{300} = 1508/325 = 4,64$ кал/(моль·°К). Как видно, такой расчет служит быстрой и полезной проверкой рассмотренного выше метода.

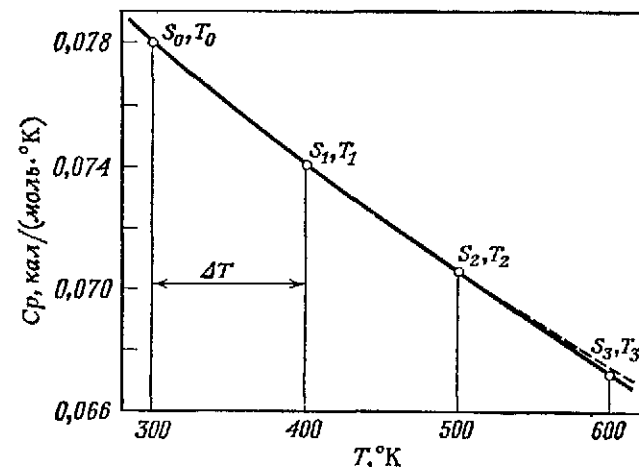
Согласно Барроу [76], энтропия газообразного этанола при 500° К равна 77,40 кал/(моль·°К), а его теплоемкость может быть представлена уравнением

$$C_p = 51,84 - 2,023 \cdot 10^4 T^{-1} + 2,843 \cdot 10^6 T^{-2} \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}.$$

Используя выражение (IV.25), находим для 600° К:

$$\begin{aligned} S_{600} &= 77,40 + 51,84 \ln \frac{600}{500} + 2,023 \cdot 10^4 [(600)^{-1} - (500)^{-1}] - \\ &- 1,421 \cdot 10^6 [(600)^{-2} - (500)^{-2}] = 81,84 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}. \end{aligned}$$

Определенное Барроу уравнение теплоемкости приводит в том же интервале температур к изменению энтальпии газообразного этанола,



Р и с. IV.3. Интегрирование энтропии по правилу парабол Симпсона.

равному 2444 кал/моль. Эта величина позволяет провести проверку полученных величин: $S_{600} - S_{500} \approx 2444/550 = 4,44$ кал/(моль·°К).

При расчете на скоростных электронно-вычислительных машинах удобно представлять значения теплоемкостей в форме таблиц для одинаковых интервалов температур (см. гл. II, стр. 67). Такие значения можно получить из сглаженных кривых, проходящих через экспериментальные точки, или определить аналитически методом интерполяции для значений температур, отличающихся друг от друга на одинаковые интервалы. Правило парабол Симпсона позволяет провести быстрое интегрирование набора таких значений. Как видно из рис. IV.3, отношение каждого значения теплоемкости к соответ-

ствующему ему значению температуры дает набор величин S_0, S_1, S_2, \dots при температурах T_0, T_1, T_2, \dots , отделенных друг от друга одинаковыми интервалами ΔT . Интегрирование на этом участке легко осуществить путем построения параболических дуг, одновременно проходящих через три точки. Так, для температур T_0, T_1 и T_2 изменение энтропии в области двух интервалов ΔT будет равно $S_{T_2} - S_{T_0} = \Delta T (S_0 + 4S_1 + S_2)/3$.

В случае небольших интервалов температур отклонение от линейной зависимости может быть достаточно мало. Это позволяет провести прямое вычисление величины ΔS для данного интервала температур с помощью соотношения

$$S_{T_2} - S_{T_1} = \frac{H_{T_2} - H_{T_1}}{(T_2 + T_1)/2}.$$

Например, таким образом можно рассчитать величину $S_{T_1} - S_{T_0}$ и, вычтя ее из величины $S_{T_2} - S_{T_0}$, получить значение $S_{T_2} - S_{T_1}$ и т. д. С другой стороны, для этой цели можно использовать интервалы температур $\Delta T/2$.

Энтропия газообразного *n*-бутана при $298,15^\circ \text{K}$ равна $74,12 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}$. Изменение энтальпии *n*-бутана в интервале температур от $298,15$ до 300°K было рассчитано ранее и равно 43 кал/моль ; таким образом, $43/299,07 = 0,14 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}$. Изменение энтальпии в интервале $300\text{--}400^\circ \text{K}$ равно 2650 кал/моль , откуда $2650/350 = 7,57 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}$. Используя значения теплоемкостей, приведенные в табл. IV.9, и применяя правило парабол Симпсона, в интервале $300\text{--}500^\circ \text{K}$ находим

$$S_{500} - S_{300} = 100 \left[\frac{0,07800 + 4(0,07400) + 0,07068}{3} \right] = 14,822 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}.$$

Таблица IV.9

Теплоемкость и энтропия газообразного *n*-бутана^{a)}

T, °K	C _p	C _p /T	S	
			вычислено	литературные данные ^{б)}
298,15	23,29	0,07811	74,12	74,12
300	23,40	0,07800	74,26	74,27
400	29,60	0,07400	81,83	81,66
500	35,34	0,07068	89,08	89,10
600	40,30	0,06717	93,96	95,97

^{a)} В $\text{кал/(моль} \cdot \text{K)}$.

^{б)} По данным Персона и Пиментела [1140].

Таким образом, $(S_{500} - S_{300}) - (S_{400} - S_{300}) = (S_{500} - S_{400}) = 14,82 - 7,57 = 7,25 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}$. Следующий двойной интервал равен

$$S_{600} - S_{400} = 100 \left[\frac{0,07400 + 4(0,07068) + 0,06717}{3} \right] = 14,129 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}$$

$(S_{600} - S_{400}) - (S_{500} - S_{400}) = (S_{600} - S_{500}) = 14,13 - 7,25 = 6,88 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}$. Значения энтропий, вычисленные таким способом, приведены в четвертом столбце табл. IV.9. В последнем столбце этой таблицы для сравнения представлены значения энтропии, полученные Персоном и Пиментелом [1140].

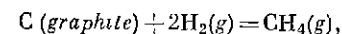
Изменение энтропии химической реакции

Переход простого вещества из состояния А в состояние В сопровождается изменением энтропии $S_B - S_A = \Delta S$. Аналогичная картина имеет место для химической реакции. С помощью обозначений, принятых в гл. III, изменение энтропии в общем виде можно представить следующим образом:

$$\Delta S_r = \sum \nu_i S_i. \quad (\text{IV.27})$$

При рассмотрении процессов и реакций необходимо учитывать состояние веществ, участвующих в превращениях. Для элементарных веществ в качестве стандартного состояния выбирается конденсированное состояние вплоть до таких температур, при которых давление пара элемента достигает 1 атм . При более высоких температурах в качестве стандартного выбирают состояние идеального газа. Практические величины энтропий элементов в стандартном состоянии приведены в гл. VIII и XIV. Как уже отмечалось в гл. I, в настоящей книге, за исключением специальных случаев, в качестве стандартного состояния органических соединений при всех температурах выбрано состояние идеального газа при давлении 1 атм (обозначаемое знаком градуса). Другие состояния, которые могут представлять интерес, нетрудно связать со стандартным состоянием.

В табл. IV.10 приведены практические значения энтропий, полученные путем расчета на основании спектроскопических данных, а также из измерений теплоемкостей в интервале температур от абсолютного нуля до $298,15^\circ \text{K}$ (температура, удобная для сравнения). Из этих данных нетрудно вычислить изменение энтропии гипотетической реакции:



$$\Delta S_{r_{298}} = \Delta S_{f_{298}} \text{CH}_4(\text{g}) = 44,50 - [1,36 + 2(31,24)] = -19,28 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}.$$

В этом примере надстрочный индекс «градус» указывает на то, что каждое вещество находится в своем определенном стандартном состоянии. Символ *f* обозначает, что рассматриваемая реакция является реакцией образования из элементов при опреде-

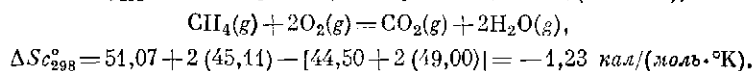
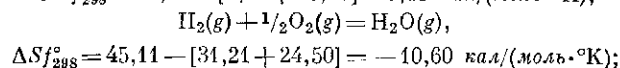
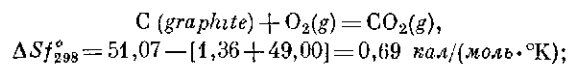
Таблица IV.10
Практические значения молярной энтропии
при 298,15° К^{a)}

Вещество	Состояние	S ₂₉₈ ^o
Графит	(s)	1,36
Водород	(g)	31,21
Метан	(g)	44,50
Кислород	(g)	49,00
Двуокись углерода	(g)	51,07
Вода	(g)	45,11

^{a)} В кал/(моль · °К); см главу VIII.

ленной температуре. Следует отметить, что энтропия системы будет уменьшаться, если система переходит из состояния, характеризующегося меньшей степенью упорядоченности (в приведенном примере — реагирующие вещества), в более упорядоченное состояние (продукты).

В качестве примера других реакций, изменение энтропии которых нетрудно рассчитать из данных табл. IV.10, можно привести следующие:



Следует отметить, что выигрыш в энтропии упорядоченной твердой фазы (графита), превращающейся в результате реакции сгорания в кислороде в газообразное соединение CO₂, не может быть скомпенсирован за счет уменьшения числа молей кислорода в такой же степени, как это имеет место в случае реакции образования метана из элементов.

Расчет изменения энтропии реакции из констант равновесия при двух температурах

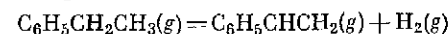
Связь между константой равновесия и изменением энтропии реакции, протекающей при постоянном давлении, нетрудно определить, дифференцируя соотношение $\Delta G^{\circ} = -RT \ln K_p$:

$$-\left(\frac{\partial \Delta G^{\circ}}{\partial T}\right)_P = \Delta S^{\circ} = R \left[T \left(\frac{\partial \ln K_p}{\partial T}\right)_P + \ln K_p \right],$$

Из этого выражения следует, что для средней температуры \bar{T} в сравнительно небольшом интервале температур

$$\Delta S_{\bar{T}}^{\circ} = 4,5758 \left[\bar{T} \left(\frac{\lg K_{p2} - \lg K_{p1}}{T_2 - T_1} \right) + \left(\frac{\lg K_{p2} + \lg K_{p1}}{2} \right) \right] \text{ кал/(моль} \cdot \text{°К)}. \quad (\text{IV.28})$$

Гхош, Гуха и Рой [472] изучили равновесие реакции дегидрирования этилбензола с образованием стирола



и получили следующие значения констант равновесия: $K_{p703} = 4,95 \cdot 10^{-3}$ и $K_{p733} = 1,20 \cdot 10^{-2}$ (давление в атмосферах). Подстановка этих значений в выражение (IV.28) дает

$$\Delta S_{718}^{\circ} = 4,5758 \left\{ 718 \left[\frac{(-1,9208) - (-2,3054)}{733 - 703} \right] + (-2,1131) \right\} = 32,45 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°К)}.$$

Используя данные для участников рассматриваемой реакции, приведенные в таблицах термических свойств, нетрудно рассчитать изменение стандартной энтропии этой же реакции при 700 и 800° К. Полученные величины равны соответственно 30,87 и 31,07 кал/(моль · °К). Учитывая экспериментальные трудности измерения констант равновесия при исследованных температурах, такое совпадение следует считать вполне удовлетворительным.

ЭНЕРГИЯ ГИББСА И ХИМИЧЕСКОЕ РАВНОВЕСИЕ

Энергия Гиббса

Протекание «активных», самопроизвольных реакций, например реакции сгорания углеводов, сопровождается выделением тепла. Поэтому вполне естественно, что такие исследователи, как Бертло [121] и Томсен [1495], пришли к выводу, что количество выделяющегося в процессе реакции тепла является мерой ее «движущей силы». Путем термохимических измерений и применения закона Гесса эти ученые пытались предсказать возможность протекания любой предполагаемой реакции, не проводя никакого лабораторного эксперимента. Однако позднее стало очевидным, что как энтропия, так и энтальпия являются составными частями движущей силы реакции. Новая функция, первоначально носившая название свободной энергии, а в последнее время переименованная в энергию Гиббса, была предложена И. В. Гиббсом [479]. Физико-химический смысл новой функции в дальнейшем был раскрыт в работах Г. Льюиса и М. Ренделла [860]. Эта функция, обозначаемая буквой G , математически определяется соотношением

$$G = H - TS. \quad (V.1)$$

Поскольку функции H и S относятся к экстенсивным свойствам системы, функция G также является однозначным экстенсивным свойством системы, а ее значение не зависит от пути перехода системы из начального состояния 1 в конечное состояние 2. Для изотермического процесса или реакции

$$G_2 - G_1 = \Delta Gr = \Delta Hr - T\Delta Sr. \quad (V.2)$$

Это выражение является одной из форм уравнения Гиббса — Гельмгольца, а величина ΔGr представляет собой изменение энергии Гиббса или свободную энергию реакции. Таким же образом можно определить аналогичную функцию A , выражая ее через энергию и энтропию

$$A = E - TS. \quad (V.3)$$

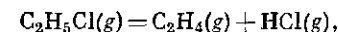
Функция A носит название энергии Гельмгольца или функции работы. Поскольку условия постоянства давления в значительно большей степени используются на практике, функция G оказывается более полезной. Часто эту функцию просто называют энергией Гиббса. Следует отметить, что в ранних работах американ-

ских и советских исследователей функцию G обычно обозначали буквой F ; в других странах букву G обычно применяли для обозначения энергии Гиббса (см. обсуждение в гл. VIII).

Функция ΔGr является истинной мерой движущей силы реакции или процесса. В принципе любая самопроизвольная реакция должна сопровождаться уменьшением энергии Гиббса системы. Если энергия Гиббса системы минимальна, то в системе не происходит никаких дальнейших изменений.

Абсолютные значения энергии Гиббса системы определить невозможно, поскольку в энергию Гиббса входит величина энтальпии. Величину энергии Гиббса можно лишь выразить в виде разности энергий Гиббса двух различных состояний, одно из которых принято за стандартное. В гл. VIII приведены термодинамические величины для стандартного состояния каждого из элементов, входящих в органические соединения, а также данные для некоторых важных неорганических соединений. Аналогичные величины для стандартных состояний органических веществ представлены в виде таблиц в последующих главах. Эти таблицы содержат величины энергии Гиббса, отвечающие образованию соединения в его стандартном состоянии из элементов, находящихся в своих стандартных состояниях. Для соединений в качестве стандартного желательнее выбирать такое состояние, которое отвечало бы наибольшему удобству при использовании, поэтому для большинства приведенных соединений в качестве стандартного используется состояние гипотетического идеального газа при давлении 1 атм. Для некоторых соединений, обладающих очень низким давлением пара, термодинамические данные указаны для твердого или жидкого состояния. В принципе стандартное состояние идеального газа можно использовать непосредственно в расчетах при малых давлениях газовой фазы; при расчете термодинамических свойств веществ при более высоких давлениях нетрудно внести соответствующие поправки к свойствам вещества в состоянии идеального газа, обусловленные его неидеальным поведением при высоком давлении. Энергия Гиббса, связанная с образованием соединения в стандартном состоянии идеального газа, чистой жидкости или в твердом состоянии при давлении 1 атм из элементов, взятых в их стандартных состояниях, называется стандартной энергией образования Гиббса и обозначается надстрочным индексом «градус»: ΔG° .

В качестве примера рассмотрим термодинамические параметры реакции



вычисленные для температуры 298° К на основании термодинамических величин, приведенных в последних главах книги:

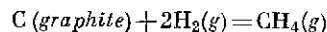
$$\Delta Hr^{\circ} = 17,14 \text{ ккал/моль}, \quad \Delta Sr^{\circ} = 31,15 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°К)},$$

$$\Delta Gr^{\circ} = 7,86 \text{ ккал/моль}.$$

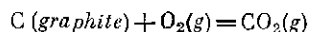
Следовательно, в процессе записанной таким образом реакции происходит увеличение энтальпии и энергии Гиббса. Если использовать в качестве критерия направления процесса и равновесия любую из этих функций, то нетрудно видеть, что рассматриваемая реакция при данных условиях невозможна. Другими словами, хлористый этил при 298° К устойчив по отношению к распаду на этилен и хлористый водород. Рассмотрим теперь термодинамические параметры этой реакции при температуре 1000° К:

$$\Delta H_r^\circ = 17,07 \text{ ккал/моль}, \quad \Delta S_r^\circ = 31,50 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°К)}, \\ \Delta G_r^\circ = -14,42 \text{ ккал/моль}.$$

Как видно, величины изменений энтропии и энтальпии реакции изменились незначительно, тем не менее при 1000° К реакция сопровождается значительным уменьшением энергии Гиббса за счет возросшего вклада члена $T\Delta S_r$. С практической точки зрения это означает, что хлористый этил при высоких температурах будет самопроизвольно диссоциировать на этилен и хлористый водород. Таким образом, приведенный пример подтверждает, что в качестве критерия движущей силы реакции ΔG_r превосходит ΔH_r . Для многих реакций значение ΔS_r невелико, поэтому величина ΔH_r будет для этих реакций близка к ΔG_r . Если рассматриваемая реакция сопровождается уменьшением энтропии, то в этом случае изменение энергии Гиббса будет меньше изменения энтальпии. Например, для реакции

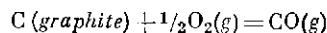


при 298° К $\Delta H_f^\circ = -17,89 \text{ ккал/моль}$, $\Delta S_f^\circ = -19,29 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°К)}$ и $\Delta G_f^\circ = -12,14 \text{ ккал/моль}$. Если изменение энтропии мало, то $\Delta G_r \simeq \Delta H_r$. Например, для реакции



$\Delta H_f^\circ = -94,05 \text{ ккал/моль}$, $\Delta S_f^\circ = 0,68 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°К)}$, $\Delta G_f^\circ = -94,27 \text{ ккал/моль}$. Если в процессе реакции происходит увеличение энтропии, то энергия Гиббса уменьшается в большей степени, чем энтальпия реакции.

Например, для реакции



$\Delta H_f^\circ = -26,42 \text{ ккал/моль}$, $\Delta S_f^\circ = 21,42 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°К)}$ и $\Delta G_f^\circ = -32,80 \text{ ккал/моль}$. Таким образом, метан менее устойчив, а окись углерода более устойчива, чем это следует из величин энтальпий соответствующих реакций.

Как указывалось ранее, протекание химических реакций зависит, помимо энергии Гиббса, от ряда других факторов. Огромное значение имеет кинетика процессов. Так, например, высшие члены ряда алифатических углеводородов характеризуются положительными значениями энергии образования Гиббса (см. таблицы в гл. IX)

и с термодинамической точки зрения должны самопроизвольно распадаться на углерод и низшие соединения, такие, как метан. Однако при 298° К скорость подобных реакций пренебрежимо мала, и такие смеси углеводородов, как керосин и смазочные масла, можно хранить длительное время. Однако при пропускании этих углеводородов над нагретой кирпичной кладкой скорость реакций распада значительно возрастает и образуются большие количества метана. Для протекания органических реакций с достаточно высокими для практических целей скоростями часто необходимо использовать катализаторы и повышенные температуры.

Начинающие исследователи часто стремятся слишком упростить критерий ΔG_r° и рассматривают реакции, характеризующиеся положительными изменениями стандартной энергии Гиббса, как невыгодные с практической точки зрения. Такой упрощенный подход едва ли является правильным, поскольку при оценке возможности протекания реакции необходимо учитывать как величину ΔG_r° , так и тип самой реакции. Некоторые реакции, характеризующиеся небольшими положительными значениями ΔG_r° , могут давать значительный выход желаемого продукта при вполне осуществимых экспериментальных условиях, в то время как реакции с небольшими отрицательными значениями ΔG_r° протекают с практически низкими выходами. Количественный расчет равновесного состава реагирующей системы на основании данных энергий Гиббса обсуждается в следующем разделе этой главы. Здесь следует лишь отметить, что при качественном анализе практической целесообразности осуществления той или иной реакции предпочтение следует отдавать реакциям с отрицательными изменениями стандартной энергии Гиббса; реакции, характеризующиеся небольшими положительными или близкими к нулю значениями ΔG_r° , могут оказаться практически выгодными и поэтому требуют дальнейшего исследования. Реакции с положительным значением, превышающим 10 ккал/моль, возможны только в особых условиях.

Энергия Гиббса и равновесный состав

В главе I дано определение равновесной системы как такой системы, в которой не происходит заметных изменений. Там же рассмотрены два типа равновесия: устойчивое равновесие, при котором система вообще не претерпевает изменений, и замороженное, или метастабильное, равновесие, при котором система изменяет свое состояние с очень малой скоростью. Устойчивое равновесие — это такое состояние, при котором энергия Гиббса системы минимальна по сравнению со всеми возможными состояниями системы при условии постоянства давления и температуры. Неустойчивым равновесием называется такое состояние, при котором энергия Гиббса системы минимальна относительно некоторых, но не всех

возможных состояний системы. Примером устойчивого равновесия является газообразное состояние двуокиси углерода при температуре около 300° K, поскольку не существует других химических частиц, состоящих из углерода и кислорода, которые обладали бы еще меньшими значениями энергии Гиббса. В качестве примера метастабильного равновесия можно привести смесь окиси углерода и кислорода при комнатной температуре. Эта система обладает более низким значением энергии Гиббса, чем свободный углерод и кислород, и, таким образом, является равновесной по сравнению со смесью этих элементов. Однако, поскольку реакция образования двуокиси углерода из CO и O₂ сопровождается уменьшением энергии Гиббса, в системе должно происходить дальнейшее самопроизвольное превращение окиси углерода в двуокись. Однако при комнатной температуре эта реакция протекает настолько медленно, что с практической точки зрения можно считать, что реакция не идет, а сама система находится в состоянии покоя. Изучить метастабильное равновесие экспериментально не всегда возможно, поскольку реакция может не остановиться на промежуточной стадии. В этом случае кинетические факторы являются определяющими.

Для количественного использования величин энергии Гиббса в химических проблемах полезно вывести выражение для обратимых процессов, содержащее только член PV и связывающее первый и второй законы термодинамики в дифференциальной форме, т. е. $dE = \delta Q - P dV$ и $dS = \delta Q/T$. Путем подстановки второго соотношения в первое получаем

$$dE = T dS - P dV. \quad (V.4)$$

Поскольку $H = E + PV$ (см. гл. II), $dH = dE + d(PV)$. Далее, добавляя член $d(PV) - d(TS)$ к правой и левой частям уравнения (V.4), получим $dE + d(PV) - d(TS) = T dS - P dV + d(PV) - d(TS)$. Сравнивая выражение (V.4) в дифференциальной форме, т. е. $dG = dH - d(TS)$, с полученным выражением, находим, что его левая часть равна dG , тогда

$$dG = -S dT + V dP. \quad (V.5)$$

При постоянной температуре ($dT = 0$)

$$dG = V dP. \quad (V.6)$$

Для идеального газа $V = RT/P$, откуда

$$dG = \frac{RT (dP)}{P} = RT d(\ln P).$$

Интегрируя это выражение в пределах от P_1 до P , получим

$$G(p) = RT \ln \frac{P}{P_1} + G(p_1).$$

Если произвольно приять давление P_1 равным единице (выразив его, как обычно, в атмосферах), это выражение примет вид:

$$G(p) = RT \ln P + G^\circ. \quad (V.7)$$

Полученное выражение связывает энергию Гиббса идеального газа [$G(p)$] при давлении P с энергией Гиббса идеального газа в стандартном состоянии (G°).

Выражение для свободной энергии реальных газов можно получить аналогичным образом, используя соответствующее уравнение состояния. Однако все математические выкладки значительно упрощаются, если использовать новую формальную функцию, впервые предложенную Льюисом и названную им летучестью (f). Эта функция позволяет сохранить простую форму записи выражения (V.7) даже для реальных газов при условии, если выбрано соответствующее состояние с летучестью, равной единице ($f = 1 \text{ атм}$). Таким образом,

$$G(f) = RT \ln f + G^\circ. \quad (V.8)$$

Как видно из приведенных выражений, для идеальных газов летучесть и давление равны. Для реальных газов летучесть можно рассчитать с помощью методов, описанных в следующем разделе этой главы.

В некоторых случаях, особенно при рассмотрении равновесий с участием конденсированных фаз, выгоднее использовать другое стандартное состояние, отличное от стандартного состояния вещества при давлении, равном единице. Для этих целей Льюисом [859] была предложена другая функция, названная активностью (a) и определяемая как $a = f/f^\circ$. Отсюда следует, что

$$G(a) = RT \ln a + G^\circ. \quad (V.9)$$

В этом случае стандартному состоянию вещества будет соответствовать такое состояние, при котором его активность равна единице ($a = 1$), а летучесть f будет равна стандартной летучести f° , причем последняя величина выбирается произвольно и может быть не равна единице.

Записав еще раз химическую реакцию в общем виде,

$$\sum \nu_i \mathcal{S}_i = 0,$$

представим выражение для энергии Гиббса реакции как

$$\Delta G_r^\circ = \sum \nu_i G_i^\circ.$$

Для реакции с участием только идеальных газов (или в первом приближении реальных газов при низких давлениях) значение G_i каждого компонента описывается выражением (V.7). Отсюда

$$\begin{aligned} \Delta G_r &= \sum \nu_i (RT \ln P_i) + \sum \nu_i G_i^\circ = RT \sum \ln (P_i) \nu_i + \Delta G^\circ = \\ &= -RT \ln \prod P_i^{\nu_i} + \Delta G^\circ. \end{aligned} \quad (V.10)$$

В этом уравнении, часто называемом изотермой химической реакции, функция $\Pi (P_i)^{\nu_i}$ представляет собой отношение произведения давлений газообразных продуктов реакции к произведению давлений газообразных исходных веществ, взятых в степенях, соответствующих стехиометрическим коэффициентам, и в связи с этим напоминает выражение константы равновесия, указанной в атмосферах. Однако только в состоянии равновесия эта функция равна константе равновесия. В состоянии равновесия $\Delta Gr = 0$ и

$$\Delta Gr^0 = -RT \ln \Pi (P_i)^{\nu_i} = -RT \ln K_p. \quad (V.11)$$

Уравнение (V.11) позволяет вычислить константы равновесия интересных нас реакций, поскольку изменения их стандартной энергии Гиббса легко определить по таблицам, приведенным в последующих главах. Из константы равновесия нетрудно рассчитать парциальные давления исходных веществ и продуктов реакции в состоянии равновесия, если известны начальные давления реагирующих веществ и общее давление системы.

Часто удобнее выражать выход продуктов реакции не в парциальных давлениях, а в молях. В смеси идеальных газов парциальное давление компонента P_i равно его мольной доле N_i , умноженной на общее давление:

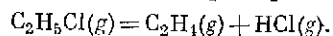
$$P_i = N_i P_{\text{tot}}. \quad (V.12)$$

В свою очередь мольная доля равна числу молей каждого компонента n_i , деленному на общее число молей n_{tot} , т. е. $N_i = n_i/n_{\text{tot}}$. В таком случае константу равновесия K_p можно записать следующим образом:

$$K_p = K_n \left(\frac{P_{\text{tot}}}{n_{\text{tot}}} \right)^{\Delta \nu}, \quad (V.13)$$

где K_n представляет собой константу равновесия, выраженную через число молей, а $\Delta \nu$ равно изменению числа молей газа в процессе реакции, т. е. $\Delta \nu = \sum \nu_i$.

Приведем несколько примеров, иллюстрирующих применение выражений (V.11) и (V.13). Рассмотрим реакцию диссоциации



Согласно данным таблиц, приведенных в последних главах, изменение стандартной энергии Гиббса этой реакции при 400°K равно $\Delta Gr^0 = -23,00 + 17,69 - (-9,96) = 4,64$ ккал. Отсюда

$$K_p = 10^{-\Delta Gr^0/(4,5758T)} = 0,00292 = \frac{(P_{\text{HCl}})(P_{\text{C}_2\text{H}_4})}{(P_{\text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}})}$$

Константу равновесия, выраженную в молях при общем давлении 1 атм, можно записать в виде

$$K_p = K_n \left(\frac{P_{\text{tot}}}{n_{\text{tot}}} \right)^{\Delta \nu} = \frac{(n_{\text{HCl}})(n_{\text{C}_2\text{H}_4})}{(n_{\text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}})} \left(\frac{1}{n_{\text{tot}}} \right)^1.$$

Предполагая, что в системе, в которой первоначально находился 1 моль $\text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}$, образовалось x молей HCl и C_2H_4 , получим $n_{\text{HCl}} = n_{\text{C}_2\text{H}_4} = x$, $n_{\text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}} = (1 - x)$, $n_{\text{tot}} = (1 + x)$ и

$$K_p = \frac{x^2}{(1-x)(1+x)} = 0,00292.$$

Решая это уравнение с помощью квадратичной формулы или методом последовательного приближения, получим $x = 0,054$. Таким образом, несмотря на положительное значение ΔGr^0 , составляющее более 4 ккал, в равновесной газовой фазе содержится значительное количество этилена и хлористого водорода, так как в результате реакции диссоциирует около 5,4% хлористого этила. Поскольку реакция сопровождается увеличением объема системы, повышение давления будет уменьшать степень диссоциации. Так, при общем давлении, равном 2 атм,

$$\frac{2x^2}{(1-x)(1+x)} = 0,00292 \quad \text{и} \quad x = 0,038.$$

Присутствие в начале реакции одного или обоих продуктов (хлористого водорода или этилена) также будет способствовать уменьшению степени диссоциации исходного вещества. Пусть первоначально в системе присутствует 1 моль хлористого этила и 1 моль хлористого водорода, тогда в системе в состоянии равновесия будут находиться x молей этилена, $(1 + x)$ молей хлористого водорода, $(1 - x)$ молей хлористого этила. Общее число молей будет равно $(2 + x)$. Полагая, что общее давление системы равно 1 атм, получим

$$\frac{x(1+x)}{(1-x)(2+x)} = 0,00292 \quad \text{и} \quad x = 0,006.$$

Таким образом, диссоциация хлористого этила в значительной степени подавляется присутствием одного из продуктов реакции в первоначальной концентрации, равной концентрации диссоциирующего вещества.

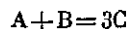
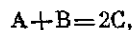
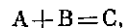
И наконец, рассмотрим влияние инертного газа (например, неона или гелия) на равновесные концентрации газообразных веществ. Пусть в исходной смеси присутствует 1 моль хлористого этила и 1 моль инертного газа, тогда в состоянии равновесия будут находиться x молей этилена, x молей хлористого водорода и $(1 - x)$ молей хлористого этила. Общее число молей смеси будет равно $(2 + x)$. Если общее давление в системе равно 1 атм, то

$$\frac{x^2}{(1-x)(2+x)} = 0,00292 \quad \text{и} \quad x = 0,076.$$

Таким образом, добавление инертного газа при постоянном давлении способствует протеканию реакции, сопровождающейся увеличением объема системы. Если реакции идут без изменения числа молей

реагирующих веществ, увеличение давления и добавление инертного газа не будут влиять на равновесный состав смеси идеальных газов.

При выводе соотношения между равновесным составом и изменением стандартной энергии Гиббса необходимо учитывать также тип реакции. Пусть для трех реакций:



величины ΔG° будут равны, причем это значение должно быть выбрано таким образом, чтобы для трех реакций $K_p = 0,05$. Тогда константы равновесия этих реакций при давлении 1 атм. будут иметь следующий вид:

$$K_p = \frac{n_C \cdot n_{tot}}{n_A \cdot n_B} = 0,05 = \frac{x(2-x)}{(1-x)^2},$$

$$K_p = \frac{(n_C)^2}{n_A \cdot n_B} = 0,05 = \frac{(2y)^2}{(1-y)^2},$$

$$K_p = \frac{(n_C)^3}{n_A \cdot n_B \cdot n_{tot}} = 0,05 = \frac{(3z)^3}{(1-z)^2(2+z)}.$$

Решим эти уравнения, предположив, что количество каждого реагирующего вещества А и В равно 1 молю, и обозначив в выражениях для констант равновесия значения n_C через x , $2y$ и $3z$:

$$x = 0,024, \quad n_C = 0,024 \text{ моля,}$$

$$y = 0,101, \quad n_C = 0,202 \text{ моля,}$$

$$z = 0,143, \quad n_C = 0,429 \text{ моля.}$$

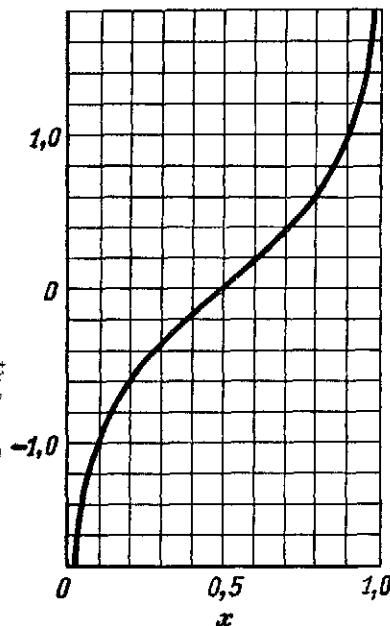
Из приведенных значений видно, что хотя изменение энергии Гиббса для всех трех реакций одно и то же, тем не менее выход продукта С в случае реакций второго и третьего типа будет гораздо больше, чем в первом случае.

Расчет равновесного состава газовой смеси

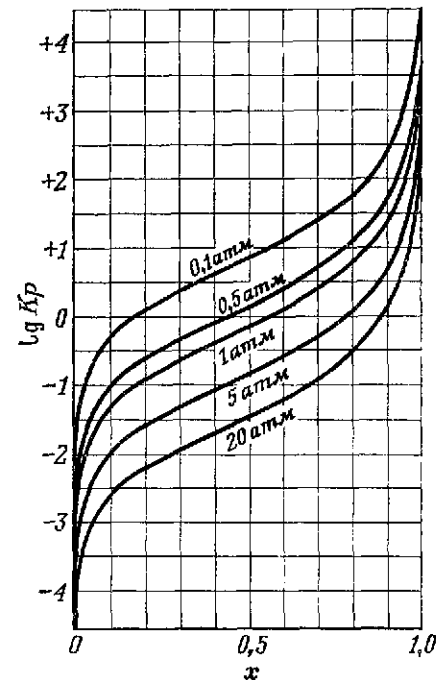
Расчет равновесных составов с помощью констант равновесия часто связан с решением уравнений третьей и четвертой степени, а также уравнений более высоких порядков. Полное решение таких уравнений во многих случаях требует трудоемких и утомительных расчетов, поэтому часто пользуются упрощенными методами. Один из таких методов, значительно сокращающий время и количество вычислений, — это метод последовательных приближений, основанный на так называемых «чувствительных факторах». Анализ константы равновесия

$$K_p = 0,05 = \frac{(3x)^3}{(1-x)^2(2+x)}$$

рассмотренной выше реакции $A + B = 3C$ показывает, что численное значение x — небольшая величина, поэтому значение $(1-x)$ будет почти равно единице, а величина $(2+x)$ примерно равна двум. Чувствительным фактором в этом случае является функция $(3x)^3$, поскольку $(1-x)$ и $(2+x)$ очень мало зависят от небольшой



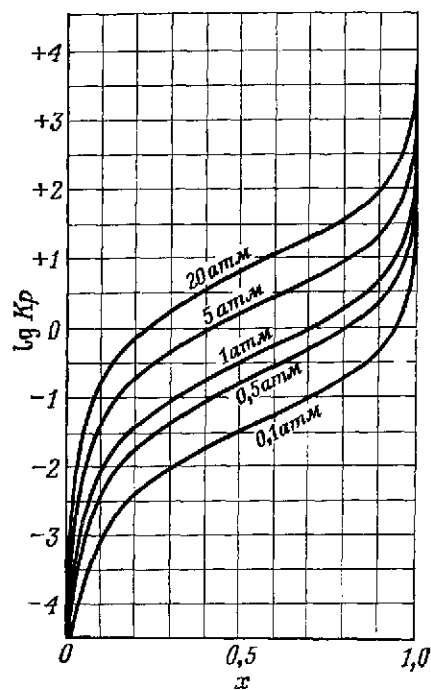
Р и с. V.1. Графическое решение уравнения зависимости состава равновесной газовой фазы от константы равновесия для реакций типа $A + B = C$. В состоянии равновесия $n_B/n_A = x/(1-x)$.



Р и с. V.2. Графическое решение уравнения зависимости состава равновесной газовой фазы от константы равновесия для реакций типа $2A + B = C$. В состоянии равновесия $n_B/n_A = x/2(1-x)$.

величины x . В качестве первого приближения запишем: $0,05 \approx (3x)^3/2$ и $x \approx 0,155$. Это значение можно использовать во втором приближении, подставив его в выражения $(1-x)$ и $(2+x)$: $0,05 \approx (3x)^3/[(0,845)^2(2,155)]$, откуда $x \approx 0,142$. Третье приближение $0,05 = (3x)^3/[(0,858)^2(2,142)]$ дает $x = 0,143$. Таким образом, с помощью трех последовательных приближений величина x определена достаточно точно до третьего знака.

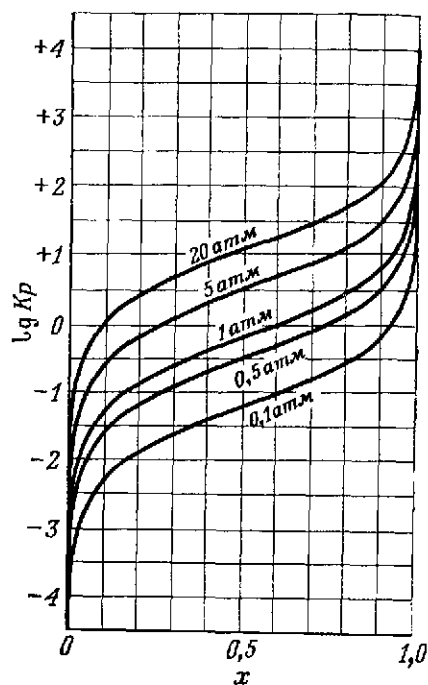
Если константа равновесия реакции $A + B = 3C$ равна 100, $100 = (3x)^3/[(1-x)^2(2+x)]$. Поскольку x должен быть меньше единицы, числитель не может превышать 27. Анализ выражения



Р и с. V.3. Графическое решение уравнения зависимости состава равновесной газовой фазы от константы равновесия для реакции типа $A = B + C$.

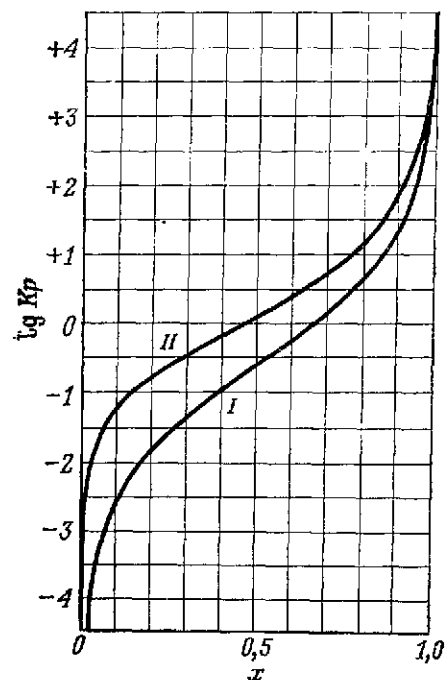
Исходный состав: чистый компонент А или эквимольные количества компонентов В и С. В состоянии равновесия $n_B/n_A = n_C/n_A = x/(1-x)$.

для константы равновесия показывает, что величина x должна быть близка к единице. Чувствительным фактором в этом случае является функция $(1-x)$, входящая в знаменатель. Предполагая $x = 1$, в первом приближении запишем $(1-x)^2 = 27/(3 \cdot 400)$; решая это уравнение относительно $(1-x)$, получим $x = 0,7$. Подстановка этого значения x в исходное выражение дает $(1-x)^2 = 9,26/(100 \cdot 2,7)$, откуда $x = 0,815$. Дальнейшие последовательные приближения приводят к следующим значениям x : 0,772, 0,788, 0,782 и 0,784. Несмотря на то что сходимость ряда не является достаточно хорошей, совпадающее в пределах 1% значение x можно получить уже после четырех последовательных приближений. Этот метод особенно ценен для вычисления равновесного состава газовой фазы таких реакций, которые характеризуются экстремальными значе-

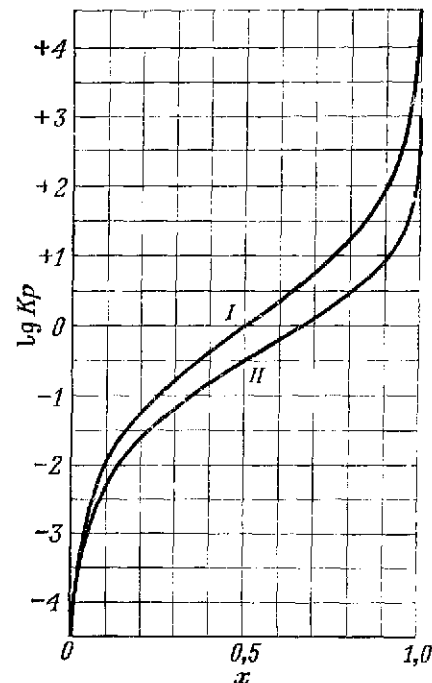


Р и с. V.4. Графическое решение уравнения зависимости состава равновесной газовой фазы от константы равновесия для реакции типа $A = B + C$.

Исходный состав: эквимольные количества компонентов А и В или $n_B/n_C = 2$. В состоянии равновесия $n_C/n_A = x/(1-x)$, $n_B/n_A = (1+x)/(1-x)$.



Р и с. V.5. Графическое решение уравнения зависимости состава равновесной газовой фазы от константы равновесия для реакции типа $2A = B + C$. Исходный состав для кривой I: чистый компонент А или эквимольные количества компонентов В и С. В состоянии равновесия $n_B/n_A = n_C/n_A = x/(2(1-x))$. Исходный состав для кривой II: эквимольные количества компонентов А и В. В состоянии равновесия $n_C/n_A = x/(2(1-x))$, $n_B/n_A = (2+x)/(2(1-x))$.



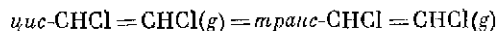
Р и с. V.6. Графическое решение уравнения зависимости равновесного состава газовой фазы от константы равновесия для (обменной) реакции $A + B = C + D$.

Исходный состав для кривой I: эквимольные количества компонентов А и В. В состоянии равновесия $n_C/n_A = n_D/n_B = x/(1-x)$. Исходный состав для кривой II: $n_A/n_B = 2$. В состоянии равновесия $n_C/n_A = n_D/n_B = x/(2-x)$, $n_C/n_B = n_D/n_B = x/(1-x)$.

ниями констант равновесия. Если константа близка к единице, то для достижения быстрой сходимости часто необходимо учитывать несколько «чувствительных факторов».

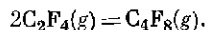
Если надо решить уравнение, связывающее равновесный состав газовой смеси с константой равновесия, для нескольких или большого числа констант, поступают следующим образом: вначале вычисляют значения K_r или $\lg K_r$ для ряда расположенных в определенной последовательности значений x , затем полученные величины наносят на график в координатах K_r или $\lg K_r - x$ и по графику определяют промежуточные значения. Такие зависимости были получены для ряда важных реакций и изображены на рис. V.1—V.6.

Наиболее простое равновесие реакции изомеризации можно представить уравнением $A = B$. В качестве примера можно привести равновесие между пропиловым и изопропиловым спиртами или между ацетоном и пропионовым альдегидом. В этих реакциях давление не влияет на выход, и все они характеризуются одинаковой зависимостью между энергией Гиббса и составом, приведенной на рис. V.1. Для того чтобы использовать этот график, необходимо найти в таблицах логарифм равновесного состава B при требуемой температуре, вычесть из него соответствующий логарифм состава A , записать полученное значение $\lg K_p$ и графически определить число молей B , находящихся в равновесии с соответствующим числом молей A . При этом предполагают, что исходным веществом является 1 моль вещества A . В качестве примера вычислим состав равновесной газовой фазы реакции



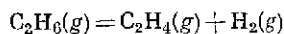
при 500°K . Из таблиц определяем значение $\lg K_p$ этой реакции, равное $-0,214$. По графику находим, что соответствующее этой константе равновесия число молей *транс*-1,2-дихлорэтилена в газовой фазе будет равно 0,38, а число молей *цис*-1,2-дихлорэтилена — 0,62.

Две одинаковые молекулы могут реагировать друг с другом с образованием новой молекулы по уравнению $2A = B$. Поскольку эта реакция сопровождается изменением числа молей участвующих в ней веществ, давление будет влиять на выход. Зависимость равновесного выхода продукта B от давления графически представлена на рис. V.2. В качестве примера такого типа реакции можно привести димеризацию тетрафторэтилена в циклооктафторбутан:



Из таблиц для этих веществ определяем значение $\lg K_p$ при 1000°K , равное 0,645. По графику находим, что равновесная газовая фаза при давлении 1 атм содержит 0,62 мольной доли димера.

Весьма важными являются реакции типа $A = B + C$, например реакции дегидратации, дегидрирования и дегидрогалогенирования. Выход в реакциях такого типа зависит как от давления, так и от исходного состава системы. Весьма важен случай, когда исходная система состоит из чистого вещества A , при этом равновесная газовая смесь будет содержать эквимолярные количества продуктов B и C . Составы равновесной газовой смеси при различных давлениях для этого случая графически изображены на рис. V.3. Если необходимо подавить диссоциацию исходного вещества A , то в исходную газовую смесь нужно добавить некоторое количество вещества B или C . На рис. V.4 представлены равновесные составы газовой смеси при различных давлениях для исходного эквимолярного соотношения веществ A и B . Из данных, приведенных в гл. IX для реакции



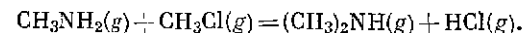
при 1000°K , находим $\lg K_p = -0,464$. Из рис. V.3 следует, что из 1 моля чистого этана в равновесной газовой фазе при давлении 1 атм образуется 0,50 моля этилена. Если исходная газовая смесь состоит из 1 моля этана и 1 моля водорода, то, как следует из рис. V.4, в равновесной газовой фазе при давлении 1 атм содержится 0,38 моля этилена.

В некоторых реакциях 2 молекулы исходного вещества могут реагировать с образованием 2 новых молекул, т. е. $2A = B + C$. Давление не влияет на выход в реакции такого типа, поскольку число молей не изменяется. В то же время равновесный состав газовой смеси зависит от соотношения исходных компонентов. Такая ситуация представлена графически на рис. V.5. В качестве примера такого типа реакций рассмотрим распад метилового спирта



Используя данные, приведенные в гл. VIII и X, находим, что значение $\lg K_p$ этой реакции при 800°K равно 0,493. Из рис. V.5 следует, что из 1 моля чистого метилового спирта в равновесии образуется 0,39 моля диметилового эфира. Если же исходная смесь состоит из 1 моля метилового спирта и 1 моля воды, то равновесная газовая смесь независимо от давления будет содержать 0,32 моля диметилового эфира.

Две различные молекулы A и B могут вступать в обменную реакцию с образованием совершенно новых молекул C и D : $A + B = C + D$. Реакции такого типа не зависят от давления, однако соотношение исходных компонентов A и B будет влиять на выход продуктов этой реакции. На рис. V.6 приведены зависимости равновесных составов для различных исходных газовых смесей. В качестве примера рассмотрим реакцию



Из данных, приведенных в гл. VIII, XI и XII, находим значение $\lg K_p$ при 500°K , равное $-0,671$. Из рис. V.6 следует, что при этом значении $\lg K_p$ выход диметиламина из смеси, состоящей из 1 моля метиламина и 1 моля хлористого метила, будет составлять 0,31 моля. Если же исходная смесь состоит из 2 молей метиламина и 1 моля хлористого метила, то в равновесной газовой фазе будет находиться 0,44 моля диметиламина.

Существует ряд других типов реакций, выход которых не зависит от объемных факторов. Для таких реакций графическое решение уравнений, связывающих константы равновесия с равновесным составом, проводится аналогичным образом. Решения подобного типа уравнений, выполненные на цифровых электронных машинах, подробно изложены в книге Ноддингса и Мулла «Handbook of Compositions at Thermodynamic Equilibrium» [1080].

Равновесия в газах при высоких давлениях *

Для большинства паров органических веществ, находящихся под давлением менее 2—3 атм, закон идеальных газов и допущение $f = P$ эквивалентны. При более высоких давлениях отклонения от идеальности становятся весьма заметными, поэтому в термодинамические расчеты необходимо вводить поправочный коэффициент, называемый коэффициентом летучести γ :

$$f = \gamma P.$$

Коэффициент летучести можно рассчитать путем интегрирования уравнений (V.8) и (V.7), представленных в дифференциальной форме, и использования соотношения (V.6):

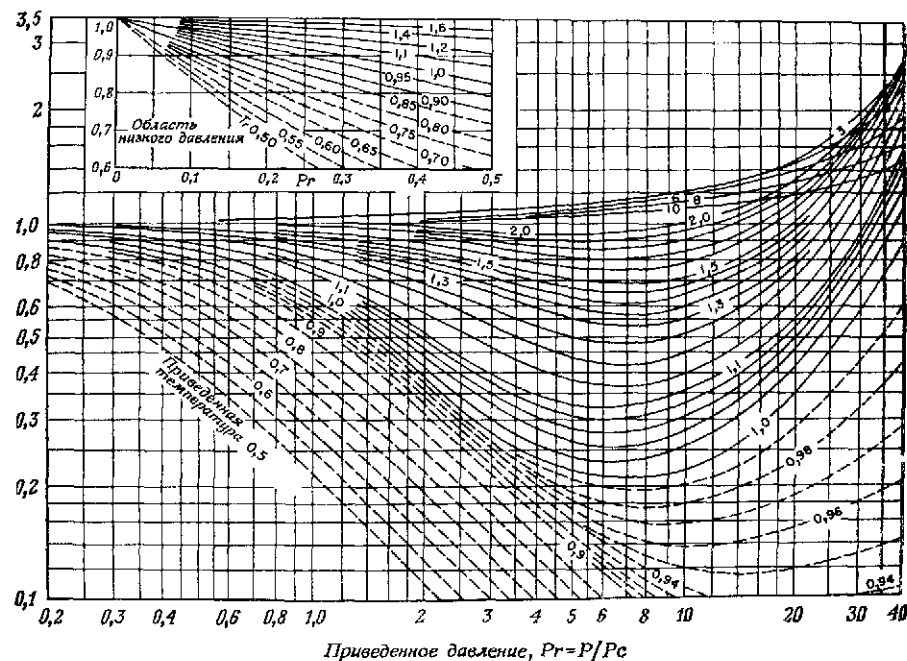
$$\ln \gamma = \ln \left(\frac{f}{P} \right) = \int_0^P \left[V - \frac{RT}{P} \right] dP. \quad (\text{V.14})$$

Подставляя в это выражение уравнение состояния реального газа (если оно известно) и интегрируя, получим коэффициент летучести. Для определения коэффициента летучести можно использовать также графические методы. Поскольку уравнения состояния для большинства газов отсутствуют, обычно используются более общими методами. Например, уравнение (V.14) с большой точностью можно выразить с помощью приближенного соотношения

$$f = \frac{P^2}{P^*},$$

где P^* — гипотетическое давление, которое оказывает идеальный газ, занимающий объем реального газа, т. е. $P^* = RT/V$. Другой метод, предложенный Гамсоном и Уотсоном [458], используется для решения многих технических проблем. Этот метод основан на предположении, что газы при одинаковых приведенных температурах и давлениях в пределах 10% обладают примерно одним и тем же коэффициентом летучести. По определению приведенные температура и давление соответственно равны $T_r = T/T_c$ и $P_r = P/P_c$, где T_c — критическая температура, выраженная в °К, а P_c — критическое давление. Используя рис. V.7, можно определить значения коэффициента летучести в широком диапазоне давлений и температур.

* В советской литературе вопросы о фазовых равновесиях в растворах при высоких давлениях подробно рассматриваются в монографии: И. Р. Кричевский, Фазовые равновесия в растворах при высоких давлениях, Госхимиздат, 1952; проблеме химического равновесия при высоких давлениях уделено значительное внимание в книгах: В. В. Коробов, А. В. Фрост, Свободные энергии органических соединений, Изд-во Всесоюзного химического общества им. Д. И. Менделеева, М., 1950; А. А. Введенский, Термодинамические расчеты нефтехимических процессов, Гостоптехиздат, М.—Л., 1960; М. Г. Гоппенберг, Химическое равновесие и скорости реакций при высоких давлениях, 2-е изд., Изд-во АН СССР, М., 1960 и в ряде других книг. — Прим. перев.



Р и с. V.7. Зависимость коэффициента летучести газов от приведенных давления и температуры. По данным Гамсона и Уотсона [458].

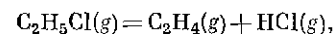
При анализе термодинамических свойств смесей газов в приближении Льюиса и Ренделла [861] обычно полагают, что летучесть каждого газообразного компонента в смеси равна его летучести при общем давлении системы, умноженной на его мольную долю, т. е.

$$f_i = \gamma_i \left(\frac{n_i}{n_{\text{tot}}} \right) P_{\text{tot}}$$

В таком случае точное выражение для константы равновесия реальных газов можно записать в виде

$$K_f = K_p K_\gamma,$$

где множитель $K_\gamma = (\prod \gamma_i)^{\nu_i}$ — константа, выраженная через коэффициенты летучести при давлении P_{tot} . Рассмотрим снова в качестве примера реакцию диссоциации хлористого этила



протекающую при 400° К и давлении 20 атм. Для этой реакции нетрудно рассчитать величины приведенных давлений и температур

и по графику (рис. V.7) определить коэффициенты летучести веществ участвующих в реакции. Полученные данные приведены в табл. V.1

Таблица V.1

Коэффициенты летучести реакции
 $C_2H_5Cl(g) = C_2H_4(g) + HCl(g)$ при давлении 20 атм
 и 400° K

Соединение	T_c , °K	P_c , атм	T_r , °K	P_r , атм	γ
C_2H_5Cl	460	52,0	0,87	0,38	0,79
C_2H_4	283	50,5	1,41	0,40	0,96
HCl	355	51,4	1,13	0,39	0,91

Тогда $K\gamma = (0,91 \times 0,96)/0,79 = 1,11$, и величина Kp (и Kn) оказывается на 11% меньше величины Kf . Из сравнения констант равновесия следует, что диссоциация хлористого этила в действительности протекает в меньшей степени, чем это следует из законов идеальных газов. Активность хлористого этила значительно меньше его активности в состоянии идеального газа, поэтому высокие давления будут смещать равновесие реакции диссоциации влево.

Равновесие в системах с участием конденсированных фаз

В предыдущих разделах были рассмотрены системы, состоящие только из газов. Равновесие в таких системах с участием только одной фазы называется гомогенным. Если в системе присутствует несколько фаз, равновесие называется гетерогенным. Простейшим случаем такой системы является равновесие чистого жидкого или чистого твердого вещества с их паром. Давление пара, находящегося в равновесии с конденсированной фазой при заданной температуре, называется давлением пара вещества при этой температуре. Поскольку в состоянии равновесия $\Delta G_v = 0$ процесс изотермического испарения или сублимации вещества протекающий под давлением его насыщенного пара, не сопровождается изменением энергии Гиббса. В связи с этим летучесть жидкого или твердого вещества при данной температуре равна летучести вещества в газообразном состоянии, находящегося под давлением равным давлению насыщенного пара жидкого или твердого вещества при той же температуре. В этом случае активность чистого жидкого или твердого вещества относительно стандартного состояния идеального газа при давлении 1 атм будет равна

$$a = \frac{f}{P} = P, \quad (V.15)$$

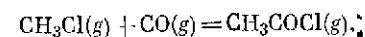
где P — давление пара конденсированной фазы, выраженное в атмосферах. Для любой системы, содержащей чистое твердое или жидкое вещество, в выражении для константы равновесия активность при любой температуре можно заменить соответствующим давлением пара. Данные по давлению пара органических веществ приведены в работах Россина, Питцера, Арнетта, Брауна и Шиментела [1248], Сталла [1432], Тиммерманса [1501], Дрейсбаха [350] и Джордана [703]*.

Однако в некоторых случаях удобнее использовать для конденсированных фаз новое стандартное состояние. Если в качестве такого состояния выбрать состояние чистого жидкого или чистого твердого вещества при давлении 1 атм, то активность системы, в которой жидкое или твердое вещество присутствует в любом количестве, равна единице и сравнительно мало зависит от давления. Энергия Гиббса системы, находящейся в таком стандартном состоянии, будет определяться с помощью выражения (V.15) как сумма энергий Гиббса паровообразного состояния вещества и процесса конденсации:

$$\Delta G_f^\circ(l) = \Delta G_f^\circ(g) + RT \ln P. \quad (V.16)$$

Таким образом, стандартную энергию Гиббса чистого жидкого или чистого твердого вещества нетрудно рассчитать из таблиц термодинамических свойств идеального газа и данных по давлению пара. Если в системе присутствует чистое жидкое или твердое вещество, их активность равна единице. При выводе выражения (V.16) принято, что величины давлений паров вещества меньше 2—3 атм, а рассматриваемое соединение находится в газовой фазе в неассоциированной форме. При более высоких давлениях или в случае ассоциирующих веществ необходимо вводить соответствующий коэффициент летучести так, как это делалось в предыдущем разделе.

Приведенные в таблицах данные по энергиям Гиббса веществ, участвующих в реакции



позволяют рассчитать парциальные давления хлористого метила и окиси углерода, которые необходимо создать для получения при 298° K жидкого ацетилхлорида. Эту задачу можно решить двумя путями, рассмотренными выше. Джордан [703] приводит давление пара ацетилхлорида при 298° K, равное 300 мм рт. ст. (или 0,394 атм). Активность жидкого ацетилхлорида по отношению к стандартному состоянию идеального газа будет

* В советской литературе рекомендуемые значения давлений насыщенного пара индивидуальных углеводородов, а также их температур кипения при эквивалентных давлениях можно найти в справочнике «Физико-химические свойства индивидуальных углеводородов», вып. 2, 3, 4 и 5, под редакцией Н. Д. Тилищева, Гостоптехиздат, М., 1947, 1951, 1953, 1954, и вып. 6, под редакцией В. М. Татевского, Гостоптехиздат, М., 1960.— Прим. перев

постоянной и равной 0,394. Из соответствующих таблиц свойств газообразных хлористого метила, окиси углерода и ацетилхлорида, рассматриваемых как идеальные газы, при 298° К находим: $\lg K_p = 37,804 - 10,960 - 24,046 = 2,078$. Откуда

$$K_p = \frac{a_{\text{CH}_3\text{COCl}}}{P_{\text{CH}_3\text{Cl}} \cdot P_{\text{CO}}} = \frac{0,394}{P_{\text{CH}_3\text{Cl}} \cdot P_{\text{CO}}} = 120$$

и

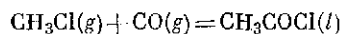
$$P_{\text{CH}_3\text{Cl}} \cdot P_{\text{CO}} = \frac{0,394}{120} = 0,00328.$$

Из последнего выражения видно, что любая комбинация давлений CH_3Cl и CO , произведение которых больше 0,00328, будет приводить к образованию жидкого ацетилхлорида, находящегося в равновесии с газообразными компонентами при 298° К.

С другой стороны, энергию образования Гиббса жидкого ацетилхлорида можно рассчитать по уравнению (V.8):

$$\begin{aligned} \Delta G_f(l) &= \Delta G_f^\circ(g) + RT \ln K_p = \\ &= -50,59 + (4,5758 \times 298,15 \times \lg P) = -51,14 \text{ ккал/моль.} \end{aligned}$$

Тогда стандартная энергия Гиббса и константа равновесия реакции



будут иметь следующие значения: $\Delta G_r^\circ = -51,14 - (-14,95) - (-32,80) = -3,39 \text{ ккал}$ и $\lg K_p' = -(-3390)/(4,5758 \times 298,15) = 2,485$. Поскольку активность жидкого ацетилхлорида по отношению к стандартному состоянию состоянию чистой жидкости равна единице,

$$K_p' = \frac{a_{\text{CH}_3\text{COCl}}}{P_{\text{CH}_3\text{Cl}} \cdot P_{\text{CO}}} = \frac{1}{P_{\text{CH}_3\text{Cl}} \cdot P_{\text{CO}}} = 305$$

и

$$P_{\text{CH}_3\text{Cl}} \cdot P_{\text{CO}} = \frac{1}{305} = 0,00328,$$

что полностью согласуется с предыдущим результатом.

Для многокомпонентных систем, образующих идеальный жидкий (или твердый) раствор, активность каждого компонента в смеси по отношению к стандартному состоянию чистого жидкого (или чистого твердого) вещества равна его мольной доле N_i в жидкой (или твердой) фазе. Это вытекает из определения идеального раствора, который подчиняется закону Рауля

$$P_i = N_i P_i^\circ, \quad (\text{V.17})$$

где P_i — парциальное давление компонента над раствором, а P_i° — давление насыщенного пара вещества над чистым жидким веществом. В случае неидеальных растворов активность можно определить экспериментально путем измерения давления и состава газо-

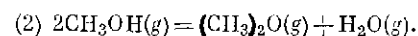
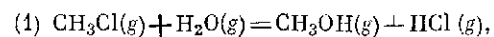
вой фазы, находящейся в равновесии с раствором. Примером такого типа измерений является исследование Халфордом и Брандеджем [564] реакции уксусной кислоты и этилового спирта в растворе. В качестве других примеров можно привести исследование неидеальных растворов, выполненное Парксом и Хаффманом [1105], и обзорную статью Уоринга [1571] по термодинамическим свойствам муравьиной кислоты.

Другие методы определения коэффициентов активности, такие, как криоскопический или метод растворения, рассмотрены в книге Льюиса и Ренделла [861] и ряде других классических работ [321, 492, 1129, 1245, 1410]. Если данные по активности отсутствуют, то для определения приближенных термодинамических величин и проверки их необходимо пользоваться законом идеальных растворов. Для смесей подобных соединений, таких, как смеси спиртов и кетонов, идеальный раствор является хорошим приближением. Для водных растворов следует ожидать значительных отклонений от идеальности.

Сложные равновесия

Процессы с участием органических веществ часто сопровождаются побочными реакциями, которые иногда удается подавить подбором селективных катализаторов. Иногда побочные реакции могут приводить к образованию полезных продуктов. Для процесса, состоящего из нескольких реакций, концентрации реагирующих частиц должны удовлетворять одновременно константам равновесия всех реакций. Расчет равновесного состава становится весьма трудоемким, если необходимо решить более двух или трех уравнений. Особый интерес представляет проблема расчета равновесного состава газов в струе ракетного двигателя, где приходится учитывать до 10 или более констант равновесия. Решение такой задачи с помощью настольных вычислительных машин является весьма трудоемким делом, поэтому за последнее время были разработаны специальные методы с применением быстродействующих электронных вычислительных машин [170, 640, 1605]. Эти методы полезны при расчете равновесий изомеров и других сложных смесей, часто являющихся предметом исследования органической химии.

В качестве простого примера сложного равновесия рассмотрим следующую систему:



Метанол, образующийся в результате первой реакции, может вступать во вторую реакцию с образованием диметилового эфира. Из соответствующих таблиц находим константы равновесия этих реакций при 600° К: $K_p(1) = 0,00154$; $K_p(2) = 10,6$. Поскольку

обе реакции протекают без изменения числа молей участвующих в реакциях веществ, константы равновесия этих реакций можно записать следующим образом:

$$K_p(1) = \frac{n_{\text{СН}_3\text{ОН}} \cdot n_{\text{НСл}}}{n_{\text{СН}_3\text{Сл}} \cdot n_{\text{Н}_2\text{О}}} = K_n(1)$$

и

$$K_p(2) = \frac{n_{\text{СН}_3\text{ОСН}_3} \cdot n_{\text{Н}_2\text{О}}}{n_{\text{СН}_3\text{ОН}}^2} = K_n(2).$$

Обозначим через x количество хлористого водорода, образующегося из исходной смеси, содержащей 1 моль хлористого метила и 1 моль воды, а через y — количество образующегося диметилового эфира. Тогда $n_{\text{СН}_3\text{ОН}} = x - 2y$, $n_{\text{НСл}} = x$, $n_{\text{СН}_3\text{ОСН}_3} = y$, $n_{\text{Н}_2\text{О}} = 1 - x + y$, $n_{\text{СН}_3\text{Сл}} = 1 - x$. Подставляем эти величины в выражения для констант равновесия:

$$K_p(1) = \frac{x(x-2y)}{(1-x)(1-x+y)} = 0,00154$$

и

$$K_p(2) = \frac{(1-x+y)(y)}{(x-2y)^2} = 10,6.$$

Решая эти уравнения методом последовательных приближений, получим $x = 0,048$ и $y = 0,009$. Из этих данных нетрудно рассчитать равновесный состав газовой фазы реакций (1) и (2). Иногда полезно вычислять для каждого уравнения значения y при различных x . Построив графическую зависимость y от x , получим две кривые, соответствующие двум уравнениям. Точка пересечения этих кривых даст значения x и y , являющиеся решением обоих уравнений, связывающих константы равновесия с составом равновесной газовой фазы.

Зависимость констант равновесия от температуры

Дифференцирование уравнения (V.5) по температуре приводит к следующему выражению:

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P = -S. \quad (\text{V.18})$$

Аналогичное соотношение для процесса или реакции имеет вид

$$\left(\frac{\partial \Delta G_r}{\partial T}\right)_P = -\Delta S_r. \quad (\text{V.19})$$

разделив выражение (V.2) на T и проинтегрировав его по температуре, получим

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial(\Delta G_r/T)}{\partial T}\right]_P &= \left[\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\Delta H_r}{T} - \Delta S_r\right)\right]_P = \\ &= \left[T \left(\frac{\partial \Delta H_r}{\partial T}\right)_P - \Delta H_r - T^2 \left(\frac{\partial \Delta S_r}{\partial T}\right)_P\right] T^{-2} = \\ &= \left[T \Delta C_{rP} - \Delta H_r - T^2 \frac{\Delta C_{rP}}{T}\right] T^{-2} = \frac{-\Delta H_r}{T^2}. \end{aligned} \quad (\text{V.20})$$

Подставляя в это уравнение выражение (V.11), окончательно имеем

$$\left[\frac{\partial \ln K_p}{\partial T}\right]_P = \frac{\Delta H_r^\circ}{RT^2}. \quad (\text{V.21})$$

Это важное уравнение впервые было получено Вант-Гоффом и с тех пор носит его имя. Из уравнения (V.21) следует, что изменение константы равновесия с температурой зависит только от стандартной энтальпии реакции. Для реакций, протекающих с поглощением тепла, константа равновесия возрастает с увеличением температуры, т. е. повышение температуры способствует протеканию реакции. И наоборот, понижение температуры благоприятствует протеканию экзотермических реакций. Наиболее интересным примером, иллюстрирующим важность эндотермических реакций при высоких температурах, является расчет состава пламени, аналогичных тем, которые возникают в струе реактивных двигателей. Так, например, пары воды, степень диссоциации которых при комнатных температурах ничтожно мала, в значительной степени диссоциируют при температурах порядка 4000° К. В качестве другого примера можно привести обычную реакцию дегидрирования, которая широко используется на нефтехимических заводах. Термический распад бутана с отщеплением водорода является сильно эндотермической реакцией и не протекает при комнатной температуре. Однако, согласно уравнению (V.21), путем повышения температуры равновесие этой реакции можно сдвинуть в сторону образования водорода и при температуре около 900° К достичь заметных выходов.

В гл. III уравнение Вант-Гоффа было проинтегрировано и применено для определения энтальпии реакции с помощью измеренных констант равновесия. Первые два метода, рассмотренные в этой главе, могут быть использованы для расчета констант равновесия по данным энтальпии реакции при условии, если известно экспериментальное значение константы равновесия при какой-либо одной температуре. Поскольку в таких расчетах используются только изменения энтальпий и энтропий реакций и не используются абсолютные значения энтропий участвующих в них веществ, эти два метода обычно называются методами определения термодинамических свойств по второму закону термодинамики.

Функции энергии Гиббса

Третий метод расчета констант равновесия по энтальпии реакций использует функцию энергии Гиббса, отнесенную к 0° К и определяемую соотношением

$$\left(\frac{G_T^\circ - H_0^\circ}{T}\right) = \left(\frac{H_T^\circ - H_0^\circ}{T}\right) - S_T^\circ. \quad (\text{V.22})$$

Функция энергии Гиббса весьма мало изменяется с температурой (в противоположность, например, функции G°), что позволяет проводить табличную интерполяцию в интервалах 100°. Для газов эту функцию можно рассчитать непосредственно, если из спектроскопических данных известны энергетические уровни молекул. Функции энергии Гиббса более удобны в употреблении, чем аналитические выражения для G° или для ΔGr° . В случае кристаллических твердых тел, подчиняющихся третьему закону термодинамики, функцию энергии Гиббса можно легко рассчитать графически из двух двойных интегралов

$$\left(\frac{G_T^\circ - H_0^\circ}{T}\right) = -\frac{1}{T} \int_0^T \left[\int_0^T \frac{C_p^\circ}{T} dT \right] dT - \int_0^T \left[\frac{\int_0^T C_p^\circ dT}{T^2} \right] dT$$

или определить по разности двух интегралов

$$\left(\frac{G_T^\circ - H_0^\circ}{T}\right) = \frac{1}{T} \int_0^T C_p^\circ dT - \int_0^T \frac{C_p^\circ dT}{T},$$

так как

$$\frac{G^\circ}{T} - \frac{G_0^\circ}{T} = \frac{(H^\circ - H_0^\circ)}{T} - S^\circ.$$

Функции энергии Гиббса можно также отнести к базисной температуре 298° К:

$$\left(\frac{G_T^\circ - H_{298}^\circ}{T}\right) = \left(\frac{H_T^\circ - H_{298}^\circ}{T}\right) - S_T^\circ. \quad (\text{V.23})$$

Поскольку эти две функции отличаются только базисной температурой, при которой приводится значение энтальпии, переход от одной функции к другой осуществляется с помощью соотношения

$$\left(\frac{G_T^\circ - H_{298}^\circ}{T}\right) = \left(\frac{G_T^\circ - H_0^\circ}{T}\right) - \left(\frac{H_{298}^\circ - H_0^\circ}{T}\right).$$

Все функции энергии Гиббса, приведенные в виде таблиц в последующих главах книги, рассчитаны относительно температуры 298° К. В литературе табличные значения функций энергии Гиббса часто указаны относительно базисной температуры 0° К, поскольку

статистические методы расчета или низкотемпературные данные по теплоемкости позволяют непосредственно рассчитать значения этой функции относительно 0° К. Для решения задач, рассматриваемых в данной книге, более удобны функции, основанные на базисной температуре 298° К, так как большинство данных по энтальпиям образования приведено именно для этой температуры. Легко видеть, что изменение этих функций в результате реакции связано с ее константой равновесия следующим уравнением:

$$\begin{aligned} -R \ln K_p &= \frac{\Delta Gr_T^\circ}{T} = \sum v_i \left(\frac{G_T^\circ - H_{298}^\circ}{T}\right)_i + \sum v_i \frac{[\Delta H_{298}^\circ]_i}{T} = \\ &= \Delta \left[\frac{Gr_T^\circ - H_{298}^\circ}{T} \right] + \frac{\Delta H_{298}^\circ}{T}. \end{aligned} \quad (\text{V.24})$$

Таким образом, если известны функции энергии Гиббса при температуре T и энтальпии реакции при 298° К, по уравнению (V.24) нетрудно вычислить константу равновесия и рассчитать состав равновесной газовой фазы. Как указывалось в гл. III, часто более удобно вычислять значения $[\Delta (G_T^\circ - H_{298}^\circ)/T]$ при округленных значениях температур, обычно указанных в таблицах, и затем интерполировать их к другим температурам. При температурах выше 400° К такая линейная интерполяция часто оказывается достаточно точной. Следует отметить, что табличные значения функций энергии Гиббса практически полезны в тех случаях, когда энтальпии образования определены с большими погрешностями или являются оценочными величинами. Если энергии образования Гиббса при всех температурах содержат ошибки даже в тех случаях, когда имеются более точные значения энтальпий образования, то функции энергии Гиббса в значительно меньшей степени зависят от точности определения энтальпий. Уравнение (V.24) оказывается наиболее удобным для составления приведенных в приложении табличных значений термодинамических функций в сочетании с новыми значениями энтальпий образования.

Поскольку энтропии, которые в большинстве случаев определяются с помощью третьего закона термодинамики, входят в функции свободных энергий, метод расчета констант равновесия из данных по энтальпиям реакций с использованием функций энергий Гиббса и наоборот называется методом расчета термодинамических свойств по третьему закону термодинамики.

МЕТОДЫ ПРИБЛИЖЕННОГО РАСЧЕТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН

Введение

В предыдущих главах было отмечено, что энтальпии образования большого числа органических веществ известны по крайней мере со средней точностью. Ввиду того что для различных типичных термодинамических расчетов, как правило, требуются данные по энтропиям и теплоемкостям, часто возникает необходимость оценить эти величины с помощью приближенных термодинамических расчетов. Несмотря на то что число исследований по определению энтропий органических соединений значительно возросло с момента открытия и широкого использования третьего закона термодинамики [1598], тем не менее существует еще большое число веществ, для которых известны энтальпии образования, а значения энтропий не определены. Отсюда вытекает практическая необходимость приближенных расчетов энтропий с точностью, соответствующей точности термодинамических данных. В ранних работах термодинамические величины обычно определяли с точностью в несколько десятых килокалории на моль. Такую же погрешность в величинах изменений энергии Гиббса и константах равновесия при комнатной температуре дает ошибка в величине энтропии на 1—2 кал/(моль·°К), поскольку

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ \quad (\text{VI.1})$$

и

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K_p. \quad (\text{V.9})$$

При вычислении энергии Гиббса для других температур необходимы значения теплоемкости как реагирующих веществ, так и продуктов реакции. Поэтому часто необходимо и вполне возможно приближенно рассчитать эти значения в тех случаях, когда отсутствуют экспериментальные значения теплоемкостей газообразных веществ.

Методы приближенного расчета теплоемкостей, рассматриваемые в последующих разделах этой главы, применимы также для нахождения энтропии. С помощью известного соотношения

$$S_T - S_0 = \int_0^T C_p d \ln T$$

эти величины тесно связаны друг с другом. С ростом температуры влияние энтропийного члена заметно возрастает, поскольку, как

следует из выражения (VI.1), величина ΔS умножается на температуру.

Иногда необходимо наряду со значениями энтропий и теплоемкостей оценить величину энтальпии реакции. В этих случаях также можно использовать некоторые методы приближенного расчета.

Следует подчеркнуть, что при анализе термодинамических свойств различных соединений и оценки их «важности» с термодинамической точки зрения в условиях, представляющих наибольший интерес для исследователя, вначале следует применить наиболее простой и грубый метод приближенного расчета энергий связи, полностью пренебрегая величиной ΔG_p , и использовать грубые правила оценки изменений энтропии реакции. После того как удастся ограничить число возможных соединений, требующих дальнейшего рассмотрения, для еще более детального термодинамического анализа поведения этих веществ в конкретных условиях можно использовать более точные методы приближенного расчета энтальпий образования этих соединений и их энтропий. Если грубые расчеты покажут, что большая часть рассмотренных соединений исследована ранее и для них имеются надежные термодинамические данные, то в этом случае точные значения термодинамических параметров вполне можно определить с помощью стандартных термодинамических расчетов, рассмотренных в предыдущих главах. Если же предварительные расчеты показали, что при термодинамическом анализе необходимо учитывать неизученные соединения, то в термодинамических расчетах можно ограничиться оценочными величинами. При этом не следует делать ошибки, предполагая, что в расчетах можно ограничиться только веществами с хорошо изученными термодинамическими свойствами. С помощью описанного выше подхода удается избежать серьезных ошибок при термодинамическом анализе.

В настоящее время имеется целый ряд монографий и работ, в которых излагаются методы приближенных расчетов термодинамических свойств соединений, поэтому в настоящей главе дается скорее обзор этих методов, а не их глубокий анализ*. С приближенными методами расчета, предложенными Янцем [681] и Рейдом и Шервудом [1220], более подробно можно ознакомиться по таблицам, составленным этими авторами, тем не менее некоторые из этих методов кратко обсуждаются в данной главе.

* В советской литературе методы расчета основных термодинамических параметров реакций и свойств химических соединений (в том числе и органических) подробно изложены в книгах: В. М. Татевский, Химическое строение углеводородов и закономерности в их физико-химических свойствах, Изд-во МГУ, М., 1953; В. М. Татевский, В. А. Вендерский и С. С. Яровой, Методы расчета физико-химических свойств парафиновых углеводородов, Госоптехиздат, 1960; М. Х. Карапетьянц, Методы сравнительного расчета физико-химических свойств, изд-во «Наука», М., 1965; В. А. Киреев, Методы практических расчетов в термодинамике химических реакций, изд-во «Химия», М., 1960. — Прим. перев.

Методы расчета с учетом вкладов валентных связей

Многие органические вещества способны легко испаряться, поэтому теплоемкость этих веществ в газообразном состоянии представляет особый интерес. Поскольку данные по теплоемкостям газообразных веществ относительно скудны, разработка методов их приближенного расчета весьма желательна. Экспериментальные данные показывают, что группы атомов в соединениях, принадлежащих к одному гомологическому ряду, обладают почти одинаковыми свойствами. Так, например, колебания метильной группы почти одинаковы в молекуле пропана, бутана и октана; во всех этих случаях вклад метильной группы в теплоемкость будет почти одинаков. Этот факт позволяет предположить, что теплоемкость газообразной молекулы можно представить в виде суммы теплоемкостей ее компонентов. Такое предположение в значительной степени справедливо. Как показал Меке [980], колебательные частоты молекулы можно приписать определенным валентным связям атомов, из которых построена данная молекула. Каждая валентная связь характеризуется определенной частотой продольных и поперечных колебаний, направленных перпендикулярно связи. Эти два типа частот колебательного движения называются валентными (ν) и деформационными (δ) частотами. Далее, Меке показал, что частоты, связанные с определенными связями в органических молекулах, очень незначительно изменяются при переходе от одной молекулы к другой. Бенневиц и Росснер [403] использовали такие обобщенные частоты для расчета теплоемкостей газообразных молекул, содержащих углерод, водород и кислород, с помощью эмпирического уравнения

$$C_p^\circ = 4R + \sum q_i E_{\nu_i} + \left(3n - 6 - \sum q_i \right) \frac{\sum q_i E_{\delta_i}}{\sum q_i} \quad (\text{VI.2})$$

В этом уравнении n — число атомов углерода, q_i — число валентных связей, а E_{ν_i} и E_{δ_i} — функции Эйнштейна для i -й связи, характеристические валентные и деформационные частоты которой соответственно ν_i и δ_i . Бенневиц и Росснер [403], Добрац [331] и Сталл и Мейфилд [1436] обозначают валентное колебание буквой ν . Поскольку в данной книге частота (сек^{-1}) тоже обозначена ν , в этой главе валентные (ν) и деформационные (δ) частоты во избежание путаницы определяются в волновых числах (см^{-1}). Следует отметить, что для температур около 400°K приведенное выше уравнение (VI.2) воспроизводит экспериментальные значения теплоемкостей Бенневица и Росснера с точностью 5—15%.

Бенневиц и Росснер рассматривали молекулу органического соединения как жесткий ротатор, что привело к плохому совпадению рассчитанных и экспериментальных величин при низких температурах. Учитывая связи, вокруг которых может осуществляться

свободное вращение (связи C — C или им подобные), Добрац [331] мог добиться большего совпадения рассчитанных величин с экспериментальными. Полученное им на основе уравнения (VI.2) новое уравнение имеет вид

$$C_p^\circ = 4R + \frac{aR}{2} + \sum q_i C_{\nu_i} + \left(3n - 6 - a - \sum q_i \right) \frac{\sum q_i C_{\delta_i}}{\sum q_i} \quad (\text{VI.3})$$

где a — число связей, вокруг которых может осуществляться свободное вращение, а функции C_{ν_i} и C_{δ_i} — квадратичные выражения, отвечающие валентному и деформационному вкладам в теплоемкость. Квадратичные выражения такого типа несколько отклоняются от экспериментальной зависимости при температурах выше 700°K ; серьезное расхождение наблюдается при температурах выше 800°K . Добрац предложил распространить свой метод расчета на органические молекулы, содержащие серу, азот и галогены, путем составления таблиц частот валентных связей этих веществ.

Сталл и Мейфилд [1436] расширили границы применимости этого метода до температур выше 700°K путем учета колебательных вкладов различных связей, основанных на уравнении Эйнштейна (II.10) и представленных в виде таблиц, и для согласования с прежними данными заново провели отнесение некоторых частот. Теплоемкости, рассчитанные этими авторами, совпадают с экспериментальными данными в пределах 4% или лучше.

Караш и Шер [745] предполагали, что энтальпия сгорания обусловлена обменом электронов между атомами и молекулами, и предложили эмпирическое соотношение для расчета энтальпии сгорания органических веществ. В качестве исходного было использовано предположение о том, что в процессе сгорания органического соединения в газообразном кислороде происходит переход электронов из «группировки метана» в «группировку двуокиси углерода» с выделением количества тепла, равного $26,05 \text{ ккал/моль}$. Для расчета авторы предложили уравнение типа

$$\Delta H_c = 26,05n + w \quad (\text{VI.4})$$

где ΔH_c — определяемая энтальпия сгорания, n — число электронов, участвующих в процессе замещения, и w — эмпирическая константа, учитывающая отклонение электронного распределения от распределения электронов в исходной «модели». Для простых ароматических соединений и насыщенных углеводородов $w = 0$, однако для олефинов $w = 13 \text{ ккал}$. В 1929 г. Караш [744] опубликовал сводку данных по теплотам сгорания для более чем 1500 органических соединений всех типов. Сравнение экспериментальных значений с рассчитанными по уравнению (VI.4) показало в большинстве случаев согласование в пределах 1—2%.

За последние несколько десятилетий было сделано много попыток использовать квантовомеханические, полуэмпирические и чисто

эмпирические методы для расчета энтальпий (или энергий) образования веществ. Подробное обсуждение этих методов выходит за рамки настоящей главы, тем не менее авторы сочли полезным дать краткое описание их сущности.

В первой модели, предложенной Фаянсом [406] в 1920 г., энергия молекулы рассматривалась как сумма энергий составляющих связей. Метод расчета, основанный на модели Фаянса, безусловно только грубое приближение, поскольку в действительности энергии связи не являются строго аддитивными и постоянными при переходе от одной молекулы к другой, как это видно из табл. VI.1. Таб-

Таблица VI.1
Сравнение схем расчета по энергиям связи^{а)}

Соединение	По методу средних энергий связи	Δ	Наблюдаемое значение ^{б)}	Δ	По схеме Аллена, улучшенной Скиннером ^{в)}
Гексан	-41,89	+1,93	-39,96	0,00	-39,96
2-Метилпентап	-41,89	+0,23	-41,66	0,00	-41,66
3-Метилпентап	-41,89	+0,87	-41,02	+0,01	-41,03
2,2-Диметил-бутан	-41,89	-2,46	-44,35	+0,01	-44,36
2,3-Диметил-бутан	-41,89	-0,60	-42,49	+0,03	-42,52

^{а)} В таблице приведены теплоты образования соединений в газообразном состоянии из элементов при 298° К, выраженные в ккал/моль.—Прим. перев.

^{б)} См. главу XIV.

^{в)} Скиннер [1361].

лица энергий связи, предложенная Полингом [1130], составлена в предположении постоянства и аддитивности энергии связи в молекулах.

Неприменимость простых аддитивных схем для вычисления термодинамических свойств различных классов органических соединений обусловила поиски классификации типов связи. В методе Клагеса [765] вклады за счет связей суммируются по типам связей в молекуле. Этот метод был использован для оценки энергии резонансных колебаний. Уиланд [1602], стр. 86) для этих целей предложил несколько улучшенный вариант метода расчета по аддитивной схеме. Лейдлер [838] пытался объяснить энергии связи в парафиновых углеводородах на основе трех типов связи C—H и одного типа связи C—C. Татевский, Бендерский и Яровой [1468] в своих расчетах использовали три типа связи C—H и 10 типов связи C—C. Глоклер [494—496], Фейлченфилд [414], Дьюар и Шмейсинг [326],

Мейкл и Охар [905, 907], Кокс [286] и Бернштейн [117] для определения энергии связей в алкенах и алкинах использовали ряд найденных ими соотношений между длиной и энергией связи в молекуле. Сомаяюлу [1394], подобно Фоксу и Мартину [437], применил для определения энергии связи в алкенах и алкинах соотношение Батерлсида [1448], учитывающее энергию и длину связи, а также силовые постоянные молекулы. Другие авторы также использовали полуэмпирические методы расчета энергий связи. Так, в 1934 г. Цан [1641] отметил недостаточность предположения о простой аддитивности энергии связей и предложил схему расчета энергии образования молекул из атомов, в которой наряду с энергиями связей используются энергии парных взаимодействий связей. Исследования Дьюара и Петтита [325] подтвердили модель Цана. Эта модель в дальнейшем была положена в основу схемы расчета, предложенной Алленом [40]. В этой схеме учитывается взаимодействие каждой пары связей (1,4-C—C), расположенных друг относительно друга в скошенной конфигурации. Скиннер [1361] уточнил метод оценки величины стехиометрического отталкивания с помощью так называемого «механизма замыкания угла». Ряд других методов учета стерического фактора был предложен Татевским и Папуловым [1470], Татевским, Бендерским и Яровым [1468], Гриншилдом и Россини [543], Платтом [1169, 1170], Мулликеном [1035] и Соудерсом, Маттюзом и Хардом [1396, 1397]. Сравнение результатов этих методов было проведено Скиннером и Пилчером [1363], а также Сомаяюлу, Кудхадкером и Зволинским [1395].

Скиннер [1361] применил схему Аллена для расчета энергии атомизации многих типов алканов, а также замещенных алканов. Схема расчета Аллена была соответствующим образом распространена Пилчером, Пеллом и Колеманом [1145] на простые эфиры. Макаллох и Гуд [957] использовали соотношение Аллена для расчета энергии атомизации алкантиолов и других типов серусодержащих соединений. В связи с этим представляет интерес метод корреляции электронного строения и свойств связи в ряду серусодержащих соединений, предложенный Бентом [109]. Следует также отметить монографию Фортимера [1029] по взаимосвязи теплот реакций и прочности связи молекулах. Схема Лейдлера [838] с учетом как энергий связи атомов, так и энергий групп атомов в молекуле, была применена для расчета энергии атомизации алкантиолов, тиаалканов, дитиаалканов, а также для спиртов, простых эфиров и перекисей алкилов. Схема Бенсона и Басса [108], предложенная для расчета величин H_f° , S_{298}° и C_p° в интервале температур 300—1500° К на основе эмпирированных значений атомных и групповых вкладов, а также вкладов связей в молекуле, была усовершенствована Голденом, Нилом и Бенсоном [504]. При расчете по этой схеме в интервале температур до 1500° К среднее отклонение от экспериментальных данных для энтропии и теплоемкости составляет $\pm 0,5$ ккал/(моль·°К),

для энтальпии образования до $\pm 0,5$ ккал/моль*. Энтальпии образования фторуглеродов и фторгалогенированных углеводородов были пересчитаны в связи с последним пересмотром принятых ранее стандартных энтальпий образования водной фтористоводородной кислоты и газообразного четырехфтористого углерода. Эти данные, повторно пересмотренные Лейчером и Скиннером [833], были проверены по аддитивной схеме и схеме расчета с учетом взаимодействия связей, предложенной Алленом. В случае галогензамещенных метана и фторуглеродов корреляция оказалась вполне удовлетворительной, что же касается галогензамещенных этанов и олефинов, то в этом случае совпадение оказалось несколько хуже. Лейчер и Скиннер предположили, что в последнем случае значительную роль играют стерические факторы отталкивания, возникающие между атомами галогена**.

Овермарс и Блиндер [1096] рассчитали средние значения энергии связей C—C и C—H методом наименьших квадратов и с помощью этих значений вычислили стандартные энтальпии атомизации для 50 алканов. Они получили среднюю ошибку $\pm 0,58$ ккал/моль, что значительно меньше тех отклонений, которые наблюдаются при использовании более сложных схем расчета.

Следует подчеркнуть, что при использовании схем расчета по энергиям связи, а также при сравнении с другими значениями энтальпий атомизации рассчитанные величины обычно приводят при 298° К. Эти величины, как правило, представляют собой сумму термической энергии атомов и молекул и энергии основных видов колебаний ядер при 0° К. Поэтому во многих случаях было бы вполне логично рассматривать значения энергии при какой-либо одной базисной температуре, т. е. при 0° К или 298° К. Неландер и Супнер [1050], рассмотрев ряд полициклических молекул, пришли к выводу, что, хотя термин «энергия» и употребляется при вычислении энергий связи (а также энергий деформации), тем не менее во всех обычных расчетных схемах удобнее использовать величины энтальпий. Этот факт необходимо учитывать при анализе процессов, связанных с образованием кольцевых структур. Эти авторы указали также на целесообразность использования во всех возможных случаях в качестве базисной

* Правила аддитивности для расчета термодинамических свойств различных классов органических соединений подробно обсуждаются в одной из последних работ Бенсона и согр. [Benson S. W., Gruckshank F. R., Golden D. M., Hawgen G. R., O'Neal H. E., Chem. Rev., № 3, 279—324 (1969)]. — Прим. перев.

** Некоторые закономерности в величинах энтальпий образования фтор- и фторхлорорганических соединений были рассмотрены В. П. Колесовым. См., например, сб. «Современные проблемы физической химии», вып. 6, Изд-во МГУ, М., 1971; сб. «Труды по химии и химической технологии», Изд-во Горьковского Государственного университета, Горький, 1971. Результаты экспериментальных исследований были положены в основу выбора энтальпий образования фтор- и фторхлорорганических соединений для справочника «Термические константы веществ», вып. 4 (1970), Изд-во АН СССР, М. — Прим. перев.

температуру 0° К. Исследования Шлейера и согр. [1289] показали, что даже более совершенные схемы расчета приводят к трудно объяснимым значениям энергий деформаций, возникающих в случае высокосимметричных глобулярных молекул. Очевидно, это затруднение удастся преодолеть, если проводить сравнение при 0° К.

Энергии разрыва связей молекул можно рассчитывать с помощью метода Франклина [439], поскольку в литературе имеются значения групповых инкрементов для свободных радикалов. Для определения энергии разрыва связей C—H в парафиновых углеводородах по методу Восводского [1541] используется корреляция, основанная на эффекте стабилизации метильных групп. Этот метод был распространен Веденевым [1530] на соединения, содержащие не только связи C—H, но и другие связи.

Методы расчета с учетом групповых вкладов

Ранее указывалось, что для простого приближенного расчета численных значений термодинамических свойств с помощью небольшого числа данных Паркс и Хаффман предложили ряд методов, основанных на вкладах определенных групп атомов или связей в молекуле.

Метод, разработанный Андерсоном, Бейером и Уотсом [18], несколько сложнее других методов, однако он позволяет более количественно проанализировать строение углеродного скелета молекулы. Согласно этому методу, молекула каждого соединения рассматривается как некоторое производное, полученное путем замещения ряда атомов в исходной молекуле определенными группами. Так, например, структуру парафинов можно построить из исходной молекулы метана путем замещения атомов водорода соответствующими атомными группами. Аналогичным образом можно получить значения свойств для всех эфиров, используя в качестве исходного соединения диметилэфир и суммируя инкременты и термодинамические величины в соответствии со структурными модификациями, возникающими в процессе замещения отдельных групп. Отклонения от простого принципа аддитивности следует принимать во внимание в тех случаях, когда для каждого инкремента может существовать некоторый набор соответствующих структурных окружений. В связи с этим обычно рассматривают вклады от первичного метильного замещения, вторичного замещения метильных групп и вклады кратных связей (включая поправку за счет сопряженных двойных связей и двойных связей, сопряженных с кольцом). Термодинамические инкременты обычно связывают со структурой молекул при определении трех параметров: ΔH_{298}° , S_{298}° и C_p° , где $C_p^\circ = a + bT + cT^2$. Корреляция теплоемкости, зависящей от температуры, и двух других параметров позволяет рассчитать величины энергий связи, энтальпий образования и энтропий газообразных молекул

Приближенный расчет теплоемкости группы —SH [в кал/(моль·°K)]

Среднее из шести значений и оценка пентантиола.
Данные для тиола (гл. XIII) минус данные для углеводорода (гл. IX)

Соединение	298° K	300° K	400° K	500° K	600° K	700° K	800° K	900° K	1000° K
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{HC}-\text{C}-\text{CH} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	12,59	12,65	15,68	18,66	21,35	23,72	25,83	27,69	29,33
$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{HC}-\text{SH} \\ \\ \text{H} \end{array}$	12,04	12,05	14,04	15,91	17,57	19,03	20,32	21,46	22,48
Δ	-0,58	-0,60	-1,64	-2,75	-3,78	-4,69	-5,51	-6,23	-6,85
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \quad \\ \text{HC}-\text{C}-\text{C}-\text{CH} \\ \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	17,57	17,66	22,54	27,04	30,88	34,20	37,08	39,61	41,83
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{SH} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	17,37	17,44	21,08	24,36	27,21	29,68	31,83	33,71	35,38
Δ	-0,20	-0,22	-1,46	-2,68	-3,67	-4,52	-5,25	-5,90	-6,45
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \quad \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{SH} \\ \quad \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	23,29	23,40	29,60	35,34	40,30	44,55	48,23	51,44	54,22
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{SH} \\ \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	22,65	22,75	27,86	32,56	36,72	40,37	43,60	46,47	49,01
Δ	-0,64	-0,65	-1,74	-2,78	-3,58	-4,18	-4,63	-4,97	-5,21
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \quad \quad \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{SH} \\ \quad \quad \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	28,73	28,87	36,53	43,58	49,64	54,83	59,30	63,18	66,55

$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \quad \quad \\ \text{HC}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{SH} \\ \quad \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	28,24	28,37	34,95	41,07	46,54	51,37	55,68	59,54	62,93
Δ	-0,49	-0,50	-1,58	-2,51	-3,10	-3,46	-3,62	-3,64	-3,60
$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{HCH} \\ \\ \text{H} \quad \quad \text{H} \\ \quad \quad \\ \text{HC}-\text{C}-\text{C}-\text{CH} \\ \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	23,14	23,25	29,77	35,62	40,62	44,85	48,49	51,65	54,40
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \quad \\ \text{HC}-\text{C}-\text{C}-\text{CH} \\ \quad \quad \\ \text{H} \quad \quad \text{H} \\ \quad \quad \text{SH} \end{array}$	22,94	23,04	28,35	33,06	37,02	40,38	43,26	45,74	47,92
Δ	-0,20	-0,21	-1,42	-2,56	-3,60	-4,47	-5,23	-5,91	-6,48
$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{HCH} \\ \\ \text{H} \quad \quad \text{H} \\ \quad \quad \\ \text{HC}-\text{C}-\text{C}-\text{CH} \\ \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \quad \text{HCH} \\ \quad \quad \\ \quad \quad \text{H} \\ \quad \quad \text{HCH} \\ \quad \quad \\ \quad \quad \text{H} \end{array}$	29,07	29,21	37,55	45,00	51,21	56,40	60,78	64,55	67,80
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \quad \\ \text{HC}-\text{C}-\text{C}-\text{CH} \\ \quad \quad \\ \text{H} \quad \quad \text{H} \\ \quad \quad \text{S} \\ \quad \quad \\ \quad \quad \text{H} \end{array}$	28,91	29,04	36,13	42,39	47,60	51,92	55,53	58,61	61,24
Δ	-0,16	-0,17	-1,42	-2,61	-3,61	-4,48	-5,25	-5,94	-6,56
Среднее Δ	-0,38	-0,39	-1,54	-2,65	-3,56	-4,30	-4,92	-5,43	-5,86
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \quad \quad \quad \quad \\ \text{HC}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{SH} \\ \quad \quad \quad \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	34,20	34,37	43,47	51,83	58,99	65,10	70,36	74,93	78,89
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \quad \quad \quad \\ \text{HC}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{SH} \\ \quad \quad \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$ (оценка)	(33,82)	(33,98)	(41,93)	(49,18)	(55,43)	(60,80)	(65,44)	(69,50)	(73,03)

для температур, отличающихся от 298° К. Андерсон, Бейер и Уотсон [18] приводят значения вкладов, обусловленных замещением одной или двух метильных групп другими атомными группами. Замещение метильной группы углеводородной молекулы другим атомом или группой приводит к появлению относительно постоянного инкремента теплоемкости. Таким образом, величина инкремента может быть рассчитана по теплоемкости двух молекул, для которых имеются достаточно надежные данные. Определенный таким образом инкремент можно использовать для приближенного расчета теплоемкости неизученного соединения. При этом исходный углеводород структурно должен быть как можно ближе к рассматриваемому соединению. Таким образом, данные для углеводородов — это фундамент, на котором построено термодинамическое «здание» органической химии.

Метод расчета по групповым инкрементам можно легко использовать для приближенного расчета теплоемкости газообразного вещества на основании теплоемкости исходного углеводорода. Сравнение разности в теплоемкостях алкилтиолов и родственных им углеводородов показывает, что при 298,15° К инкремент теплоемкости — постоянная величина в пределах 0,5 кал/(моль·°К). В качестве примера можно привести значения теплоемкости газообразного пептантиола, рассчитанные из соответствующих данных исходного углеводорода гексана и представленные в табл. VI.2. Приведенные в табл. VI.2 значения теплоемкостей удовлетворительно согласуются с величинами, указанными в гл. XIII.

Метод расчета по групповым инкрементам с учетом соответствующей корректировки числа симметрии может быть также с успехом применен для определения энтропий органических соединений. Рассмотрим газообразные молекулы пропана (CH₃CH₂CH₃) и хлористого этила (CH₃CH₂Cl). Эти молекулы можно представить в виде этильных групп, к которым присоединены метильная группа и атом хлора. Энтропия этильной группы в обоих случаях будет почти одна и та же, а разница энтропий двух молекул будет обусловлена различием в таких факторах, как число симметрии [ср. выражение (IV.19)], молекулярный вес, структура и внутреннее вращение. Эти факторы для удобства обычно объединяют в две группы: первая включает различные элементы симметрии молекулы, вторая — все другие факторы. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] приводят для газообразного пропана значение S_{298}° , равное 64,51 кал/(моль·°К); Гордон и Джиок [518] для газообразного хлористого этила дают $S_{298}^{\circ} = 65,94$ кал/(моль·°К). Для пропана число симметрии $\sigma_i = 18$, для хлористого этила $\sigma_i = 3$.

Пропан		Хлористый этил	
S_{298}° . . .	64,51	S_{298}° . . .	65,94
$R \ln 18$. .	.5,74	$R \ln 3$. .	2,18
S_{298}^* . . .	70,25	S_{298}^* . . .	68,12

S_{298}^* — энтропии молекул пропана и хлористого этила, вычисленные без учета членов, характеризующих симметрию молекул, в выражениях (IV.22) и (IV.23). Таким образом, замещение метильной группы атомом хлора приводит к инкременту (исходный углеводород минус замещенный углеводород) $\Delta S_{298}^* = 70,25 - 68,12 = 2,13$ кал/(моль·°К). Следует отметить, что величина S_{298}^* больше для исходного углеводорода.

Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248], используя энтропию исходного углеводорода 2-метилпропана [(CH₃)₃CH, $\sigma_i = 81$], равную при 298° К 70,42 кал/(моль·°К), рассчитали энтропию хлороформа (CHCl₃, $\sigma_i = 3$). Используя полученные значения, находим [в кал/(моль·°К)]:

S_{298}°	70,42
$R \ln 81$	8,73
S_{298}^*	79,15
$-3(2,13)$	-6,39
$-R \ln 3$	-2,18
S_{298}° , CHCl ₃ (г) . . .	70,58

Вычисленное значение энтропии газообразного хлороформа при 298,15° К хорошо согласуется с величиной 70,66 кал/(моль·°К), найденной Джеллсом и Питцером [465] из спектроскопических данных. Инкременты энтропии, обусловленные замещением метильных групп (без учета симметрии) и обозначаемые символом ΔS_{298}^* , приведены в различных главах книги.

Метод расчета по групповым инкрементам [18] можно использовать для приближенного расчета энтальпии образования органических соединений из соответствующих значений инкрементов, определенных по разности энтальпий образования исследуемого соединения и его исходного углеводорода. В качестве примера рассмотрим более подробно два соединения: пропан (H₃C — CH₂ — CH₃) и этантол (H₃C — CH₂ — SH). Каждое из этих соединений содержит метильную и метиленовую группы, образующие общую для обеих молекул этильную группу. Поэтому различие в энтальпиях образования этих двух молекул можно отнести за счет разности в энтальпиях образования метильной и тиольной групп. Эта разность, как видно из табл. VI.3, весьма постоянна для определенного ряда соединений. Замещение метильной группы в исходном углеводороде на тиольную приводит к значению ΔH_{298}° тиолов, отличающемуся от ΔH_{298}° исходного углеводорода на величину 13,93 ккал/моль. В табл. VI.4 приведены рассчитанные аналогичным образом энтальпии образования алкилсульфидов. Легко видеть, что замещение метиленовой группы на сульфидную также приводит к значению ΔH_{298}° сульфидов, отличающемуся от ΔH_{298}° исходного углеводорода на величину 15,51 ккал/моль.

Таблица VI.3

Энтальпии образования углеводородов и тиолов для реакции
 $R-CH_3=R-SH$ при 298° К

Исходный углеводород ^{а)}	ΔH_{298}° , ккал/моль	Тиол ^{б)}	ΔH_{298}° , ккал/моль	$\Delta[\Delta H_{298}^\circ]$, ккал/моль
n-Пропан	-24,82	Этантиол	-11,02	13,80
n-Бутан	-30,15	1-Пропантиол	-16,22	13,93
n-Пентан	-35,00	1-Бутантиол	-21,05	13,95
n-Гексан	-39,96	1-Пентантиол	-25,91	14,05

Среднее: 13,93±0,03

^{а)} Данные Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248].

^{б)} Данные Скотта и Мак-Каллоха [1316].

Таблица VI.4

Энтальпии образования углеводородов и алифатических сульфидов для реакции $R-CH_2-R'=R-S-R'$ при 298° К

Исходный углеводород ^{а)}	ΔH_{298}° , ккал/моль	Алифатический сульфид ^{б)}	ΔH_{298}° , ккал/моль	$\Delta[\Delta H_{298}^\circ]$, ккал/моль
n-Пропан	-24,82	Метилсульфид	-8,97	15,85
n-Бутан	-30,15	Этилметилсульфид	-14,25	15,90
n-Пентан	-35,00	Метилпропилсульфид	-19,54	15,46
n-Пентан	-35,00	Этилсульфид	-19,95	15,05
Изопентан	-36,92	Изопропилметилсульфид	-21,61	15,31

Среднее: 15,51±0,11

^{а)} Данные Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248].

^{б)} Данные Скотта и Мак-Каллоха [1316].

Питцер [1155] разработал приближенный статистический метод расчета теплоемкостей газообразных нормальных парафинов и родственных им соединений. Позднее Персон и Пиментел [1140], пересмотрев отдельные величины, входящие в расчетные формулы этого метода, вычислили значения теплоемкостей газообразных нормальных парафинов от бутана до гептана и привели величины инкрементов группы CH_2 , позволяющие рассчитать значения теплоемкостей высших парафинов [по крайней мере до эйкозана ($C_{20}H_{42}$)]. Пред-

ложенное ими уравнение для нормальных парафинов, содержащих n атомов углерода, имеет вид

$$Cp^\circ = 4R + (n-1)[C-C_{str}] + (n-2)[C-C_{bend}] + (n-3)[\text{internal rotation}] + [F_{steric}] + 2[CH_3] + (n-2)[CH_2],$$

причем значение ΔCp на одну группу CH_2 равно

$$[C-C_{str}] + [C-C_{bend}] + [\text{internal rotation}] + [B] + [CH_2].$$

В этих уравнениях величины в квадратных скобках обозначают: $[C-C_{str}]$ и $[C-C_{bend}]$ — вклады в теплоемкость за счет продольных и поперечных колебаний связи $C-C$; $[\text{internal rotation}]$ — вклад в теплоемкость за счет внутреннего вращения молекул; $[F_{steric}]$ — вклад энергии пространственного взаимодействия; $[CH_3]$ и $[CH_2]$ — вклады в теплоемкость метильных и метиленовых групп; $[B]$ — коэффициент пространственного взаимодействия в выражении $[F_{steric}] = A + (n-7)$ с учетом стерической константы A . Рассмотренные методы применимы и к другим рядам соединений. Так, например, Бреммер и Томас [165, 166] рассмотрели с помощью этого метода ароматические системы.

Россини [1243] опубликовал обзор экспериментальных данных по энтальпиям образования органических соединений и показал несогласованность большинства величин, полученных до 1937 г. Многие из приведенных данных содержат ошибки в величинах ΔH_f° , достигающие нескольких килокалорий на моль. Россини предложил эмпирическое соотношение для корреляции энтальпий образования соединений в гомологических рядах. Он показал, что в случае нормальных парафинов энтальпию образования можно представить с помощью уравнения

$$\Delta H_{298}^\circ = A + Bn + \Delta,$$

где A — константа, характеризующая тип концевой группы; B — константа; n — число атомов углерода в молекуле, а Δ — величина отклонения от линейной зависимости.

Метод Франклина [439] значительно проще, поскольку величины, рассчитанные этим методом, приводятся для нескольких округленных значений температур. Кроме того, метод Франклина позволяет определить значения инкрементов свободных радикалов и ионов карбония в газовой фазе. В основу данного метода положены соотношения, полученные Питцером [1150, 1153] для молекул алканов с длинной цепью. Исходя из теоретических предположений, Питцер доказал, что энтальпию и энергию Гиббса газообразных нормальных алканов можно представить в виде аддитивных функций числа атомов углерода и некоторых констант, зависящих от температуры, продольных и поперечных колебаний, внутреннего вращения и числа симметрии молекулы. Этот метод позволяет использовать вклады структурных групп для определения величин ΔH_f° и ΔG_f°

при любой температуре. Влияние структурной симметрии и оптических изомеров учитывается путем добавления к значениям энергии Гиббса дополнительных слагаемых. Вклад числа симметрии уже обсуждался ранее. Для соединений, содержащих асимметрический атом углерода (т. е. для одного набора оптических изомеров), при суммировании энергии Гиббса обычно вводят дополнительную поправку, равную $-RT \ln 2$. При наличии двух наборов оптических изомеров этот вклад будет составлять $-RT \ln 4$. Поправочные коэффициенты, учитывающие разветвление цепи и влияние заместителей в ароматическом кольце, относят к влиянию кольца.

Соудерс, Маттюз и Хард [1396, 1397] применили метод групповых инкрементов для расчета колебательных составляющих теплоемкости, теплосодержания и энтропии, а также составляющих этих функций, обусловленных внутренним вращением. Анализ структурной формулы позволяет выбрать те инкременты, которые в наибольшей степени соответствуют структурному окружению молекулы. Сумма этих вкладов вместе с поступательными и вращательными составляющими всей молекулы в целом дает желаемое термодинамическое свойство исследуемого соединения. Помимо этого, корреляционный метод позволяет непосредственно рассчитать величину энтропии образования молекулы. Вклады неуглеводородных групп, по-видимому, не учитывались в этом методе.

Метод, предложенный Ван Кревеленом и Чермином [1528], аналогичен методу Франклина. Различие заключается лишь в форме представления конечных результатов. В методе Ван Кревелена и Чермина результаты расчета непосредственно выражаются в виде линейного уравнения температурной зависимости энергии Гиббса рассматриваемой молекулы. В связи с появлением более надежных данных Чермин [220] полностью пересмотрел расчетные формулы этого метода и распространил их на алканы, алкены, циклоалканы, циклоалкены, алкины и ароматические соединения. По сравнению с другими методами этот метод даст наибольшее число инкрементов для углеводородных групп. В значения инкрементов различных углеводородных групп внесен ряд поправок, учитывающих разветвление парафиновых цепей и размеры колец, а также наличие циклов в ароматических соединениях.

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИКИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НЕКОТОРЫХ ПРОМЫШЛЕННЫХ ПРОБЛЕМ

Введение

Задача химической промышленности — наиболее полное и целесообразное использование исходного сырья путем превращения в определенные химические соединения, которые могут быть как промежуточными, так и конечными продуктами технологического процесса. Поскольку химические реакции связаны с изменением расположения атомов в молекулах исходных веществ по сравнению с расположением тех же атомов в молекулах продуктов реакции, то перед химиком возникает задача осуществить химическое превращение в таких условиях (давление, температура и т. д.), которые способствовали бы преимущественному протеканию рассматриваемой реакции с образованием желаемых продуктов. Тщательный термодинамический анализ реагирующей системы часто помогает выяснить необходимые условия получения того или иного продукта, позволяет установить, какие реакции невозможны, и привлекает внимание к осуществимым реакциям. Целесообразность такого термодинамического анализа определяется наличием достаточно надежных основных термодинамических свойств веществ, однако даже при отсутствии всех необходимых данных часто оказывается возможным, опираясь на закономерности в термодинамических свойствах веществ, сделать некоторые обоснованные предположения о продуктах реакции. По мере накопления соответствующих данных применение термодинамического анализа в современных исследованиях получает все более широкое распространение.

Согласно Бергу, Карпентеру, Дейли, Деву, Герцелю, Хишпли, Киндши и Поповцу [110], при планировании химического исследования вначале необходимо изучить имеющуюся по этому вопросу литературу, затем, не начиная экспериментальной работы, провести термодинамический анализ системы и оценить возможность протекания той или иной реакции и, наконец, если это выполнимо, приблизительно рассчитать максимальный выход продуктов реакции и определить условия, при которых можно достичь этого выхода. Во избежание неверных выводов необходимо четко представлять себе общие закономерности, правила и ограничения термодинамического метода анализа. Так, например, термодинамика рассматривает только условия равновесия системы и ничего не говорит о скорости достижения

этого равновесия. Даже те реакции, которые характеризуются значительным отрицательным изменением энергии Гиббса, в отсутствие подходящего катализатора могут протекать исключительно медленно. В то же время реакции, характеризующиеся значительными положительными изменениями энергии Гиббса, не будут протекать самопроизвольно; в таких случаях поиски подходящего катализатора совершенно бесполезны.

Наличие или отсутствие катализатора может благоприятно влиять на получение определенного продукта реакции. Так, Фишер [427] при исследовании процесса получения топлива из водяного газа рассмотрел следующие реакции:



и

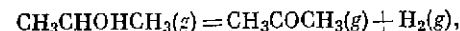


Термодинамический анализ реакций (VII.1) — (VII.3) показал, что при 600° К и 150 атм равновесная газовая фаза будет содержать большое количество метана и немного метанола. Тем не менее при введении в систему в качестве катализатора окиси цинка в тех же условиях образуется значительное количество метанола. Такое ингибирование реакции (VII.3) является предметом рассмотрения химической кинетики и не может быть предсказано на основании законов термодинамики.

Три рассмотренные выше реакции показывают, что для одних и тех же исходных веществ возможно несколько направлений реакции. Такая картина имеет место для многих органических соединений. Поэтому при термодинамическом анализе одной из реакций обычно предполагают, что все другие возможные взаимодействия не влияют на равновесный состав газовой фазы рассматриваемой реакции. Путем подбора соответствующего катализатора часто удается ускорить необходимую реакцию или подавить все нежелательные процессы таким образом, что оказывается возможным исследовать выбранную реакцию независимо от других и использовать ее для получения необходимого продукта. В таких случаях обычно предполагают, что скорости всех побочных реакций пренебрежимо малы по сравнению со скоростью исследуемой реакции. Помимо этого, необходимо ввести дополнительное предположение о том, что в состоянии равновесия концентрация промежуточных продуктов пренебрежимо мала по сравнению с концентрацией продуктов рассматриваемой реакции. Таким образом, при проведении термодинамического анализа важно понимать, что три отмеченных выше предположения используются в термодинамических расчетах как само собой разумеющиеся, а надежность получаемых результатов зависит от степени достоверности этих предположений.

При решении конкретных практических задач часто возникают трудности, которые удается избежать с помощью дополнительных упрощающих предположений. Окончательное решение такой задачи обычно является только грубым приближением сложных процессов, протекающих в действительности. Промышленная аппаратура часто обладает такой высокой пропускной способностью, что в ней не устанавливается предполагаемое термодинамическое равновесие; рассчитанная постоянная температура процесса может значительно измениться, а сама система, в которой учитывалось только три или четыре реагирующих компонента, в действительности может содержать гораздо большее их число.

Для нахождения отсутствующих в литературе термодинамических данных часто приходится использовать общие приближенные методы расчета. Полученные таким образом величины часто содержат ошибку в несколько процентов. Иногда эти ошибки могут быть весьма значительными. Так, например, изменение энергии Гиббса реакции



рассчитанное из данных, приведенных на стр. 479 и 502, будет следующим: $\Delta G_f^{298} = 4,91$ ккал/моль и $\Delta G_f^{600} = -3,71$ ккал/моль. Энтальпия сгорания жидкого пропанола-2 равна $-479,480$ ккал/моль. Из табл. VII.1 видно, насколько изменятся энергия Гиббса и кон-

Таблица VII.1

Зависимость термодинамических параметров реакции дегидрирования от изменения энтальпии сгорания пропанола-2 на 1%

$\Delta H_c \text{ C}_3\text{H}_8\text{O}$ при 298° К, ккал/моль	ΔG° дегидрирования, ккал/моль		Константа равновесия K_p , атм	
	298° К	600° К	298° К	600° К
$-479,480$ (лучшее значение)	4,91	-3,71	$2,52 \cdot 10^{-4}$	22,5
$-484,270$ (величина, отличающаяся на 1%)	0,12	-8,50	$8,17 \cdot 10^{-1}$	12500

станта равновесия реакции дегидрирования, если истинная величина энтальпии сгорания пропанола-2 окажется на 1% больше значения, использованного в расчетах. Ошибка в этой величине на 1% приведет к изменению константы равновесия рассматриваемой реакции более чем в 3000 раз при температуре 298° К и примерно в 500 раз при 600° К. Из этого примера отчетливо видно, насколько важно использовать в расчетах точные значения термодинамических величин.

В том случае, когда известно изменение энергии Гиббса рассматриваемой реакции, нетрудно определить возможность ее самопроиз-

вольного протекания. Если при некоторой температуре $\Delta Gr^\circ = 0$, то константа равновесия K_r равна единице и равновесие реакции в сильной степени сдвинуто в сторону образования конечных продуктов. При более положительном значении ΔGr° реакция сдвигается влево, а выход продуктов реакции постепенно уменьшается до таких количеств, при которых рассматриваемая реакция уже не представляет практического интереса. Однако, поскольку значение ΔGr° , при котором нельзя осуществить рассматриваемую реакцию, зависит от многих факторов, не существует определенного положительного значения энергии Гиббса, которое ограничивало бы возможность протекания той или иной реакции. Даже если значение ΔGr° реакции (VII.2) при 600° К равно 10,84 ккал/моль, эту реакцию безусловно можно осуществить при указанной температуре. Для того чтобы избежать неблагоприятного влияния положительного значения изменения энергии Гиббса и сместить равновесие в нужную сторону, в этом случае можно применить высокое давление. Благоприятное смещение равновесия достигается также путем изменения соотношения реагирующих веществ или удаления одного из продуктов из зоны реакции. Возможность использовать любой из этих способов для смещения равновесия требует детального анализа в каждом конкретном случае. Данные, приведенные в табл. VII.2, являются

Таблица VII.2

Использование величины ΔGr° как критерия осуществимости реакции

$\Delta Gr^\circ < 0$	Реакция возможна и протекает самопроизвольно
$\Delta Gr^\circ = 0 - 10$ ккал/моль	Возможность осуществления реакции сомнительна; необходимы дальнейшие исследования
$\Delta Gr^\circ > 10$ ккал/моль	Реакция невозможна; могут оказаться полезными специальные условия ее проведения

лишь грубой оценкой возможности осуществления той или иной реакции и должны рассматриваться в качестве приближенных критериев, которые может использовать химик-исследователь перед постановкой эксперимента.

В литературе неоднократно описывалось применение термодинамики для решения проблем химической технологии. (См., например, работы Доджа [333] и Эдмистера [369].

Нефтехимия*

За последние три десятилетия термохимии углеводородов уделялось большое внимание, поэтому нет ничего удивительного, что эта область термодинамики нашла широкое применение при решении многих промышленных проблем. После второй мировой войны перед нефтехимией была поставлена задача увеличения производства бензола и других ароматических соединений для удовлетворения потребностей в основном сырье промышленности пластических масс, производства синтетической резины и легких авиационных топлив. Маршалл [933] описал процесс каталитического дегидрирования и ароматизации нефтепродуктов (гидроформинг), который использовался на заводах «Baytown Ordnpalce» во время войны для получения толуола, а также в послевоенное время для производства ароматических растворителей высокой чистоты и компонентов авиационного топлива. Хенсель и Бергер [559] рассмотрели применение универсального процесса крекинга нефтепродуктов над платиновым катализатором для производства углеводородов ароматического ряда из различного исходного сырья. Эти авторы показали, что общий мольный выход ароматических углеводородов из коммерческой единицы составляет 95% теоретического значения.

Глазго, Уиллингем и Россини [491] тщательно исследовали углеводородные фракции бензина, полученного каталитическим крекингом, и определили состав ароматической фракции C_8 . Представляет интерес сравнить распределение соединений ароматической фракции C_8 , полученных путем различного каталитического и термического крекинга. Количественный состав изомеров C_8 практически совпадает с величинами, полученными путем термодинамического анализа состава равновесной газовой фазы для температур процесса. Как указывал Россини [1246], распределение ароматических углеводородов такое же, как и для ароматических фракций C_8 , образующихся в естественных условиях в нефтях. В табл. VII.3 для сравнения приведен рассчитанный и определенный экспериментально состав ароматических фракций C_8 .

Торн, Мэрфи, Болл, Стэнфилд и Хорн [1497], исследовав продукты переработки битуминозного сланца и сланцевого масла, приводят состав бензино-лигроиновой фракции сланцевого масла (Pum-

* Подробный обзор отечественной и зарубежной литературы в области экспериментального и теоретического исследования термодинамики и кинетики нефтехимических реакций с участием различных типов углеводородов, анализ различных закономерностей в их свойствах, а также конкретные рекомендации по выбору оптимальных условий осуществления многих процессов переработки нефтяных и природных газов, производства нефтепродуктов и мономеров даны в работах А. В. Фроста (Труды по кинетике и катализу, Изд-во АН СССР, М., 1956; Избранные научные труды, Изд-во МГУ, 1960) и в монографии А. А. Введенского, Термодинамические расчеты нефтехимических процессов, Госгостехиздат, М., 1960. — Прим. перев.

Таблица VII.3

Состав ароматических фракций C₈^{a)}

Соединение	Гидроформинг	Крекинг над платиновым катализатором	Каталитический крекинг	Нефть прямой перегонки	Термодинамическое равновесие
o-Ксилол	20	23	20	20	23
m-Ксилол	43	40	50	50	47
p-Ксилол	17	21	20	20	21
Этилбензол	20	16	10	10	9
Сумма	100	100	100	100	100
Температура (°K)	755—810		727		727
Литература	[933]	[559]	[491]	[1246]	[1246]

^{a)} В об. % (= мол. % или вес. %).

Таблица VII.4

Равновесный состав бензино-лигроиновой фракции сланцевого масла

Состав	Термодинамическое равновесие			
	300° C	400° C	500° C	600° C
Производные бензола (C₈)				
Этилбензол	5	8	10	13
p-Ксилол	23	22	21	20
m-Ксилол	51	48	46	44
o-Ксилол	21	22	23	23
Производные бензола (C₉)				
Изопропилбензол	1	1	1	2
n-Пропилбензол	1	2	3	4
1-Метил-4-этилбензол	8	11	12	13
1-Метил-3-этилбензол	12	17	20	23
1-Метил-2-этилбензол	4	6	8	10
1,3,5-Триметилбензол	21	17	14	12
1,2,4-Триметилбензол	53	46	42	26

Литература:

[1477]

[1497]

^{a)} Все значения приведены в об. %.

Сравнение данных, приведенных в табл. VII.4, показывает значительное сходство состава алкилбензолных фракций C₈ и C₉, определенных у изученных сланцевых нефтей и рассчитанных из данных по равновесию Тейлором, Вагманом, Уильямсом, Питцером в России [1477].

Дрегер, Гуин, Лизман и Морроу [347] тщательно проанализировали имеющиеся в литературе данные о процессе получения высокооктановых компонентов бензина и исследовали термодинамическую устойчивость этих фракций. Они показали, что с термодинамической точки зрения наиболее вероятны реакции, приводящие к образованию низкомолекулярных соединений из парафинов и нафтенов с высоким молекулярным весом и ароматических углеводородов с длинными алкильными боковыми цепями. Разница в устойчивости между соединениями с низким и высоким молекулярным весом увеличивается с ростом температуры, что указывает на большую целесообразность проведения крекинга при высоких температурах. В ряду парафинов с одинаковым молекулярным весом нормальные соединения более устойчивы при высоких (выше 590° K) температурах и менее устойчивы при низких температурах, чем соответствующие им разветвленные парафины. Однако последние характеризуются более высокими октановыми числами. Отмеченные термодинамические особенности поведения парафинов справедливы только для равновесных реакций; в реальных же процессах переработки эти указанное равновесие не всегда достигается.

Хэйнеман, Шалл и Стивенсон [583] описали применение процесса гудриформинга для получения ароматических углеводородов высокооктановых автомобильных бензинов. Авторы приводят модские данные (табл. VII.5), иллюстрирующие превращение

Таблица VII.5

Гудриформинг циклогексана при давлении 21 атм и молярном отношении водорода к нефти, равном 4^{a)}
Циклогексан = бензол

Разгон	Превращение, %	
	найдено	равновесное значение
1	50	55
2	70	74
3	92	94

^{a)} Данные Хэйнемана, Шалла и Стивенсона [583].

циклогексана в бензол над типичным катализатором гудриформ (фирма «Гудри») и при избыточном давлении 21 атм и молярном отношении водорода к нефти, равном 4.

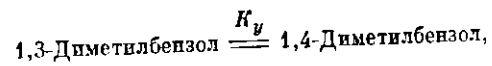
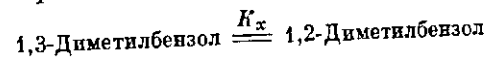
Три различных разгона были получены путем изменения температуры и объемной скорости процесса. Сравнение расчетной степени равновесного превращения с экспериментальными данными при одинаковых условиях свидетельствует о практическом достижении равновесия на каждой стадии разгона. Данные о степени равновесного превращения были получены путем подачи в экспериментальную установку чистого углеводорода и анализа продукта распада. Авторы отмечают, что выводы, полученные на основании опытов с чистыми соединениями, позволяют установить основные направления процесса распада углеводородов, однако эти выводы неприменимы полностью к исходному смешанному сырью, принимаемому на нефтеперерабатывающих заводах.

Используя данные по энергиям образования Гиббса, Гастингса и Нихолсон [578] с помощью цифровых счетных машин проведен детальный анализ равновесия с участием бензола и 12 метилбензолов. Расчеты равновесного состава в сложных системах связаны с большими трудностями, однако, как показали Кандинер и Бринкли [712], их можно значительно упростить путем соответствующего подбора уравнений, связывающих определенные параметры системы. Реакция диспропорционирования любого метилбензола приводит к образованию следующего ряда соединений в равновесной газовой фазе:

Соединение	Молярная доля
Бензол	N_3
Толуол	N_4
1,2-Диметилбензол	} N_1
1,3-Диметилбензол	
1,4-Диметилбензол	
1,2,3-Триметилбензол	
1,2,4-Триметилбензол	} N_2
1,3,5-Триметилбензол	
1,2,3,4-Тетраметилбензол	
1,2,3,5-Тетраметилбензол	} N_5
1,2,4,5-Тетраметилбензол	
Пентаметилбензол	
Гексаметилбензол	N_7

N_i — молярные доли i -го соединения, находящегося в состоянии равновесия. Концентрации изомерных соединений, образующихся в процессе превращения, можно связать с концентрацией некоторого

выбранного изомера. Так, например:



где K_x и K_y — константы равновесия рассматриваемых реакций. Концентрации этих соединений (в квадратных скобках) можно записать так:

$$[1,3\text{-Диметилбензол}] = N_1,$$

$$[1,2\text{-Диметилбензол}] = K_x \cdot [1,3\text{-Диметилбензол}] = K_x N_1,$$

$$[1,4\text{-Диметилбензол}] = K_y \cdot [1,3\text{-Диметилбензол}] = K_y N_1.$$

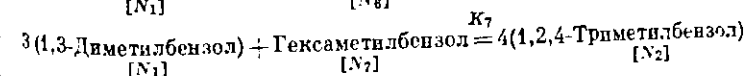
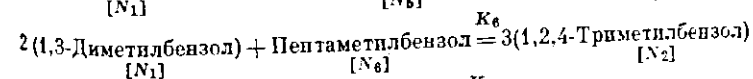
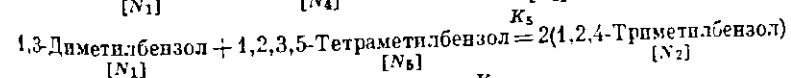
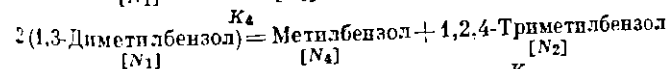
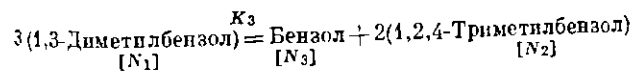
Из этих уравнений нетрудно рассчитать общую концентрацию диметилбензолов:

$$N'_1 = (K_x + K_y + 1) \cdot N_1.$$

Аналогичный подход к равновесию с участием три- и тетраметилбензолов позволяет уменьшить число рассматриваемых соединений с 13 до 7 и тем самым облегчает расчет равновесного состава. Для определения семи неизвестных концентраций требуется семь независимых уравнений. Два из этих уравнений представляют собой уравнения материального баланса фенильного и метильного радикалов в системе. Для составления этих уравнений выбирается несколько независимых компонентов, число которых равно числу других радикалов, входящих в уравнение материального баланса. Остальные пять уравнений, приведенные в табл. VII.6, содержат

Таблица VII.6

Использование уравнений химических реакций в методе Кандинера и Бринкли^{a)}



^{a)} Данные Кандинера и Бринкли [712].

Вычисленные равновесные концентрации метилбензолов (мол.%)^{a)}

T, °K	Бензол	Толуол	1,2-Диметил-бензол	1,3-Диметил-бензол	1,4-Диметил-бензол	1,2,3-Триметилбензол	1,2,4-Триметилбензол	1,3,5-Триметилбензол	1,2,3,4-Тетраметилбензол	1,2,3,5-Тетраметилбензол	1,2,4,5-Тетраметилбензол	Пентаметилбензол	Гексаметилбензол
300	30,0	44,0	3,5	13,4	5,3	0,1	2,1	1,4	—	0,2	—	0,0	0,0
400	30,2	43,1	4,2	12,9	5,6	0,2	2,5	1,1	—	0,2	—	0,0	0,0
500	31,2	42,2	4,6	12,5	5,5	0,2	2,5	1,0	—	0,3	—	0,0	0,0
600	31,5	41,7	5,0	12,2	5,5	0,3	2,6	0,9	—	0,3	—	0,0	0,0
700	31,9	41,1	5,3	12,0	5,4	0,4	2,6	0,9	—	0,4	—	0,0	0,0
800	32,0	40,6	5,8	11,9	5,4	0,4	2,7	0,8	—	0,4	—	0,0	0,0
900	32,3	40,6	5,9	11,6	5,2	0,5	2,6	0,8	—	0,5	—	0,0	0,0
1000	32,4	40,3	6,1	11,5	5,2	0,5	2,7	0,8	—	0,5	—	0,0	0,0

Равновесие реакции диспропорционирования толуола

300	30,0	44,0	3,5	13,4	5,3	0,1	2,1	1,4	—	0,2	—	0,0	0,0
400	30,2	43,1	4,2	12,9	5,6	0,2	2,5	1,1	—	0,2	—	0,0	0,0
500	31,2	42,2	4,6	12,5	5,5	0,2	2,5	1,0	—	0,3	—	0,0	0,0
600	31,5	41,7	5,0	12,2	5,5	0,3	2,6	0,9	—	0,3	—	0,0	0,0
700	31,9	41,1	5,3	12,0	5,4	0,4	2,6	0,9	—	0,4	—	0,0	0,0
800	32,0	40,6	5,8	11,9	5,4	0,4	2,7	0,8	—	0,4	—	0,0	0,0
900	32,3	40,6	5,9	11,6	5,2	0,5	2,6	0,8	—	0,5	—	0,0	0,0
1000	32,4	40,3	6,1	11,5	5,2	0,5	2,7	0,8	—	0,5	—	0,0	0,0

Равновесие реакции диспропорционирования диметилбензола

300	4,5	23,7	6,7	25,9	10,3	0,7	14,8	9,7	0,3	1,9	1,4	0,1	0,0
400	4,9	23,6	7,8	24,4	10,3	1,1	15,9	7,2	0,5	2,4	1,8	0,1	0,0
500	5,3	23,8	8,7	23,3	10,2	1,4	15,5	6,2	0,7	2,8	1,9	0,2	0,0
600	5,7	24,0	9,1	22,5	10,0	1,7	15,2	5,5	0,9	3,0	2,1	0,3	0,0
700	6,0	24,1	9,7	21,8	9,8	2,1	14,7	4,9	1,2	3,3	2,1	0,3	0,0
800	6,3	24,1	10,3	21,4	9,6	2,2	14,3	4,5	1,3	3,4	2,2	0,4	0,0
900	6,5	24,2	10,4	20,7	9,3	2,4	14,2	4,3	1,5	3,7	2,3	0,5	0,0
1000	6,7	24,4	10,8	20,4	9,1	2,6	13,8	4,0	1,8	3,8	2,3	0,5	0,0

Равновесие реакции диспропорционирования триметилбензола

300	0,2	3,2	3,4	13,1	5,2	1,2	28,0	18,4	2,0	13,4	9,9	2,0	0,0
400	0,2	3,9	4,2	13,3	5,6	1,9	28,3	12,9	2,9	14,1	10,1	2,6	0,0
500	0,3	4,5	4,9	13,4	5,8	2,5	26,9	10,7	3,7	14,4	9,9	3,0	0,0
600	0,4	5,2	5,5	13,6	6,0	2,9	25,5	9,2	4,3	14,3	9,7	3,4	0,0
700	0,5	5,4	5,9	13,2	6,0	3,4	24,2	8,1	5,1	14,8	9,3	4,1	0,0
800	0,6	5,6	6,3	13,2	5,9	3,6	23,2	7,4	5,5	14,8	9,4	4,4	0,1
900	0,6	6,0	6,6	13,0	5,8	3,9	22,5	6,8	6,0	14,8	9,2	4,7	0,1
1000	0,7	6,4	6,9	13,1	5,9	4,1	21,7	6,3	6,3	14,7	8,9	4,9	0,1

Равновесие реакции диспропорционирования тетраметилбензола

300	0,0	0,0	0,3	1,0	0,4	0,5	11,6	7,7	4,5	29,1	21,5	23,3	0,1
400	0,0	0,1	0,4	1,1	0,5	0,8	11,9	5,4	5,9	28,3	20,2	25,2	0,2
500	0,0	0,1	0,6	1,5	0,6	1,2	12,5	5,0	7,1	27,7	19,2	24,1	0,4
600	0,0	0,2	0,7	1,8	0,8	1,5	12,7	4,6	8,1	26,8	18,2	24,0	0,6
700	0,0	0,3	1,0	2,2	0,9	1,8	12,9	4,3	9,1	26,2	16,3	24,1	0,9
800	0,0	0,3	1,1	2,2	1,0	2,0	12,6	4,0	9,6	25,7	16,2	24,3	1,0
900	0,0	0,3	1,2	2,3	1,0	2,1	12,4	3,7	10,2	25,2	15,7	24,5	1,4
1000	0,0	0,4	1,3	2,5	1,1	2,3	12,2	3,6	10,7	24,7	15,0	24,6	1,6

Равновесие реакции диспропорционирования пентаметилбензола

300	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,1	0,6	4,0	3,0	84,4	7,4
400	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,1	1,1	5,5	3,9	77,9	11,4
500	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,3	0,1	1,8	7,0	4,8	71,9	14,1
600	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4	0,1	2,3	7,8	5,2	67,9	16,3
700	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,5	0,2	2,9	8,5	63,8	18,7
800	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,6	0,2	3,3	9,0	61,5	19,6
900	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,7	0,2	3,8	9,4	58,7	21,2
1000	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,8	0,2	4,1	9,6	57,5	21,9

a) Данные Хастингса и Нихолсона [578].

в качестве известного концентрацию только одного неизвестного вещества, выраженную через концентрации двух специально выбранных независимых компонентов (1,3-диметилбензол и 1,2,4-триметилбензол). Типичное уравнение (последняя строка в табл. VII.6) приводит к следующему выражению:

$$K_7 = \frac{(N_2)^4}{N_7(N_1)^3} \quad \text{или} \quad N_7 = \frac{(N_2)^4}{K_7(N_1)^3}$$

Предполагая, что N_1 и N_2 равны опытным значениям, константу равновесия K_7 нетрудно рассчитать из данных по энергии Гиббса

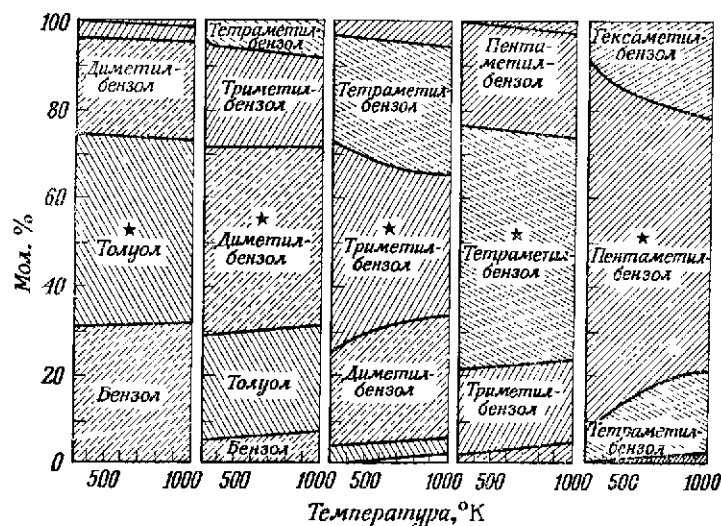


Рис. VII.4. Равновесие реакций диспропорционирования метилбензолов. Первоначально присутствовавшие соединения отмечены звездочкой (*). По данным Хастингса и Нихолсона [578].

для участников рассматриваемой реакции. Зная константу равновесия, из приведенного выше соотношения определяем величину N_7 . Полученное значение N_7 легко проверить путем подстановки его в уравнения материального баланса фенильного или метильного радикала. Плохое совпадение полученных двумя путями значений N_7 требует пересмотра величин N_1 и N_2 и проведения повторного расчета. Применение описанного метода последовательных приближений облегчается использованием цифровых электронно-вычислительных машин. Аналогичным образом можно рассчитать концентрации других компонентов равновесной смеси и в конечном счете определить концентрации всех изомеров. Найденные таким путем равновесные концентрации всех метилбензолов приведены в табл. VII.7 и графически представлены на рис. VII.4.

Гастингс и Нихолсон [577] сравнили вычисленный и экспериментально найденный состав равновесной газовой фазы процесса изомеризации три- и тетраметилбензолов при 300 и 700° К и пришли к выводу, что данные совпадают в пределах, обусловленных возможными ошибками в анализе продуктов реакции и теми предположениями, которые были положены в основу статистических расчетов.

С первого взгляда кажется весьма трудным определить экономическую ценность такой информации. Данные по равновесиям процессов, протекающих при переработке нефти, могут быть неоднократно использованы при решении конкретных технологических проблем. При этом следует отметить, что если для какого-либо соединения известна величина энергии Гиббса, то ее можно использовать в расчете равновесия любой другой реакции, для всех остальных участников которой имеются соответствующие величины энергии Гиббса. Именно поэтому многократное использование полученных данных в решении постоянно возникающих задач анализа термодинамического равновесия полностью оправдывает первоначальную затрату на получение исходной информации.

Тераниси и Бенсон [1478] изучили в интервале температур 522,5—582,9° К равновесие реакции дегидрирования изобутана подом в газовой фазе *. Приведенные в табл. VII.8 значения констант равно-

Таблица VII.8

Данные по равновесию гомогенной газовой реакции
 $\text{изо-C}_4\text{H}_{10} + \text{I}_2 = \text{изо-C}_4\text{H}_8 + 2\text{HI} \text{ а)}$

T, °K	Исходное давление, мм		Равновесное давление, мм				Kp, атм·10 ³	
	I ₂	изо-C ₄ H ₁₀	I ₂	изо-C ₄ H ₁₀	изо-C ₄ H ₈	HI	опыт	расчет
525,1	9,67	200,3	3,24	193,9	6,35	12,7	2,15	2,02
522,5	14,6	119,4	7,82	112,6	6,90	13,8	1,96	1,79
525,7	3,89	275,4	0,33	271,8	3,44	6,88	2,34	2,08
551,9	7,50	206,5	0,88	199,9	6,35	12,7	7,66	6,77
552,5	14,8	121,2	5,25	111,6	9,55	19,1	7,83	6,95
552,5	4,32	158,7	0,26	154,6	3,91	7,82	7,83	6,95
582,7	8,37	131,9	0,72	124,3	7,60	15,2	25,8	23,7
582,9	3,56	136,7	0,06	133,2	3,42	6,83	26,3	23,9
582,7	5,95	168,8	0,26	163,1	5,92	11,8	25,5	23,7

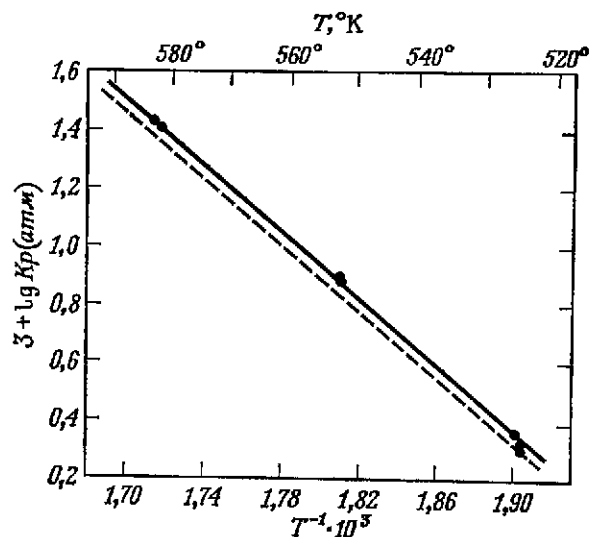
а) Данные Тераниси и Бенсона [1478].

* Термодинамика реакций изомеризации, дегидрирования и полимеризации бутанов и бутенов, а также гидратации бутенов подробно рассмотрена в работах: А. В. Фрост и сопр., ЖОХ, 6, 1796 (1936); 7, 122 (1937); 9, 1813 (1939); Химия твердого топлива, 8, 169 (1937). — Прим. перев.

весия можно охватить следующим линейным уравнением:

$$\lg K_p (\text{атм}) = -\frac{25\,900 (\pm 300)}{4,575T} + 8,130.$$

Среднее отклонение величин, рассчитанных по этому уравнению, от экспериментальных значений составляет $\pm 1\%$. На рис. VII.2 экспериментальные данные для изученной реакции сравниваются с константами равновесия, рассчитанными по термодинамическим



Р и с. VII.2. Зависимость $\lg K_p$ от $1/T$ для реакции
Изобутан + I_2 = Изобутен + $2HI$.

Штриховая линия соответствует значениям K_p , рассчитанным из термодинамических данных.
● По данным Тераписи и Бенсона [1478].

данным. Как видно из диаграммы, наблюдаемая и рассчитанная температурные зависимости константы равновесия почти полностью совпадают. Следует, однако, отметить, что определенные из экспериментальных данных значения ΔGr° примерно на $0,10$ ккал выше рассчитанных величин. Эта разница, как считают сами авторы, выходит за пределы экспериментальных ошибок и находится в пределах погрешностей, связанных с определением термодинамических данных для углеводородов, участвующих в рассматриваемой реакции.

Получение химических соединений из метана

Термодинамический анализ — это наиболее дешевый и быстрый способ анализа реакций, приводящих к получению тех или иных ценных веществ. Предположим, что некоторый экономический район

обладает определенными запасами природного газа, богатого метаном. Для экономичного и рационального использования этого вида сырья полезно проанализировать все возможные реакции превращения метана в устойчивые продукты. Для этой цели нужно записать все мыслимые реакции и составить для них таблицу изменений энергии Гиббса при нескольких температурах. Термодинамический анализ некоторых технически важных реакций с участием метана был проведен Миллером [1007], Фуксом, Андре, Пленцом и Вейзером [451], а также рядом других авторов*. В табл. VII.9 приведены результаты термодинамического анализа некоторых реакций превращения метана в другие соединения при давлении 1 атм . Изменения энергии Гиббса указанных реакций рассчитаны при $400, 600, 800$ и 1000°K . Следует отметить, что в табл. VII.9 рассмотрены только такие реакции, данные для всех участников которых приведены в настоящей книге, причем перечень реакций ни в коей мере не является исчерпывающим. Тем не менее даже в этом случае информация о реакционной способности метана очень полезна и позволяет оценить возможности получения из него различных ценных продуктов.

Рассмотрим подробнее некоторые реакции, представляющие особый интерес. Положительные величины ΔGr° реакций 2—4 указывают на устойчивость метана в присутствии водорода по отношению к распаду на углеводороды C_2 . Отрицательные значения ΔGr° реакций 6а, 7а, 8а и 9а свидетельствуют о самопроизвольном протекании замещения атомов водорода в метане на атомы хлора; однако из величин ΔGr° реакций 6б, 7б, 8б и 9б видно, что с увеличением числа атомов водорода, замещенных хлором, этот процесс постепенно становится все менее благоприятным. Величины ΔGr° реакций 11 и 37 свидетельствуют о возможности использования метана в качестве исходного сырья для синтеза углеводородов. Отрицательные значения ΔGr° реакций 14, 18 и 43 указывают на возможность образования H_2O_2 в процессе окисления метана. Термодинамические параметры реакции 23 подчеркивают трудность осуществления синтеза уксусной кислоты из двуокиси углерода и метана и свидетельствуют о легкости протекания обратной реакции. Реакцию 32, представляющую собой мягкий метод хлорирования метана, можно использовать для замещения атомов водорода в молекуле метана на атомы хлора и получения таким путем любого хлорзамещенного метана. Сравнение окислительной способности различных веществ при взаимодействии с метаном связано с рассмотрением целого ряда родственных реакций. Так, реакции 59—62 представляют собой весьма жесткий метод хлорирования метана. Реакции 63—65 описывают взаимодействие с метаном бифункционального реагента; значе-

* См. также исследования равновесий некоторых реакций с участием углерода, водорода, метана и ацетилена, выполненные в СССР А. В. Фростом и А. А. Введенским: ЖОХ, 2, 715—725 (1932); Химия твердого топлива, 4, 171—185 (1933). — Прим. перев.

Таблица VII.9

Изменение энергии Гиббса газозафазных реакций с участием метана

№ реакции	Тип реакции	ΔGr° , ккал/моль CH_4			
		400° К	600° К	800° К	1000° К
<i>Разложение</i>		ΔGr° , ккал/моль CH_4			
1	$CH_4 = C + 2H_2$	10,07	5,50	0,55	-4,61
2	$2CH_4 = C_2H_2 + 3H_2$	34,36	28,42	22,14	15,69
3	$2CH_4 = C_2H_4 + 2H_2$	18,92	15,96	12,79	9,51
4	$2CH_4 = C_2H_6 + H_2$	8,34	8,48	8,51	8,46
<i>Реакции с элементами</i>		ΔGr° , ккал/моль HCl			
5	$CH_4 + C = C_2H_4$	27,77	26,42	25,04	23,64
6a	$CH_4 + Cl_2 = CH_3Cl + HCl$	-25,96	-26,57	-27,21	-27,86
7a	$CH_4 + 2Cl_2 = CH_2Cl_2 + 2HCl$	-50,18	-50,92	-51,76	-52,66
8a	$CH_4 + 3Cl_2 = CHCl_3 + 3HCl$	-72,64	-73,07	-73,67	-74,40
9a	$CH_4 + 4Cl_2 = CCl_4 + 4HCl$	-92,48	-92,15	-92,12	-92,33
<i>Реакции с неорганическими соединениями</i>		ΔGr° , ккал/моль CH_4			
66	$CH_4 + Cl_2 = CH_3Cl + HCl$	-25,96	-26,57	-27,71	-27,86
76	$CH_4 + 2Cl_2 = CH_2Cl_2 + 2HCl$	-25,09	-25,46	-25,88	-26,33
86	$CH_4 + 3Cl_2 = CHCl_3 + 3HCl$	-24,21	-24,36	-24,56	-24,80
96	$CH_4 + 4Cl_2 = CCl_4 + 4HCl$	-23,12	-23,04	-23,03	-23,08
10	$CH_4 + N_2 = HCN + NH_3$	36,56	35,59	34,49	33,33
11	$CH_4 + 1/2 O_2 = CO + 2H_2$	-24,95	-33,87	-43,14	-52,56
12	$CH_4 + 1/2 O_2 = CH_3OH$	-25,48	-23,03	-20,55	-18,07
13	$CH_4 + O_2 = C + 2H_2O$	-96,99	-96,82	-96,82	-96,71
14	$CH_4 + 2O_2 = C + 2H_2O_2$	-35,25	-29,44	-23,83	-18,35
15	$2CH_4 + 3/2 O_2 = C_2H_2 + 3H_2O$	-91,87	-96,64	-101,70	-106,76
16	$CH_4 + 3/2 O_2 = HCOOH + H_2O$	-125,03	-122,37	-119,77	-117,19
17	$CH_4 + O_2 = HCHO + H_2O$	-69,19	-70,03	-70,88	-71,71
18	$CH_4 + O_3 = HCHO + H_2O_2$	-78,92	-80,28	-81,67	-83,07
19	$CH_4 + S = CH_3SH$	-6,47	-7,66	-9,85	-7,81
20	$CH_4 + 4S = CS_2 + 2H_2S$	4,31	-9,64	-27,56	-19,17
21	$CH_4 + CO = CH_3CHO$	16,05	21,90	27,70	33,43
22	$CH_4 + CO_2 = 2CO + 2H_2$	34,36	21,21	7,72	-5,89
23	$CH_4 + CO_2 = CH_3COOH$	19,25	24,88	30,44	35,90
24	$CH_4 + CO_2 = H_2C = CO + H_2O$	36,56	34,82	32,94	31,03
25	$CH_4 + CO = H_2C = CO + H_2$	30,78	30,90	30,74	30,41

Продолжение табл. VII.9

№ реакции	Тип реакции	400° К	600° К	800° К	1000° К
		26	$CH_4 + CO = H_2C = \underset{\text{O}}{\text{C}} - CH_2$	45,74	52,71
27	$CH_4 + COS = C + H_2 + CO + H_2S$	7,96	1,63	-4,90	-11,51
28	$CH_4 + COS = 2C + H_2O + H_2S$	-10,55	-10,16	-9,87	-9,61
29	$CH_4 + COS = CH_3CHO + S$	22,81	28,12	34,38	36,34
30	$CH_4 + COS = CH_3SH + CO$	0,29	-1,44	-3,17	-4,90
31	$CH_4 + COS = H_2S + CO + H_2S$	28,67	27,03	25,29	23,51
32	$CH_4 + COCl_2 = CH_3Cl + CO + HCl$	-12,51	-19,70	-26,87	-33,97
33	$CH_4 + COCl_2 = CH_3COCl + HCl$	-10,60	-11,24	-11,94	-12,67
34	$CH_4 + COCl_2 = H_2C = CO + 2HCl$	-1,79	-9,07	-16,46	-23,88
35	$CH_4 + COCl_2 = HCHO + CH_2Cl_2$	18,58	17,79	17,04	16,31
36	$CH_4 + COCl_2 = H_2C = CCl_2 + H_2O$	12,71	12,20	11,55	10,87
37	$CH_4 + H_2O = CO + 3H_2$	28,58	17,29	5,52	-6,51
38	$CH_4 + H_2O = CH_3OH + H_2$	28,05	28,13	28,11	27,98
39	$CH_4 + NH_3 = HCN + 3H_2$	39,32	27,89	15,91	3,63
40	$CH_4 + NH_3 = CH_3NH_2 + H_2$	23,84	23,85	23,72	23,00
41	$CH_4 + N_2H_4 = CH_3NH_2 + NH_3$	-22,10	-22,41	-22,65	-23,30
42	$CH_4 + NO_2 = HCOOH + H_2 + 1/2 N_2$	-85,43	-88,17	-91,11	-94,17
43	$CH_4 + 2NO_2 = C + 2H_2O_2 + N_2$	-63,11	-63,36	-63,83	-64,37
44	$CH_4 + NO + NO_2 = CO + 2H_2O + N_2$	-166,36	-172,97	-179,67	-186,30
45	$CH_4 + NO + NO_2 = HCOOH + H_2O + N_2$	-159,38	-159,15	-158,98	-158,83
46	$CH_4 + 2NO = HCHO + H_2O + N_2$	-110,03	-109,67	-109,30	-108,93
47	$CH_4 + HNO_3 = CH_2NO_2 + H_2O$ Нитрометан	-26,81	-27,34	-27,87	-28,34
48	$CH_4 + HNO_3 = CH_3NO_2 + H_2O$ Метилнитрит	-25,16	-26,28	-27,50	-28,72
49	$CH_4 + HNO_3 = CH_3NO_3 + H_2$ Метилнитрат	22,99	23,57	23,89	24,07
50	$CH_4 + H_2S = CH_3SH + H_2$	2,40	2,43	2,28	2,00
51	$CH_4 + 2H_2S = CS_2 + 4H_2$	39,79	30,72	20,96	10,85
52	$CH_4 + SO_2 = CO_2 + H_2S + H_2$	-21,18	-27,24	-33,55	-39,96
53	$CH_4 + SO_2 = CO + H_2S + H_2O$	-15,40	-23,32	-31,35	-39,34
54	$CH_4 + SO_2 = HCOOH + H_2S$	-8,42	-9,50	-10,66	-11,87
55	$CH_4 + SO_2 = CH_3SH + O_2$	65,48	64,14	62,73	61,27
56	$CH_4 + SO_2 = HCHO + H_2O + S$	2,76	1,77	1,70	-2,63
57	$CH_4 + SO_3 = CH_3OH + SO_2$	-11,01	-13,09	-15,05	-16,91
58	$CH_4 + SO_3 = HCOOH + H_2O + S$	-38,68	-40,63	-41,69	-46,95
59	$CH_4 + SO_2Cl_2 = CH_3Cl + SO_2 + HCl$	-52,22	-55,63	-58,94	-63,88
60	$CH_4 + 2SO_2Cl_2 = CH_2Cl_2 + 2SO_2 + 2HCl$	-102,70	-109,04	-115,22	-121,34
61	$CH_4 + 3SO_2Cl_2 = CHCl_3 + 3SO_2 + 3HCl$	-151,42	-160,25	-168,86	-177,42

№ реакции	Тип реакции	400° К	600° К	800° К	1000° К
62	$\text{CH}_4 + 4\text{SO}_2\text{Cl}_2 = \text{CCl}_4 + 4\text{SO}_2 + 4\text{HCl}$	-197,52	-208,39	-219,04	-229,69
63	$\text{CH}_4 + \text{ClCN} = \text{CH}_3\text{CN} + \text{HCl}$ а)	-15,59	-16,04	-16,51	-17,00
64	$\text{CH}_4 + \text{ClCN} = \text{CH}_3\text{Cl} + \text{HCN}$ а)	-4,51	-5,17	-5,84	-6,50
65	$\text{CH}_4 + (\text{CN})_2 = \text{CH}_3\text{CN} + \text{HCN}$	-5,33	-6,07	-6,81	-7,57
<i>Реакции с простыми органическими соединениями</i>					
66	$\text{CH}_4 + \text{C}_2\text{H}_2 = \text{CH}_3\text{CH} = \text{CH}_2$	-19,88	-13,87	-7,81	-4,79
67	$\text{CH}_4 + \text{C}_2\text{H}_4 = \text{C}_3\text{H}_8$	-6,43	0,08	6,51	12,85
68	$\text{CH}_4 + \text{HCHO} = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2\text{O}$	-0,03	-0,37	-0,85	-1,36
69	$\text{CH}_4 + \text{HCHO} = \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	-1,19	7,04	12,77	18,42
70	$\text{CH}_4 + \text{CH}_3\text{OH} = \text{C}_2\text{H}_6 + \text{H}_2\text{O}$	-11,37	-11,16	-11,09	-11,06
71	$\text{CH}_4 + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OCH}_3 + \text{H}_2$	24,26	25,22	25,93	26,45
72	$\text{CH}_4 + \text{HCOOH} = \text{CH}_3\text{OH} + \text{H}_2\text{O}$	30,36	29,31	28,34	27,41
73	$\text{CH}_4 + \text{HCOOH} = \text{CH}_3\text{CHO} + \text{H}_2\text{O}$	9,07	8,08	7,01	5,96
74	$\text{CH}_4 + \text{HCOOH} = \text{HCOOCH}_3 + \text{H}_2$	25,03	24,79	24,30	23,66
75	$\text{CH}_4 + \text{CH}_3\text{COOH} = \text{CH}_3\text{COCH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	10,57	9,76	8,90	8,06
76	$\text{CH}_4 + \text{CH}_3\text{COOH} = \text{CH}_3\text{OH} + \text{CH}_3\text{CHO}$	44,82	48,79	52,95	57,19
77	$\text{CH}_4 + (\text{CH}_3\text{CO})_2\text{O} = \text{CH}_3\text{COCH}_3 + \text{CH}_3\text{COOH}$	-0,57	-0,74	-0,93	-1,12
78	$\text{CH}_4 + \text{CH}_3\text{CHO} = \text{CH}_3\text{CH} = \text{CH}_2 + \text{H}_2\text{O}$	4,21	3,78	3,25	2,68
79	$\text{CH}_4 + \text{CH}_3\text{CHO} = \text{CH}_3\text{COCH}_3 + \text{H}_2$	7,99	8,82	9,44	9,91
80	$\text{CH}_4 + \text{CH}_3\text{COCH}_3 = (\text{CH}_3)_2\text{CH} = \text{CH}_2 + \text{H}_2\text{O}$	7,89	7,54	7,03	6,46
81	$\text{CH}_4 + \text{CH}_3\text{SH} = \text{CH}_3\text{SCH}_3 + \text{H}_2$	16,72	17,48	17,97	18,28
82	$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} = \text{CO} = \text{CH}_3\text{COCH}_3$	-6,74	-0,18	6,40	12,93
83	$\text{CH}_4 + \text{CH}_3\text{Cl} = \text{C}_2\text{H}_6 + \text{HCl}$	-3,38	-3,30	-3,31	-3,40
84	$\text{CH}_4 + \text{CH}_2\text{Cl}_2 = \text{C}_2\text{H}_5\text{Cl} + \text{HCl}$	-8,67	-9,11	-9,62	-10,23
85	$\text{CH}_4 + \text{CHCl}_3 = \text{H}_2\text{C} = \text{CHCl} + 2\text{HCl}$	-8,54	-16,18	-23,88	-31,61
86	$\text{CH}_4 + \text{CHCl}_3 = \text{C}_2\text{H}_2 + 3\text{HCl}$	3,30	-10,61	-24,67	-38,75
87	$\text{CH}_4 + \text{CHCl}_3 = \text{H}_3\text{C} - \text{CHCl}_2 + \text{HCl}$	-11,98	-12,58	-13,26	-14,03
88	$\text{CH}_4 + \text{CCl}_4 = 2\text{CH}_2\text{Cl}_2$	-7,88	-9,69	-11,40	-12,99
89	$\text{CH}_4 + \text{CCl}_4 = \text{H}_2\text{C} = \text{CCl}_2 + 2\text{HCl}$	-17,74	-25,75	-33,77	-41,74
90	$\text{CH}_4 + \text{C}_2\text{H}_5\text{Cl} = \text{C}_3\text{H}_8 + \text{HCl}$	-1,78	-1,65	-1,60	-1,59
91	$\text{CH}_4 + \text{C}_3\text{H}_7\text{Cl} = \text{C}_4\text{H}_{10} + \text{HCl}$	-2,42	-2,19	-2,03	-1,95
92	$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{C} = \text{CHCl} = \text{C}_3\text{H}_6 + \text{HCl}$	-8,04	-8,30	-8,60	-8,93
93	$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{C} = \text{CHCl} = \text{CH}_3\text{CHClCH}_3$	-11,56	-4,64	2,14	8,81
94	$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{C} = \text{CHCl} = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$	-9,08	-2,80	3,38	9,48
95	$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{C} = \text{CHCN} = \text{C}_3\text{H}_6 + \text{HCN}$	8,97	8,52	8,03	7,50
96	$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{C} = \text{CCl}_2 = \text{H}_3\text{C} - \text{CCl}_2 - \text{CH}_3$	-10,26	-3,36	3,34	9,86
97	$\text{CH}_4 + \text{CH}_3\text{COCl} = \text{CH}_3\text{COCH}_3 + \text{HCl}$	2,07	1,99	1,88	1,72
98	$\text{CH}_4 + \text{CH}_3\text{COCl} = \text{CH}_3\text{CHO} + \text{CH}_3\text{Cl}$	14,14	13,44	12,77	12,13

№ реакции	Тип реакции	400° К	600° К	800° К	1000° К
99	$\text{CH}_4 + \text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{Cl} = \text{H}_3\text{C} - \text{CHCl} - \text{CH}_3 + \text{HCl}$	-8,12	-8,24	-8,48	-8,77
100	$\text{CH}_4 + \text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{Cl} = \text{C}_3\text{H}_7\text{Cl} + \text{HCl}$	-5,37	-5,96	-6,63	-7,36
101	$\text{CH}_4 + \text{CH}_3\text{CHCl} - \text{CH}_3 = (\text{CH}_3)_2\text{CH} - \text{CH}_3 + \text{HCl}$	-0,46	-0,14	0,13	0,34
102	$\text{CH}_4 + \text{CH}_3\text{CCl}_2\text{CH}_3 = (\text{CH}_3)_3\text{CCl} + \text{HCl}$	-5,66	-5,57	-5,53	-5,53
103	$\text{CH}_4 + \text{CH}_3\text{NH}_2 = (\text{CH}_3)_2\text{NH} + \text{H}_2$	21,25	22,10	22,66	23,04
104	$\text{CH}_4 + (\text{CH}_3)_2\text{NH} = (\text{CH}_3)_3\text{N} + \text{H}_2$	20,44	21,90	23,07	24,03
105	$\text{CH}_4 + \text{C}_6\text{H}_5\text{N} = \text{C}_6\text{H}_7\text{N} + \text{H}_2$ Пиридин 2-Пиколин	9,27	9,53	9,58	9,46
106	$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{C} \begin{array}{c} \diagup \text{N} \\ \diagdown \text{H} \end{array} \text{CH}_2 = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$	-18,16	-12,98	-7,92	-2,95
107	$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{C} \begin{array}{c} \diagup \text{O} \\ \diagdown \text{O} \end{array} \text{CH}_2 = \text{C}_2\text{H}_5\text{OCH}_3$	-10,68	-5,20	0,18	5,45
108	$\text{CH}_4 + \text{C}_6\text{H}_5\text{Cl} = \text{C}_6\text{H}_6 + \text{CH}_3\text{Cl}$	4,34	4,37	4,49	4,66
109	$\text{CH}_4 + \text{C}_6\text{H}_5\text{Cl} = \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 + \text{HCl}$	-5,35	-5,58	-5,89	-6,21
110	$\text{CH}_4 + \text{C}_6\text{H}_4\text{Cl} = \text{C}_6\text{H}_4(\text{CH}_3)_2 + 2\text{HCl}$	-22,24	-18,42	-14,27	-9,98
111	$\text{CH}_4 + \text{C}_6\text{H}_5\text{OH} = \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	-5,55	-5,81	-6,02	-6,17
112	$\text{CH}_4 + \text{C}_6\text{H}_5\text{OH} = \text{HOC}_6\text{H}_4\text{CH}_3$	11,41	11,60	11,53	11,31
113	$\text{CH}_4 + \text{C}_8\text{H}_5\text{C}_2\text{H}_5 = \text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2$	12,59	12,89	12,91	12,78
114	$\text{CH}_4 + \text{C}_6\text{H}_5\text{CH} = \text{CH}_2 = \text{C}_6\text{H}_5\text{C}_3\text{H}_7$	-2,95	3,33	9,53	15,63

а) Возможно образование хлордианметанов.

ния ΔGr° этих реакций указывают на возможность получения хлордианметанов. В качестве примера реакций, которые приводят к высокому выходу желаемого продукта при низкой температуре, можно указать реакцию 67; наоборот, реакция 86 служит примером процессов, которые дают высокий выход при более высоких температурах. В качестве примера реакции, протекающей слева направо при низких температурах и справа налево при высоких, можно привести реакцию 82. При анализе выхода продуктов реакций в широком интервале температур необходимо учитывать влияние как величины изменения энергии Гиббса, так и температуры, поскольку $\Delta Gr^\circ/T = -R \ln K$. Так, например, для реакции 6а имеем:

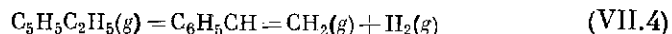
	400° К	600° К	800° К	1000° К
ΔGr°	-25,96	-26,57	-27,21	-27,86
$\Delta Gr^\circ/T$	-6,49	-4,43	-3,26	-2,79

Такое соотношение величин ΔGr° и T отвечает более высокому выходу продукта реакции при более низких температурах.

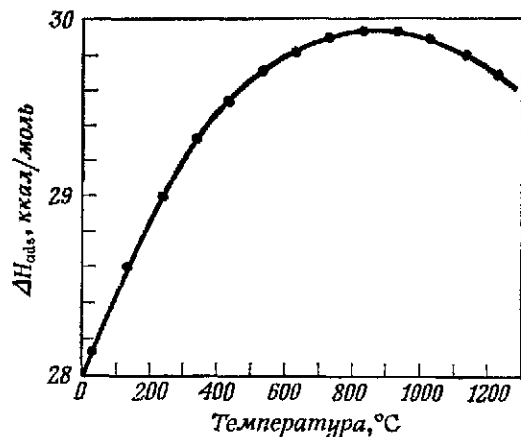
Метод термодинамического анализа, базирующийся на использовании величин энергии Гиббса, позволяет рассмотреть поведение той или иной системы реагирующих веществ при высоких давлениях и температурах. При этом следует подчеркнуть, что выводы о равновесных свойствах системы, полученные с помощью термодинамики, основываются только на данных по теплотам и энергиям образования веществ, участвующих в данном процессе.

Производство стирола

Истощивающий термодинамический анализ технологических процессов, связанных с производством стирола, был дан Сталлом [1433]. На рис. VII.3 приведена зависимость теплоты дегидрирования этилбензола



как функция температуры. Константы равновесия этой реакции были изучены Гошем, Гухой и Роем [472], Митчеллом [1014] и Веббом



Р и с. VII.3. Энтальпия реакции

Этилбензол =
=Стирол + Водород.
По данным Сталла [1433].

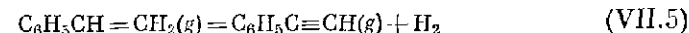
и Корсоном [1581]. Гутман, Вестрам и Питцер [554], основываясь на некоторых предположениях, рассчитали константы этого равновесия. Рассчитанные значения констант, приведенные в табл. VII.10, хорошо согласуются с данными лабораторного эксперимента и промышленных испытаний. Рассчитанные равновесные соотношения компонентов реакции (VII.4) при общем давлении 1 атм и различных парциальных давлениях водорода изображены схематически на рис. VII.4 и VII.5. Поскольку дальнейшее дегидрирование сти-

Таблица VII.10

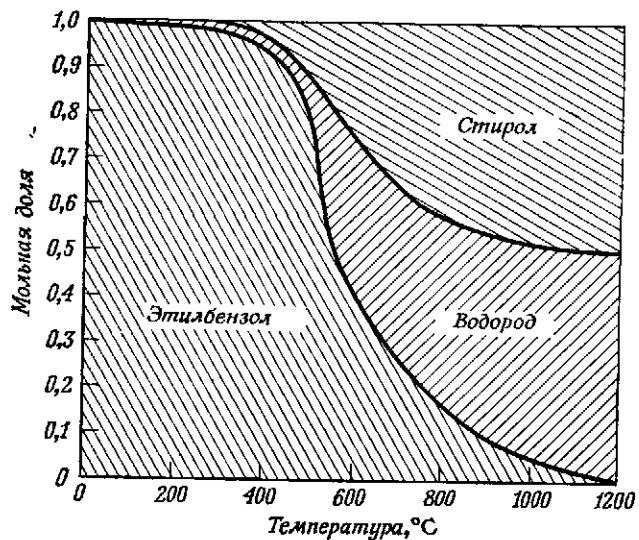
Сравнение вычисленных и экспериментальных констант равновесия K_p реакции
Этилбензол = Стирол + Водород

Т, °К	Сталл [1433]		Другие источники		
	ΔGr° , ккал/моль	K_p , атм	ΔGr° , ккал/моль	K_p , атм	Литература
300	19,843	$3,53 \cdot 10^{-15}$			
381			17,900	$5,5 \cdot 10^{-10}$	[554]
400	16,999	$5,14 \cdot 10^{-10}$	17,350	$3,3 \cdot 10^{-9}$	[554]
500	14,066	$7,12 \cdot 10^{-7}$	14,410	$5,0 \cdot 10^{-6}$	[554]
600	11,024	$9,65 \cdot 10^{-5}$	11,400	$7,1 \cdot 10^{-4}$	[554]
633			9,636	$4,7 \cdot 10^{-4}$	[472]
668			8,545	$1,6 \cdot 10^{-3}$	[472]
700	7,949	$3,30 \cdot 10^{-3}$			
703			7,414	$4,95 \cdot 10^{-3}$	[472]
733			6,442	$1,20 \cdot 10^{-2}$	[472]
768			5,299	$3,40 \cdot 10^{-2}$	[472]
800	4,858	$4,71 \cdot 10^{-2}$	5,160	$3,89 \cdot 10^{-1}$	[554]
900	1,751	$3,75 \cdot 10^{-1}$			
903			0,863	$6,18 \cdot 10^{-1}$	[1014]
973			-1,457	2,6	[1581]
1000	-1,383	2,00	-1,230	1,86	[554]
1023			-1,825	3,9	[1581]
1073			-2,111	4,3	[1581]
1100	-4,510	7,87			

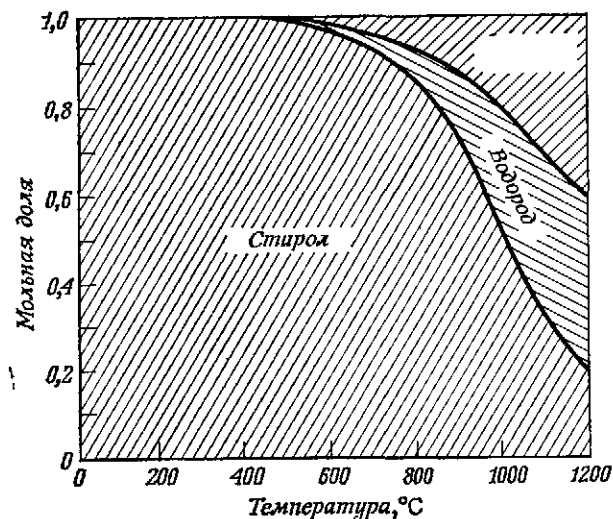
рола до фенилацетилену по реакции



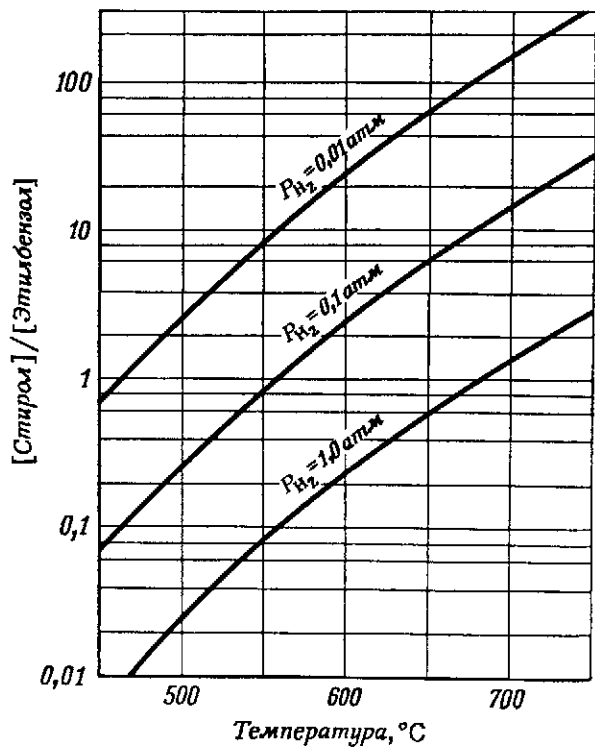
приводит к разветвлению и образованию поперечных связей в процессе полимеризации, при термодинамическом анализе необходимо учитывать также реакцию (VII.5). На рис. VII.6 схематически изображен равновесный состав газовой фазы реакции (VII.5). Из этой диаграммы видно, что для достижения одинаковой с реакцией (VII.4) степени превращения необходимо проводить реакцию дегидрирования стирола при температурах выше 500°C . Это заставляет поддерживать такую температуру реакции (VII.4), при которой выход реакции (VII.5) будет пренебрежимо мал. Данные по диспропорционированию стирола на этилбензол и фенилацетилен приведены на рис. VII.7. Из этих данных следует, что даже при комнатной температуре в состоянии равновесия на миллион частей стирола приходится одна или две части фенилацетилену, причем с ростом



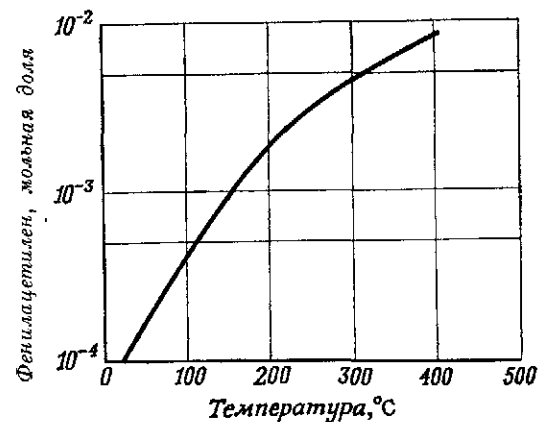
Р и с. VII.4. Рассчитанный состав равновесной газовой фазы при давлении 1 атм для реакции
 Этилбензол = Стирол + Водород.
 По данным Сталла [1433].



Р и с. VII.6. Рассчитанный состав равновесной газовой фазы при давлении 1 атм для реакции
 Стирол = Фенилацетилен + Водород.
 По данным Сталла [1433].

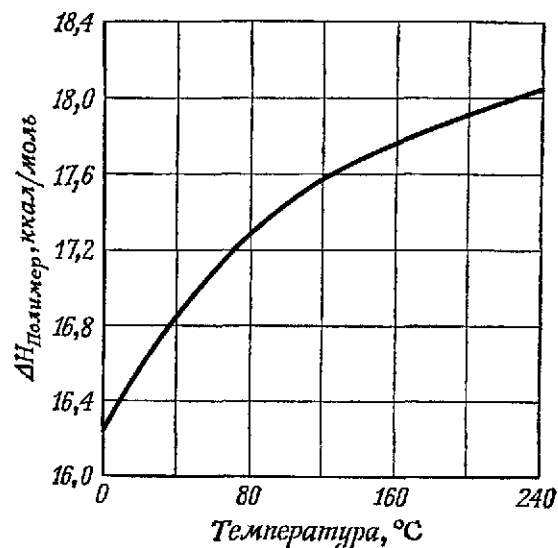


Р и с. VII.5. Выход стирола на стадии дегидрирования этилбензола при различных парциальных давлениях водорода.
 По данным Сталла [1433].



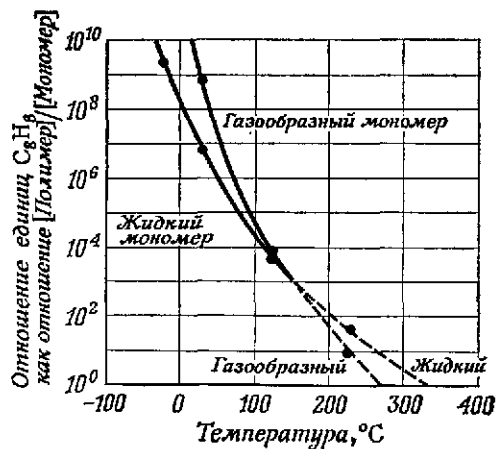
Р и с. VII.7. Диспропорционирование стирола на фенилацетилен и этилбензол.
 По данным Сталла [1433].

температуры это соотношение увеличивается. Зависимость энтальпии полимеризации жидкого стирола в полистирол от температуры



Р и с. VII.8. Энтальпия полимеризации жидкого мономера стирола в 100%-ный твердый полистирол. По данным Сталла [1433].

показана на рис. VII.8. На рис. VII.9 приведена зависимость от температуры рассчитанного равновесного состава газообразного или жидкого мономера, находящегося в равновесии с полимером. Таким



Р и с. VII.9. Рассчитанный состав равновесной газовой фазы для реакции полимеризации стирола. По данным Сталла [1433].

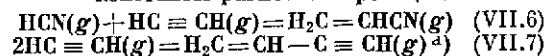
образом, использование термодинамических данных при проектировании производства стирола значительно сокращает предпусковой период и обеспечивает надежность процесса.

Синтез акрилонитрила

Синтез акрилонитрила в промышленном масштабе был осуществлен несколько лет назад. При первоначальных лабораторных исследованиях Штамм, Халверсон и Уолен [1404] рассчитали термодинамические функции молекул винилацетилена и цианистого водорода и опубликовали данные по равновесию двух реакций, протекающих при синтезе акрилонитрила. В табл. VII.11 и на рис. VII.10

Таблица VII.11

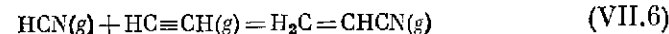
Изменения энергии Гиббса и рассчитанные константы равновесия реакций



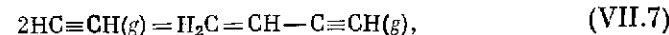
T, °K	ΔG°, ккал		lg Kp (атм)	
	(VII.6)	(VII.7)	(VII.6)	(VII.7)
298	-31,99	-26,90	23,445	19,72
300	-31,93	-26,90	23,262	19,59
400	-23,80	-23,90	15,735	13,06
500	-25,59	-20,80	11,184	9,09
600	-22,34	-17,80	8,135	6,48
700	-19,07	-14,70	5,952	4,59
800	-15,78	-11,60	4,316	3,17
900	-12,52	-8,50	3,040	2,06
1000	-9,26	-5,40	2,024	1,18

a) Данные Штамма, Халверсона и Уолена [1404].

приведены величины энергии Гиббса и вычисленные константы равновесия двух реакций



и



полученные этими авторами. При лабораторных исследованиях весьма полезно знать с достаточной точностью равновесные концентрации реагирующих веществ и ожидаемых продуктов реакции. Если термодинамический анализ показывает, что в состоянии равновесия исследуемые реакции дают достаточно высокий выход (как это имело место в случае реакций VII.6 и VII.7), то это дает основание для дальнейшего лабораторного изучения реакций. Равновесный

теоретический выход продуктов рассматриваемой реакции удается достичь при оптимальных лабораторных условиях. Если на практике теоретическое равновесие не достигается, то это указывает

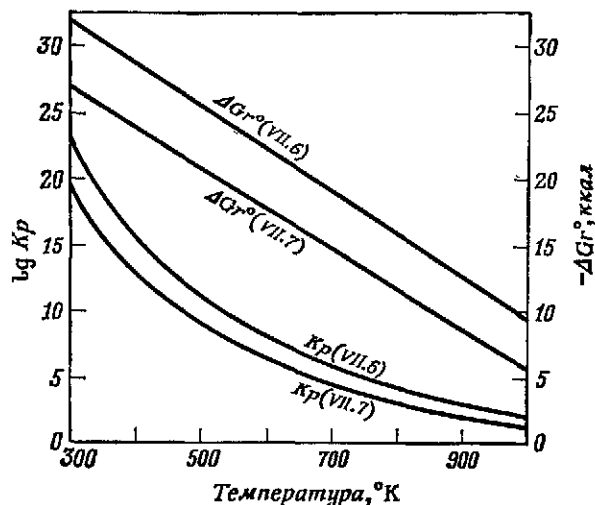
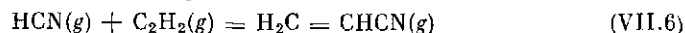


Рис. VII.10. Температурная зависимость изменения энергии Гиббса и логарифма константы равновесия для реакций



и

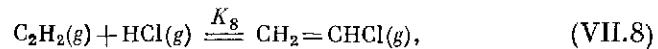


По данным Штамма, Халверсона и Уолена [1404].

на неблагоприятные кинетические условия протекания изучаемой реакции. В этом случае для ускорения реакции необходимо подобрать соответствующий катализатор.

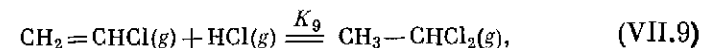
Синтез хлористого винила

Термодинамический анализ состава газовой фазы при синтезе хлористого винила из ацетиленов и хлористого водорода при атмосферном и повышенном давлениях был проведен Скупинским [1369]*. Им же была рассмотрена экономическая целесообразность этого процесса при обычных и повышенных давлениях с использованием концентрированного и разбавленного ацетиленов. Синтез хлористого винила осуществляется по реакции



* См. также расчет равновесий некоторых реакций с участием хлорзамещенных этиленов, выполненный В. М. Татевским и А. В. Фростом [Вестник МГУ, № 3, 65—81 (1947)]. — Прим. перев.

которая сопровождается побочным процессом



характеризующимся образованием 1,1-дихлорэтана. Промышленный синтез хлористого винила проводится при температуре 120—180° С и нормальном давлении в многотрубчатых реакторах, заполненных катализатором (хлорид меди), нанесенным на активированный уголь.

Таблица VII.12

Рассчитанные константы равновесия для реакций (VII.8) и (VII.9)

Константа равновесия	300° К	400° К	500° К
K_8	$6,58 \cdot 10^{10}$	$2,94 \cdot 10^6$	$6,55 \cdot 10^3$
K_9	$1,06 \cdot 10^5$	$7,13 \cdot 10^1$	$8,77 \cdot 10^{-1}$

Константы равновесия, вычисленные авторами этой книги и приведенные в табл. VII.12, хорошо согласуются с величинами, полученными Скупинским. Состав равновесной газовой фазы, образующейся при синтезе хлористого винила из концентрированного и разбавленного ацетиленов при разных давлениях, приведен в табл. VII.13 и VII.14.

Таблица VII.13

Состав равновесной газовой фазы, рассчитанный для реакции синтеза хлористого винила из концентрированного ацетиленов (карбида)^{a)}

Давление, атм	Температура, °С	Равновесный состав, мол. %			
		C_2H_2	CH_3CHCl_2	HCl	CH_2CHCl
1	100	0,02	0,02	0,01	99,95
	200	0,49	0,05	0,43	99,03
5	100	0,02	0,02	0,00	99,96
	200	0,26	0,10	0,16	99,48
10	100	0,02	0,02	0,00	99,96
	200	0,22	0,12	0,10	99,56

a) Данные Скупинского [1369].

Таблица VII.14

Состав равновесной газовой фазы, рассчитанный для реакции синтеза хлористого винила из разбавленного (7,7 об. %) ацетилена ^{а)}.

Давление, атм	Температура, °C	Равновесный состав, мол. %					Степень превращения C ₂ H ₂ в CH ₂ CHCl, %
		инертный газ	C ₂ H ₂	CH ₃ CHCl ₂	HCl	CH ₂ CHCl	
5	100	92,31	0,00	0,00	0,00	7,69	100
	200	92,26	0,06	0,00	0,06	7,63	99,22
10	100	92,31	0,00	0,00	0,00	7,69	100
	200	92,27	0,04	0,00	0,04	7,64	99,35

а) Данные Скушинского [1369].

Приведенные в таблицах данные позволяют сделать следующие выводы:

1) суммарная степень превращения ацетилена в хлористый винил несколько уменьшается с ростом температуры и очень мало зависит от повышения давления;

2) количество образующегося 1,1-дихлорэтана слабо возрастает с увеличением давления. Поэтому с термодинамической точки зрения синтез хлористого винила выгоднее проводить при низких давлениях и невысоких температурах. Хотя термодинамический анализ не позволяет сделать вывод о благоприятном влиянии давления на синтез хлористого винила, тем не менее, как показывает опыт, выход хлористого винила при добавлении требуемого количества катализатора почти пропорционально возрастает с увеличением давления при использовании как концентрированного, так и разбавленного ацетилена. Поэтому наиболее экономичные условия проведения процесса будут определяться стоимостью катализатора и производственными затратами на создание и эксплуатацию компрессорных установок.

Термодинамика синтеза метанола

Производство метанола из окиси углерода и водорода по реакции



осуществляется на многих заводах, однако опубликовано весьма мало данных о наилучших условиях этого синтеза *. В связи с этим

* Подробный обзор имеющихся литературных данных по термодинамическим параметрам синтеза метанола из CO и H₂ (g) можно найти в книге: А. А. Введенский, Термодинамические расчеты нефтехимических процессов, Гостоптехиздат, Л., 1960. — Прим. перев.

Томас и Портальский [1486] применили для нахождения оптимальных условий синтеза метанола термодинамический метод и определили влияние давления и температуры на энтальпию и химическое равновесие реакции (VII.10). Из уравнения состояния, записанного в виде

$$\left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T = V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P,$$

видно, что в случае идеального газа энтальпия реакции не зависит от давления. Следует, однако, отметить, что при повышенных давлениях смесь газов не будет вести себя как идеальная, поэтому давление будет влиять на энтальпию рассматриваемой реакции. Применение уравнения Бертло ко всем участникам реакции (VII.10), последующее суммирование и интегрирование окончательного выражения приводит к следующей зависимости изменения энтальпии реакции от давления при повышенных давлениях:

$$\Delta H = \Delta H_0 + \int_{P^0}^P \Delta V dP - T \int_{P^0}^P \left(\frac{\partial(\Delta V)}{\partial T}\right)_P dP.$$

Подстановка этой зависимости в уравнение Вант-Гоффа дает следующее выражение:

$$\frac{d \ln K_a}{dT} = \frac{\Delta H}{RT^2},$$

где K_a — константа равновесия, выраженная через активности. Активность каждого участника реакции (VII.10) может быть заменена летучестью f , которую в свою очередь можно представить как произведение парциального давления p и коэффициента летучести γ , так как $f = p\gamma$. Поскольку данные по летучести индивидуальных газов в газовых смесях не всегда имеются в литературе, летучесть компонента в смеси можно приближенно выразить с помощью соотношения $f \approx Nf'$, где f — летучесть компонента в смеси, а f' — летучесть чистого компонента при общем давлении P , $f' = P\gamma'$, а N — мольная доля компонента в газовой смеси. В таком случае

$$Kf' = \left(\frac{N_{\text{CH}_3\text{OH}}}{N_{\text{CO}} \cdot (N_{\text{H}_2})^2}\right) \left(\frac{\gamma'_{\text{CH}_3\text{OH}}}{\gamma'_{\text{CO}} \cdot (\gamma'_{\text{H}_2})^2}\right) P^{-2}, \quad (\text{VII.11})$$

где 2 — это изменение числа молей участвующих в реакции веществ, а

$$Kf' = \left(\frac{N_{\text{CH}_3\text{OH}}}{N_{\text{CO}} \cdot (N_{\text{H}_2})^2}\right) P^{-2}.$$

Определив значения γ' в выражении (VII.11) из диаграмм активности и летучести, построенных Ньютоном и Доджем [1063], нетрудно считать величины константы равновесия Kf' при высоких температурах

Таблица VII.15

Вычисленные значения степени равновесного превращения для реакции
 $\text{CO}(g) + 2\text{H}_2(g) = \text{CH}_3\text{OH}(g)^a$

P, атм	Мольная доля CH_3OH в равновесной реакционной смеси			
	$t = 200^\circ \text{C}$ ($\cdot 10^1$)	$t = 300^\circ \text{C}$ ($\cdot 10^2$)	$t = 400^\circ \text{C}$ ($\cdot 10^3$)	$t = 500^\circ \text{C}$ ($\cdot 10^4$)
100	1,2	1,4	5,5	4,8
200	1,8	2,0	6,9	5,6
300	2,4	2,9	8,3	6,8
400	2,9	3,8	10,8	7,9
500	3,4	4,8	12,8	8,9
600	3,8	5,9	15,1	10,2
700	4,2	6,9	17,2	11,4
800	4,5	7,7	19,3	12,5
900	—	8,8	21,8	13,6
1000	—	9,8	24,2	15,6

^{a)} Данные Томаса и Портальского [1486].

турах и давлениях. Найденные таким образом степени превращения для реакции (VII.10) приведены в табл. VII.15 и на рис. VII.11.

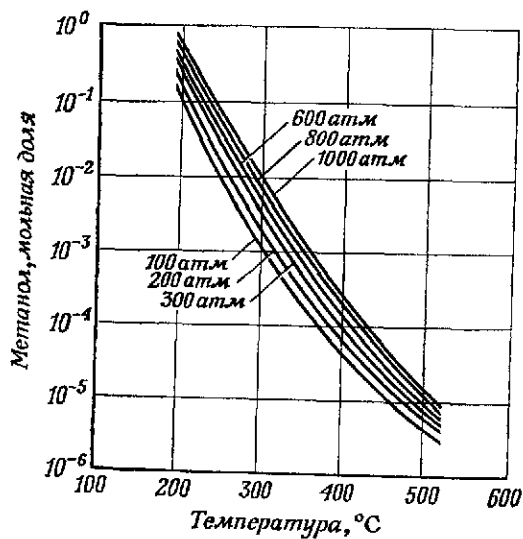


Рис. VII.11. Рассчитанное равновесное превращение окиси углерода и водорода в метанол.
 Данные Томаса и Портальского [1486].

Производство формальдегида из метанола

Джонс и Фаули [699] рассмотрели термодинамические аспекты производства формальдегида из метанола и в первую очередь проанализировали имеющиеся в литературе константы равновесия

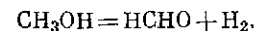
Таблица VII.16

Константы равновесия реакций пиролиза и окисления метанола ^{a)}

Газофазная химическая реакция	lg K				
	600° K	700° K	800° K	900° K	1000° K
(1) $\text{CH}_3\text{OH} = \text{HCHO} + \text{H}_2$	-1,22	-0,14	0,69	1,33	1,86
(2) $\text{HCHO} = \text{CO} + \text{H}_2$	5,16	5,34	5,48	5,62	5,70
(3) $\text{CH}_3\text{OH} + \frac{1}{2}\text{O}_2 = \text{HCHO} + \text{H}_2\text{O}$	17,41	15,44	13,98	12,83	11,92
(4) $\text{HCHO} + \frac{1}{2}\text{O}_2 = \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	23,79	20,92	18,77	17,12	15,76
(5) $\text{CO} + \frac{1}{2}\text{O}_2 = \text{CO}_2$	20,06	16,54	13,90	11,84	10,20

^{a)} Данные Джонса и Фаули [699].

реакций пиролиза и окисления метанола (табл. VII.16). На основании проведенного анализа авторы [699] показали, что первой стадией пиролиза метанола является реакция

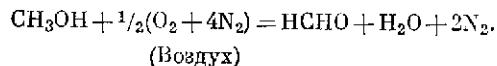


Состав равновесной газовой фазы этой реакции, представленный на рис. VII.12, можно рассчитать из данных, приведенных в табл. VII.16. Опыт показывает, что выход формальдегида в процессе дегидрирования метанола увеличивается с повышением температуры и оказывается практически полным при температуре около 1000° K или несколько выше. Однако Ньютон и Додж [1062] показали, что в интервале 390—470° K формальдегид каталитически гидрируется до метанола, т. е. рассматриваемая реакция обратима.

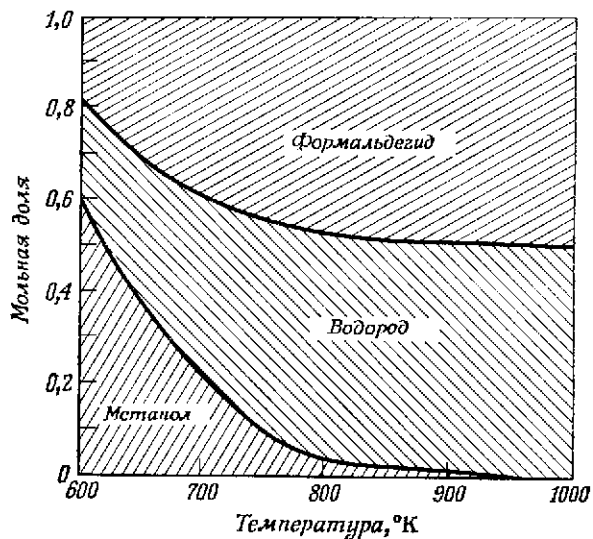
Вторая стадия пиролитического разложения метанола — реакция $\text{HCHO} = \text{CO} + \text{H}_2$. Однако, согласно данным, приведенным в табл. VII.16, константы равновесия этой реакции лежат в пределах от 10^5 до 10^6 , что указывает на практическую необратимость рассматриваемой реакции. Таким образом, формальдегид по мере образования по реакции (1) (табл. VII.16) сразу же начинает вступать в реакцию (2), в результате чего процесс дегидрирования метанола практически невыгоден для производства формальдегида.

Формальдегид обычно получают низкотемпературным каталитическим окислением метанола по реакции (3) (табл. VII.16) в таком интервале температур, при котором скорости реакций (4) и (5) пре-

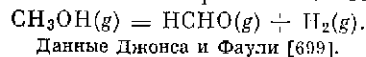
небрежимо малы. Поскольку пары чистого формальдегида начинают разлагаться при температуре около 573° К, эта температура является верхним пределом процесса окисления метанола. Известно, что воздух — весьма выгодный промышленный окислитель метанола, поэтому рассматриваемую реакцию запишем в виде



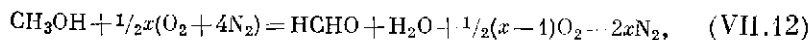
Взятая в таких пропорциях реакционная смесь взрывоопасна, однако при ее разбавлении дополнительным количеством воздуха температура протекания реакции будет ниже температуры распада, а концентрация реагирующей смеси окажется вне области концентраций,



Р и с. VII.12. Рассчитанный состав равновесной газовой фазы реакции



при которых происходит ее самопроизвольное воспламенение. Учитывая сказанное, приведенное уравнение реакции с учетом разбавления реагирующей смеси можно представить в виде



где x — количество воздуха, в два раза превышающее необходимое для протекания реакции. Данные по энтальпиям реакций и энтальпиям газов, которые следует учитывать при термодинамическом анализе синтеза формальдегида, приведены в табл. VII.17 и VII.18.

Таблица VII.17

Энтальпии при постоянном давлении для реакций, протекающих при синтезе формальдегида^{а)}

Газофазная реакция	Энтальпия реакции, ккал/моль					
	500° К	600° К	700° К	800° К	900° К	1000° К
(1) $\text{CH}_3\text{OH} = \text{HCHO} + \text{H}_2$	21,5	21,8	22,0	22,1	22,2	22,3
(2) $\text{HCHO} = \text{CO} + \text{H}_2$	2,2	2,6	2,8	3,0	3,1	3,1
(3) $\text{CH}_3\text{OH} + \frac{1}{2}\text{O}_2 = \text{HCHO} + \text{H}_2\text{O}$	-36,8	-36,7	-36,7	-36,8	-36,9	-36,9
(4) $\text{HCHO} + \frac{1}{2}\text{O}_2 = \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	-56,1	-55,9	-55,9	-55,9	-56,0	-56,1
(5) $\text{CO} + \frac{1}{2}\text{O}_2 = \text{CO}_2$	-67,80	-67,79	-67,76	-67,70	-67,64	-67,55

а) Данные Джонса и Фаули [699].

Таблица VII.18

Энтальпии газов, участвующих в реакциях, протекающих при синтезе формальдегида^{а)}

Газ	Энтальпия, ккал/моль							
	300° К	400° К	500° К	600° К	700° К	800° К	900° К	1000° К
Кислород	0,013	0,722	1,454	2,209	2,988	3,786	4,600	5,427
Водород	0,013	0,708	1,407	2,106	2,808	3,514	4,225	4,943
Азот	0,013	0,710	1,413	2,126	2,853	3,597	4,356	5,131
Пар	0,016	0,828	1,659	2,516	3,405	4,324	5,269	6,242
Окись углерода	0,014	0,712	1,418	2,138	2,874	3,628	4,399	5,185
Двуокись углерода	0,017	0,958	1,986	3,086	4,244	5,453	6,702	7,985
Метанол	0,021	1,181	2,541	4,081	5,771	7,631	9,621	11,711
Формальдегид	0,017	0,906	1,896	2,993	4,194	5,483	6,865	8,314

а) Данные Джонса и Фаули [699].

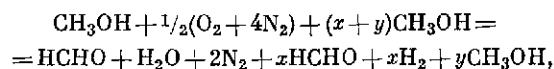
Используя эти данные, изменение энтальпии участников реакции (VII.12) в интервале температур от 298 до 573° К можно записать так:

$$3,665 + \frac{1}{2}x(1,995 + 4 \times 1,933) = 3,665 + 4,863x.$$

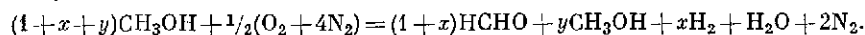
Приняв энтальпию реакции при 573° К равной 36,7 ккал/моль и приравняв ее к приведенному выражению, получим $x = 6,8$. Если сделанные предположения справедливы, то полученные для реакции (VII.12) данные показывают, что состав идеальной реагирующей смеси будет $[\text{CH}_3\text{OH} + 3,4(\text{O}_2 + 4\text{N}_2)]$, т. е. в воздухе должно содер-

жаться около 5,6% метанола. Если проводить синтез формальдегида при 673° К, то $x = 4,6$; в таком случае реагирующая смесь содержит 8,0% метанола. В патентах, выданных Крейве [294] на метод прямого окисления метанола, приведены рабочие температуры от 250 до 450° С при содержании метанола в воздухе 5—10%.

Как видно из табл. VII.17, реакции дегидрирования эндотермичны, а реакции окисления экзотермичны. Если соответствующим образом скомбинировать эти два типа реакций, то можно добиться равенства их энтальпий при некоторой температуре процесса. Осуществляемый по такому принципу технологический процесс обычно проводят при некоторой оптимальной температуре и контролируют его путем подачи реагирующих веществ, взятых в соответствующем соотношении. Из табл. VII.16 видно, что константа равновесия реакции окисления (3) в области рассматриваемых температур имеет значение порядка 10^{11} — 10^{17} . Это указывает на полноту протекания реакции окисления в сложном процессе производства формальдегида и на ее необратимость в области рассмотренных температур. Однако ввиду того, что константа равновесия реакции дегидрирования (1), приведенная в табл. VII.16, имеет значения от 10^{-1} до 10^2 , при всех температурах процесса в состоянии термодинамического равновесия в газовой фазе вместе с избытком метанола будут находиться продукты этой реакции: метанол, формальдегид, водяной пар, водород и азот. Если отношение количества формальдегида к избытку метанола в продуктах выразить через $(1+x)/y$, то суммарный процесс синтеза можно представить в виде реакции



которую в общем виде можно записать следующим образом:



В табл. VII.16 приведены значения константы равновесия как функции от температуры для реакции дегидрирования (1). Записав константу равновесия реакции (1)

$$K = \frac{N_{\text{H}_2} N_{\text{HCHO}}}{N_{\text{CH}_3\text{OH}}} P_{\text{tot}} = \frac{x(1+x)}{y(4+2x+y)} P_{\text{tot}},$$

получим связь между величинами x и y . Приравняв энтальпии участников рассматриваемой реакции (табл. VII.18) к изменению энтальпии этой же реакции при температурах, указанных в табл. VII.17, нетрудно получить другое соотношение, связывающее x и y . Таким образом, x и y можно рассчитать при любой температуре и определить выход формальдегида при различных температурах и составах газовой смеси.

Управление режимом сложного процесса требует более высоких концентраций метанола, т. е. такого условия, которое может быть

достигнуто путем перегрева реагирующих газов до температуры 383° К. Полагая, что реакция протекает при температуре 1000° К и давлении 1 атм, получим

$$K = \frac{x(1+x)}{y(4+2x+y)} = 10^{1,86} = 72,4. \quad (\text{VII.13})$$

Энтальпия реагирующих веществ в интервале от 383 до 1000° К будет равна сумме энтальпий реакций окисления и дегидрирования при 1000° К. Используя данные по энтальпиям, приведенные в табл. VII.18, находим

$$36,9 - 22,3x = (1+x+y) 10,73 + \frac{1}{2}(4,825) + 2(4,539),$$

откуда

$$y = 1,369 - 3,078x. \quad (\text{VII.14})$$

Совместное решение уравнений (VII.13) и (VII.14) дает $x = 0,443$ и $y = 0,004$. Следовательно, суммарную реакцию, протекающую при 1000° К, можно записать в виде



Результаты аналогичных расчетов для других температур приведены в табл. VII.19. Анализируя эти данные, можно отметить несколько

Таблица VII.19

Влияние температуры на состав при газозафазном синтезе формальдегида по реакции (VII.12) а)

T, °K	x	y	Реагенты				Продукты					
			моли		%	моли					%	
			CH ₃ OH	воздух б)		HCHO	CH ₃ OH	H ₂	H ₂ O	N ₂		HCHO
600	0,83	2,92	4,75	2,50		65,5	1,83	2,92	0,83	1,00	2,00	21,3
700	0,92	0,35	2,27	2,50		47,6	1,92	0,35	0,92	1,00	2,00	31,0
800	0,77	0,051	1,82	2,50		42,2	1,77	0,051	0,77	1,00	2,00	31,7
900	0,61	0,004	1,61	2,50		39,2	1,61	0,004	0,61	1,00	2,00	30,8
1000	0,44	0,004	1,45	2,50		36,7	1,44	0,004	0,44	1,00	2,00	29,5
600	0,78	2,73	4,51	2,50	1,00	56,3	1,78	2,73	0,78	2,00	2,00	19,2
700	0,83	0,285	2,11	2,50	1,00	37,6	1,83	0,285	0,83	2,00	2,00	26,3
800	0,65	0,020	1,67	2,50	1,00	32,3	1,65	0,020	0,65	2,00	2,00	26,1
900	0,46	0,008	1,46	2,50	1,00	29,5	1,46	0,008	0,46	2,00	2,00	24,6
1000	0,22	0,003	1,22	2,50	1,00	25,9	1,22	0,003	0,22	2,00	2,00	22,4

а) Данные Джонса и Фаули [899].

б) 1 моль воздуха = 0,2 (O₂ + 4N₂)

интересных особенностей. Так, при высоких температурах требуется меньшее количество участвующего в реакции метанола. Согласно Уайту [1604], верхний предел воспламенения метанола в воздухе составляет около 36,5%, что указывает на взрывоопасность реакционной смеси выше 1000° К. Таким образом, условия проведения реакции выше этой температуры неблагоприятны. Из последней графы табл. VII.19 видно, что наибольшее количество формальдегида образуется при температурах около 750° К из смеси, содержащей 45% метанола и 55% воздуха, в то же время максимальная степень превращения метанола в формальдегид может быть достигнута при температуре около 1000° К в смеси 37% метанола и 63% воздуха. Отсюда следует, что оптимальные условия проведения этого процесса лежат в области между указанными двумя пределами.

Подача пара — удобный способ подогрева реакционной смеси, хотя в этом процессе пар является продуктом реакции. Добавление пара к реакционной смеси приводит к новым уравнениям баланса типа (VII.13) и (VII.14), цифровое решение которых дано в нижней части табл. VII.19. Использование пара снижает температуру суммарной реакции, т. е. вызывает эффект, который наблюдался бы при разбавлении. Следует отметить, что, хотя с помощью пара удается регулировать температуру процесса, это не повышает выхода желаемого продукта.

Производство уксусной кислоты

При осуществлении синтеза жидких топлив из водяного газа Фишер [427] среди продуктов каталитических реакций обнаружил уксусную кислоту и метанол. Харди [570], исследовав несколько позднее каталитическое взаимодействие окиси углерода и метанола, пришел к выводу, что образование уксусной кислоты по реакции



при комнатной температуре является экзотермическим процессом. Харди провел термодинамический анализ этой реакции и показал, что при давлении 1 атм до температуры около 643° К в состоянии равновесия образуется значительное количество уксусной кислоты; при увеличении давления от 1 до 50 атм при 600° К выход уксусной кислоты уменьшается с 25 до 4%. Харди изучил влияние температуры (до 643° К), давления (до 200 атм), скорости газового потока над катализатором и количества катализатора на выход уксусной кислоты. Полученные им зависимости выхода уксусной кислоты от температуры и давления приведены на рис. VII.13 и VII.14. Помимо уксусной кислоты, в продуктах реакции был найден ряд других органических соединений, что указывает на протекание побочных реакций.

Примерно в то же время Синг и Крейзе [1352] изучили парофазный каталитический синтез уксусной кислоты из метанола и окиси углерода под давлением. Эти авторы указали на отсутствие достаточно

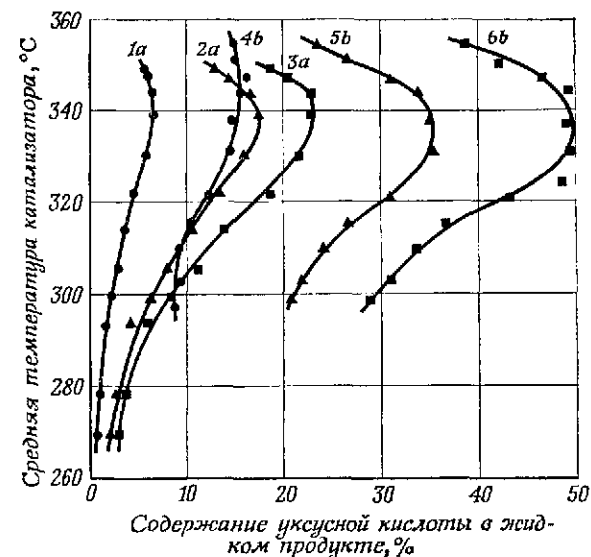


Рис. VII.13. Влияние температуры катализатора на выход уксусной кислоты.

По данным Харди [570]
● несвязанная уксусная кислота, ▲ связанная уксусная кислота, ■ общее количество уксусной кислоты.

точных термодинамических данных для уксусной кислоты и ее смесей. Используя в расчете приближенные данные, Синг и Крейзе

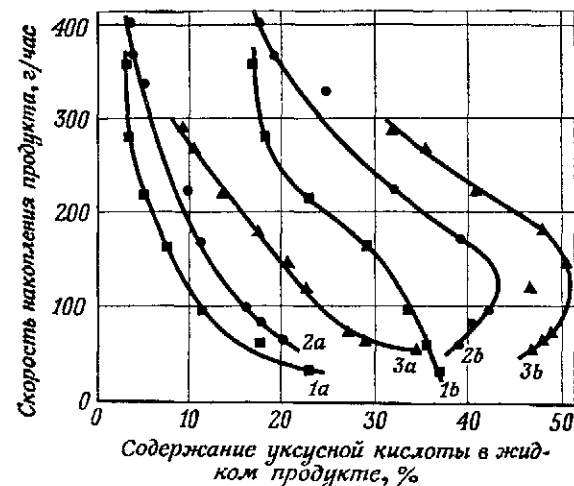
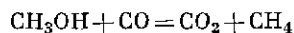
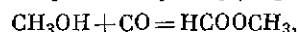


Рис. VII.14. Влияние давления на выход уксусной кислоты.

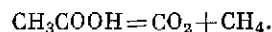
По данным Харди [570].
a — несвязанная уксусная кислота, b — общее количество уксусной кислоты
■ 100 атм, ● 150 атм, ▲ 200 атм.

[1352] пришли к выводу, что реакция (VII.15) экзотермична и протекает с выделением тепла (от 20 до 30 ккал). На основании полу-

ченых результатов Синг и Крейзе отмечают, что в интервале температур от 300 до 500° С даже при давлениях ниже 300 атм в равновесной газовой фазе образуется значительное количество уксусной кислоты. Синг и Крейзе изучили влияние температуры (до 500° С), давления (до 280 атм), объемной скорости над катализатором, относительных количеств реагирующих веществ и рециркуляции побочных продуктов на выход уксусной кислоты. Авторы показали, что определенные экспериментально побочные продукты могут образоваться в результате следующих реакций:



или

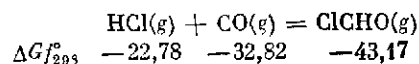


Условия процесса получения уксусной кислоты можно подобрать таким образом, что нерастворимые в воде масла не будут получаться, а образующиеся побочные продукты будут полностью превращаться в уксусную кислоту.

Кутепов, Химмель и Хюеншутц [818] опубликовали некоторые параметры технологического процесса получения уксусной кислоты непрерывным методом в жидкой фазе при давлении около 100 атм и 300° С в присутствии карбонилиодида кобальта в качестве катализатора; метод применен на заводе производительностью 1000 т в месяц. При таком способе получения на каждые 100 кг $\text{C}_2\text{H}_5\text{COOH}$ (чистота более 99,8%) образуется около 4 кг побочных продуктов; половине из них составляет пропионовая кислота, остальное — этилацетат, бутилацетат и 2-этилбутаналь. Энтальпия реакции промышленного синтеза уксусной кислоты на этом заводе равна $-29,03$ ккал/моль (считая на уксусную кислоту). Заводы по синтезу уксусной кислоты и ее очистке полностью автоматизированы.

Реакция Гаттермана — Коха

Дилке и Элей [328] исследовали термодинамические параметры реакции Гаттермана — Коха. Эта реакция относится к такому классу превращений, в результате которых группа $-\text{CHO}$ с помощью катализаторов типа $(\text{HCl} + \text{AlCl}_3)$ вводится в молекулы ароматических соединений. Некоторые исследователи предполагали, что хлористый формил, хотя его и не удалось выделить, представляет собой промежуточное соединение. Используя данные по изменениям энергии Гиббса для уксусной кислоты, хлористого ацетила и муравьиной кислоты, нетрудно вычислить значение ΔG_{298}° $\text{ClCHO}(g)$, равное $-43,17$ ккал/моль. Отсюда для реакции

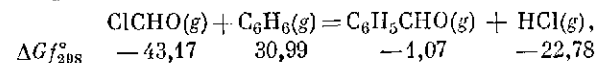


получим

$$\Delta Gr_{298}^\circ = 12,43 \text{ ккал/моль.}$$

Как видно из приведенных данных, положительное значение ΔG_{298}° этой реакции свидетельствует о том, что хлористый формил нельзя получить таким способом.

Записав вторую стадию реакции

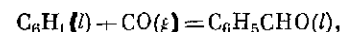


находим

$$\Delta Gr_{298}^\circ = -11,67 \text{ ккал/моль.}$$

Отрицательное значение ΔGr_{298}° этой стадии свидетельствует о том, что хлористый формил способен реагировать с бензолом с образованием бензальдегида и хлористого водорода.

В связи с трудностью получения хлористого формила (хотя он известен и может быть выделен) Дилке и Элей [328] провели термодинамический анализ реакции образования каталитического комплекса. Используя данные в расчете термодинамические свойства веществ, участвующих в реакции



приведены в табл. VII.20. Из этих данных нетрудно рассчитать изменения энтальпии, энтропии и теплоемкости вышеприведенной

Таблица VII.20*

Термодинамические свойства бензола, окиси углерода и бензальдегида^{a)}

Соединение	ΔH_{298}° б)	Литература	ΔH_{298}° б)	S_{298}° в)	Литература	C_p° 298	Литература
Бензол (l)	-781,0	[1194]	11,737	41,5	[1477]	31,9	[1577]
Окись углерода (g)	-67,6	[1244]	-26,452	47,3	[1244]	7,0	[1577]
Бензальдегид (l)	-841,3	[744]	-22,015	57,4 г)	[1105]	45,4	[1577]

а) Данные Дилке и Элей [328].

б) В ккал/моль.

в) В кал/(моль·°К).

г) Рассчитано из данных, приведенных в работе [1105].

реакции: $\Delta H_{298}^\circ = -7,3$ ккал/моль, $\Delta S_{298}^\circ = -31,4$ кал/(моль·°К) и $\Delta C_p^\circ = 6,5$ кал/(моль·°К). В табл. VII.21 приведены рассчитан-

ные из этих данных по формуле

$$-RT \ln K = \Delta G_T^\circ = \Delta H_{298}^\circ - T\Delta S_{298}^\circ + \Delta C_p(T - 298) - T\Delta C_p \ln \frac{T}{298}$$

величины изменения энергии Гиббса и константы равновесия рассматриваемой реакции при разных температурах. Из данных табл. VII.21 следует, что выход бензальдегида при комнатной тем-

Таблица VII.21

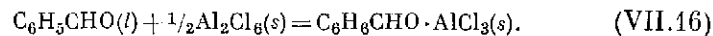
Термодинамические параметры реакции
 $C_6H_6(l) + CO(g) = C_6H_5CHO(l)$ а)

T, °K	ΔG° , ккал	K ($\cdot 10^3$)
298	2,06	31,6
323	2,83	12,6
373	4,35	2,9

а) Данные Дилке и Элея [328], рассчитано из данных табл. VII.20.

пературе составляет около 2% (в расчете на бензол) и уменьшается с увеличением температуры. Поскольку рассчитанные значения K очень чувствительны к небольшим изменениям ΔH_f , погрешность в определении энтальпии образования бензальдегида в значительной степени затрудняет детальное сравнение этих величин.

Пытаясь выяснить роль промежуточного комплекса, Дилке и Элей [328] определили изменение энергии Гиббса процесса образования смеси бензальдегида с некоторыми галогенидами, катализирующими эту реакцию. Для этой цели авторы провели две серии измерений: а) калориметрическое определение энтальпии смешения твердой катализирующей соли галогеноводородной кислоты с жидким бензальдегидом, т. е. энтальпии образования комплекса, например, по реакции (VII.16), и б) измерение концентрации частиц, находящихся в равновесии и определяющих константу равновесия K каждой реакции, для которой, как указывалось выше, определяли энтальпии смешения, например



Эти данные, приведенные в табл. VII.22, показывают, что изменения энтальпии, энергии Гиббса (или констант равновесия) и энтропии рассмотренных реакций позволяют расположить катализаторы в такой же последовательности, которая соответствует их каталитической активности в однотипных реакциях. Единственное исклю-

Таблица VII.22

Термодинамический порядок активности катализатора
 в реакции (VII.16) при 298° K а)

Комплекс	ΔH_f° , ккал/моль	K	ΔC° , ккал/моль	ΔS° , кал/(моль °K)
$(C_6H_5 \cdot CPO)_2 \cdot SnCl_4$	-28,0	$3,6 \cdot 10^5$	-7,6	-68
$C_6H_5 \cdot CPO \cdot AlCl_3$	-24,7	60	-2,4	-75
$C_6H_5 \cdot CPO \cdot FeCl_3$	-12,8	30	-2,0	-36
$C_6H_5 \cdot CPO \cdot SbCl_3$	-3,9	9	-1,3	-9

а) Данные Дилке и Элея [328].

чение — это изменение энтропии хлористого алюминия. В этом случае аномальную величину ΔS° реакции (VII.16) нетрудно объяснить, если учесть возможность участия хлористого алюминия в равновесии реакции диссоциации: $Al_2Cl_6 = 2AlCl_3$. Из полученных данных видно, что образование промежуточного комплекса приводит к таким изменениям энергии Гиббса, которые благоприятствуют протеканию реакции Гаттермана — Коха.

Таким образом, данные, приведенные в этом разделе, показывают необходимость дальнейшего термодинамического исследования роли катализатора в подобных процессах.

Использование термодинамики при подборе катализаторов

Отсутствие достаточно полной общей теории гетерогенного катализа не позволяет в настоящее время осуществить подбор катализатора на основании только теоретических представлений. Тем не менее термодинамические характеристики каталитически активных веществ и катализируемых реакций могут оказаться полезными при выборе соответствующих катализаторов. Поскольку химические силы действуют между реагирующими веществами и катализатором, последний должен обладать определенным химическим средством по крайней мере к одному из участников реакции. Поэтому при подборе катализатора можно сразу исключить из рассмотрения вещества, химически инертные к данной системе. Взаимодействие катализатора с реагирующими веществами должно характеризоваться менее отрицательными значениями изменения энергии Гиббса по сравнению с изменением энергии Гиббса катализируемой реакции. При подборе катализаторов этот критерий позволяет исключить из рассмотрения те вещества, которые образуют устойчивые соеди-

нения с реагирующими веществами. В связи с вышесказанным кажутся весьма необходимыми поиски такой взаимосвязи между термодинамическими и каталитическими свойствами соединений, которая показывала бы целесообразность использования данного вещества как катализатора в рассматриваемой реакции. Попытки использовать термодинамические данные при подборе катализаторов были сделаны в работах Шваба [1293], Франкенбурга [438], Бика [97], Курина и Захарова [815], Кульковой и Темкина [813], а также в обзорной работе Голодеца и Ройтера [506] *.

Пример, иллюстрирующий применение величин изменения энергии Гиббса реакции для выбора катализатора, приведен на рис. VII.15.

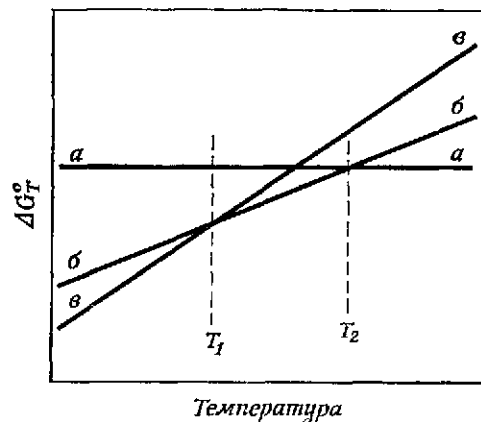


Рис. VII.15. Зависимость изменения энергии Гиббса от температуры для процесса образования промежуточных соединений с катализаторами.

a — температурная зависимость $1/2 \Delta Gr^\circ$ для всей реакции, *б* и *в* — температурные зависимости ΔGr° образования гипотетических промежуточных соединений с катализаторами В и С соответственно. Данные Голодеца и Ройтера [506].

Прямая *a* соответствует температурной зависимости $1/2 \Delta Gr^\circ$ некоторой суммарной реакции, прямые *б* и *в* отвечают температурной зависимости ΔGr° предполагаемых промежуточных стадий этой реакции, протекающих с участием катализаторов В и С соответственно. Диаграмма, приведенная на рис. VII.15, соответствует большей активности катализатора В в интервале температур ниже T_1 и выше T_2 ; катализатор С более активен в интервале температур $T_1 - T_2$. Если структура промежуточных продуктов реакции приводит к изменению энтропии, примерно равному нулю, то, соглас-

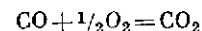
* Значительный вклад в теорию и практику рационального подбора катализаторов был сделан А. А. Баландиным и его учениками на основе принципов структурного и энергетического соответствия. Эти принципы, положенные в основу мультиплетной теории катализа, позволили систематизировать большой экспериментальный материал, накопленный в гетерогенном органическом катализе, и предсказать каталитическую активность большого числа соединений и элементов. См., например, А. А. Баландин, Мультиплетная теория катализа, ч. I (1963), часть II (1964), Изд-во МГУ, М.; А. А. Баландин, Современное состояние мультиплетной теории гетерогенного катализа, изд-во «Наука», М. (1968). — Прим. перев.

но соотношению

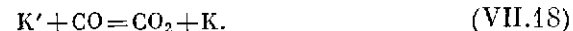
$$\Delta Gr^\circ = \Delta Hr^\circ - T \Delta S_r^\circ,$$

изменение энтальпии такой реакции также можно рассматривать как весьма надежный показатель каталитической активности.

Максима, Йонеда и Сайто [915] на ряде примеров подтвердили принцип энергетического соответствия в катализе, показав, что наиболее подходящими катализаторами оказываются такие вещества, для которых изменение энтальпии в процессе образования промежуточного комплекса с участниками катализируемой реакции примерно в два раза меньше изменения энтальпии самой реакции *. В качестве примера рассмотрим реакцию окисления



и предположим, что действие катализатора К описывается двумя стадиями:



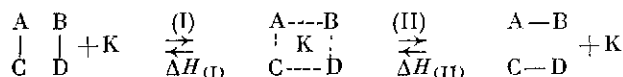
В этом случае самым активным катализатором будет тот, который обеспечивает наиболее равное распределение изменения энергии Гиббса между двумя промежуточными реакциями (VII.17) и (VII.18). Этим требованиям удовлетворяют, например, соединения CuO и Cu_2O , которые в действительности являются эффективными катализаторами рассматриваемой реакции окисления.

Фаренфорт, Рейен и Захтлер [403] изучили каталитический распад муравьиной кислоты над различными металлами и обнаружили линейную зависимость энтальпии образования формиата металла, отнесенной к грамм-эквиваленту этого соединения, взятого в большом объеме, от температуры T_r , при которой скорость катализируемого распада достигает определенного значения r . Из этих данных, приведенных на рис. VII.16, видно, что для формиата металла оптимальное значение энтальпии образования на грамм-эквивалент примерно равно 80 ккал. При этом значении каталитическая активность металла максимальна, о чем можно судить по низким температурам, которые необходимы для достижения данной скорости.

Согласно мультиплетной теории катализа, на поверхности катализатора образуется промежуточное соединение. Для реакции,

* Принцип энергетического соответствия, сформулированный А. А. Баландиным, при подборе активного катализатора для эндотермической реакции требует, чтобы адсорбционный потенциал катализатора (сумма энергий связи атомов в молекуле, соприкасающейся с активными центрами катализатора) был бы по возможности ближе к половине суммы энергий реагирующих связей — среднему из энергий разрываемых и вновь возникающих связей. См.: А. А. Баландин, Современное состояние мультиплетной теории гетерогенного катализа, изд-во «Наука», М., 1968. — Прим. перев.

протекающей по дублетному механизму, имеем



Стадия I отвечает образованию промежуточного соединения реагирующих веществ на поверхности катализатора К, а стадия II — распаду образовавшегося промежуточного соединения на продукты реакции. Баландин [66], исходя из теоретических предпосылок,

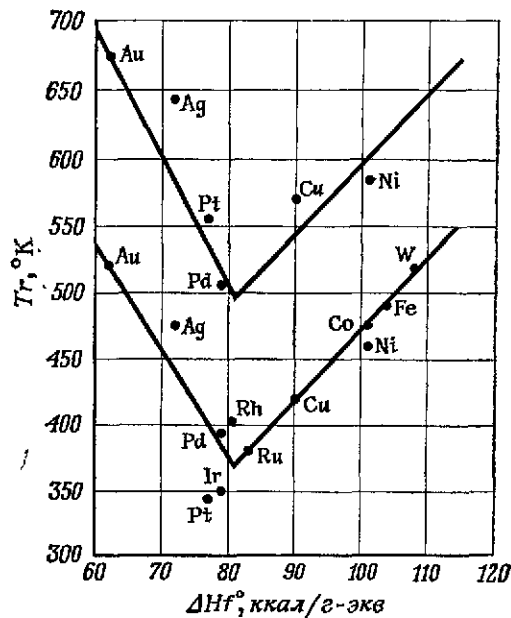
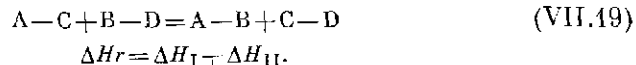


Рис. VII.16. Связь между энтальпиями образования, отнесенными к грамм-эквиваленту формата металла, и каталитической активностью металлов в процессе разложения муравьиной кислоты.

Точки верхней кривой получены для значения $Inr = 1.0$, точки нижней кривой — для значения Inr , равного 0.8. Данные Фаренфорта, Рейсена и Захтлера [403]

показал, что в этом случае для оптимального протекания каталитического процесса энтальпия первой стадии реакции (ΔH_I) должна быть равна энтальпии второй стадии реакции (ΔH_{II}), а значение энтальпии всей реакции (VII.19) должно равняться сумме энтальпий первой и второй стадии:



Принцип энергетического соответствия можно распространить на любой каталитический процесс, протекающий в несколько стадий. Кроме того, этот принцип позволяет выбрать наиболее благоприятный путь взаимодействия, для которого термические эффекты всех стадий процесса примерно равны. Следует отметить, что такое рассмотрение каталитических реакций влечет за собой выбор соот-

ветствующих термодинамических функций, связанных с каталитической активностью и другими подходящими критериями для каждой стадии реакции. Однако часто оказывается недостаточно рассматривать только термодинамические аспекты этой проблемы. Во многих случаях большее значение имеют кинетические факторы, такие, как образование электронных связей или соответствие атомной структуры катализатора геометрическим параметрам молекул реагирующих веществ и продуктов реакции. Подобные факторы позволяют объяснить зависимость каталитической активности катализатора от способа его получения, различную каталитическую активность граней монокристаллов, а также роль активаторов и модификаторов и позволяют проверить, являются ли вещества, выбранные в качестве катализаторов на основании термодинамического анализа, эффективными катализаторами реальных процессов.

Термические и термохимические свойства веществ в состоянии идеального газа при температурах от 298 до 1000° К

Глава VIII

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СИМВОЛЫ, КОНСТАНТЫ, МЕТОДЫ РАСЧЕТА, ДАННЫЕ ДЛЯ ПРОСТЫХ ВЕЩЕСТВ И НЕКОТОРЫХ НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Практическое применение термодинамики требует последовательного использования определенной системы обозначений и одних и тех же численных значений постоянных. Это особенно важно в связи с тем, что расчеты термодинамических свойств соединений основываются на соответствующих данных для химических элементов. Вот почему в начале этой главы описана система обозначений, приведены численные значения постоянных и определены стандартные состояния для ряда элементов (все это использовано при составлении таблиц, помещенных в последующих главах). Рассмотрен метод расчета табличных данных и приведены таблицы для ряда неорганических соединений, часто используемых в органической химии.

Определение термодинамических символов

Путаница в обозначениях термодинамических функций, отмечавшаяся еще в 1932 г. Парксом и Хаффманом [1105], сохранилась и по сей день. Очень жаль, что в американской и европейской химической литературе существуют расхождения в отношении функции, известной в США как свободная энергия, а в Европе как свободная энтальпия и обозначаемой соответственно F и G . Питцер и Брюер [861] предложили принять символ G и называть эту функцию энергией Гиббса. Такая же рекомендация была сделана Комиссией по символам и номенклатуре физико-химической секции Международного союза чистой и прикладной химии [1656]. Будучи твердо уверенными в том, что все последующие сводки термодинамических данных будут основываться на вышеуказанных рекомендациях, мы приняли эту терминологию. Остальные символы не столь противоречивы; важнейшие из них перечислены ниже (более полный перечень дан в приложении 1):

E — энергия (внутренняя),

H — энтальпия ($H = E + PV$),

G — энергия Гиббса ($G = H - TS$),

C_p — теплоемкость при постоянном давлении.

В книге приводятся мольные величины; исключения оговорены.

Знак градуса в верхнем индексе ($^\circ$) того или иного термодинамического символа означает, что указанная величина относится к стандартному состоянию. В качестве стандартного состояния для газов нами принято состояние идеального газа при давлении 1 атм, а для конденсированных фаз — состояние чистого вещества в виде жидкости или твердого тела при давлении 1 атм. Так, например, ΔH_v обозначает энтальпию процесса превращения жидкой фазы в реальный газ при давлении насыщенного пара, тогда как ΔH_v° означает энтальпию процесса превращения чистой жидкости в идеальный газ при давлении 1 атм.

Курсивными строчными буквами f, t, m, v, s, c, r при символах термодинамических свойств обозначены соответственно процессы: образование из элементов (f), полиморфное превращение (переход) в твердом состоянии (t), плавление (m), испарение (превращение жидкости в пар) (v), сублимация (превращение твердой фазы в пар) (s), сгорание (c) и протекание реакции (r).

Числами в индексах (например, 298,15 или 0) обозначена абсолютная температура ($^\circ\text{K}$). Во всех таблицах и в тексте индексом 298 обозначена температура, равная 298,15° К.

$H_T - H_{298}^\circ$ — разность между энтальпией в стандартном состоянии при температуре T и энтальпией в стандартном состоянии при температуре 298,15° К.

$(G_T^\circ - H_{298}^\circ)/T$ — приведенная функция энергии Гиббса. Определение ее дается уравнением (V.22), согласно которому она равна $(H_T - H_{298}^\circ)/T - S_T^\circ$. Значения этой функции приведены в таблицах наряду с собственными значениями энергии Гиббса, причем интерполяция функции облегчена, поскольку ее зависимость от температуры не столь сильная и по характеру приближается к линейной.

S° — «практическая» энтропия в стандартном состоянии при указанной температуре без учета вклада от изотопного смешения и ядерных спинов.

Δ обозначает изменение данного свойства для процесса или реакции. Это разность между значением той или иной функции для конечного состояния и соответствующим значением для исходного состояния. Например, ΔH_f — энтальпия образования — изменение энтальпии при химической реакции образования данного соединения из элементов, входящих в это соединение, причем каждое вещество должно быть в определенном термодинамическом состоянии при данной температуре. В то же время ΔH_f° — стандартная энтальпия образования — изменение энтальпии, относящееся к той же реакции, причем каждое вещество должно находиться в стандартном состоянии при данной температуре.

K_p — константа равновесия для данного процесса или реакции, выраженная через парциальные давления. Для схематически записанной реакции $cC + dD \rightleftharpoons mM + nN$ константа равновесия K дается соотношением

$$K = \frac{(a_M)^m (a_N)^n}{(a_C)^c (a_D)^d},$$

где a_i — активность i -го вещества. Для чистой конденсированной фазы эта активность может быть принята за единицу; для газа активность может быть приравнена летучести. В случае идеального газа летучесть равна давлению; для реального газа при относительно низких давлениях и при обычной или более высоких температурах давление приблизительно равно летучести; следовательно, при этих условиях

$$K \approx K_p = \frac{(P_M)^m (P_N)^n}{(P_C)^c (P_D)^d}.$$

На основании уравнения (V.11) можно записать следующее соотношение между логарифмом константы равновесия и энергией Гиббса:

$$\lg K_p = -\frac{\Delta G_r^\circ}{2,302585RT}.$$

$\lg K_p$ — десятичный логарифм константы равновесия (выраженной через давления) реакции образования 1 моля веществ из элементов, причем каждое из участвующих в реакции веществ должно находиться в стандартном состоянии при данной температуре. В этом случае логарифм константы равновесия можно следующим образом выразить через стандартную энергию образования Гиббса:

$$\lg K_p = -\frac{\Delta G_f^\circ}{2,302585RT}.$$

ΔH_m и ΔS_m — изменение энтальпии и энтропии в процессе плавления; при этом предполагается, что каждое вещество должно находиться в определенном термодинамическом состоянии, обычно при давлении насыщенного пара. Поскольку в данных процессах участвуют вещества только в конденсированной фазе, различия между изменениями стандартных величин энтальпии и энтропии ΔH_m° и ΔS_m° и соответствующими изменениями величин ΔH_m и ΔS_m незначительны, за исключением процессов, протекающих при высоких давлениях. Для чистых веществ в жидком и твердом состояниях влияние средних давлений на термодинамические свойства почти всегда пренебрежимо мало. Так, например, теплоемкость при низких температурах того или иного соединения обычно определяют при давлении насыщенного пара плюс зависящее от температуры давление гелия, вводимого для ускорения достижения теплового равновесия,

при этом результаты оказываются в пределах точности экспериментальных измерений теплоемкости при постоянном давлении, равном 1 атм. Однако существенная зависимость между температурой плавления и давлением вызывает необходимость принятия специального символа Ttp для часто встречающегося случая тройных точек, так называемых «точек плавления», измеряемых при давлении насыщенного пара данного соединения.

ΔH_v и ΔS_v — изменения энтальпии и энтропии в процессе испарения жидкости и газа при определенном давлении (чаще всего используются значения давлений насыщенного пара). Обычно различия между ΔH_v (при нормальной точке кипения) и ΔH_v° небольшая, но бывает и значительной для некоторых паров, состоящих из ассоциированных частиц, как это показано на примерах, рассмотренных в предшествующей главе. Энтропия газа, конечно, сильно зависит от давления. Даже при давлении 1 атм часто наблюдается значительное расхождение между данными, относящимися к состояниям реального и идеального газа, особенно когда существует тенденция к ассоциации или диссоциации. Следовательно, можно ожидать различия между значениями ΔS_v и ΔS_v° как в результате того, что давление насыщенного пара не равно 1 атм, так и в результате неидеальности газа.

ΔH_s и ΔS_s — изменения энтальпии и энтропии для процесса сублимации (т. е. процесса превращения твердой фазы в газообразную). Соотношение между этими величинами и стандартными аналогично соответствующей взаимосвязи для процесса испарения.

ΔH_c° — изменение энтальпии для реакции сгорания определенного вещества в газообразном кислороде с образованием продуктов сгорания при постоянной температуре и давлении, причем все реагенты и продукты реакции должны находиться в их стандартных состояниях.

ΔH_r — изменение энтальпии для реакции, особенности которой должны быть указаны в тексте. Часто это изменение энтальпии называется «теплотой реакции».

Температуры, даваемые в градусах Цельсия ($^\circ\text{C}$) в экспериментальных работах и соответствующие международной температурной шкале [183, 1034, 1423], пересчитаны в градусы Кельвина ($^\circ\text{K}$) по формуле $^\circ\text{K} = 273,15 + ^\circ\text{C}$. Отличие международной шкалы от термодинамической описано Мюллером [1034] и Стимсоном [1423].

Константы

Данная работа не преследовала цели пересчета упоминающихся в литературе термодинамических функций на основании современных значений констант. К счастью, изменения важнейших констант в этом отношении были незначительными. В тех случаях, когда термодинамические функции рассчитывались непосредственно, исполь-

зовались константы, отобранные Козлом, Кроу и Дюмондом [240]. Как неоднократно указывалось в тексте, точка плавления льда была принята равной $273,15^\circ \text{K}$. Это изменение может затронуть только наиболее тщательно выполненные работы по определению точек плавления и кипения. Перечень основных констант и их значения, использованные в расчетах, приведены в табл. VIII.1.

Физические константы
Таблица VIII.1

Название	Значение	Размерность
<i>Основные константы</i>		
Скорость света в вакууме	$2,997930 \cdot 10^{10}$	см/сек
Постоянная Планка	$6,62517 \cdot 10^{-27}$	эрг·сек
Число Авогадро	$6,02338 \cdot 10^{23}$	моль ⁻¹
Абсолютная температура плавления льда (0°C)	273,1500	$^\circ \text{K}$
Мольный объем идеального газа	22414,6	см ³ /моль
Произведение давления на объем для 1 моля газа при 0°C и нулевом давлении	2271,16	абс. дж/моль
<i>Производные константы</i>		
Заряд электрона	$1,601886 \cdot 10^{-19}$	абс. кулон
Газовая постоянная	8,31469	абс. дж/(моль· $^\circ \text{K}$)
	1,98726	кал/(моль· $^\circ \text{K}$)
Постоянная Больцмана	$1,380403 \cdot 10^{-16}$	эрг/(молекула· $^\circ \text{K}$)
<i>Константы по определению</i>		
Стандартная гравитация	980,665	см/сек ²
Стандартная атмосфера	1 013 250	дн/см ²
	760	мм рт. ст. (при $298,15^\circ \text{K}$ на уровне моря на широте 45°)
Калория (термохимическая)	4,1840	абс. дж.
	4,1833	межд. дж.

Расчеты производились по атомным весам 1957 г. [1609]; исключение составляет углерод, для которого сохранено значение 12,010. Поставленная временем задача пересчета всех значений энтальпий сгорания и термодинамических функций на основании последней величины, равной 12,01115, не была выполнена, поскольку это дает лишь незначительное повышение точности. Кроме того, представлялось важным сохранить приемственность изложения,

поскольку большинство литературных данных, включая весьма подробные таблицы Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе [1249], а также Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248] и дополнительные материалы [1653], были составлены на основе значения 12,010; сохранение этого значения облегчает сопоставление данных.

При установлении энтальпий образования использовались современные значения для CO_2 и H_2O , отобранные Вагманом, Килпатриком, Тейлором, Питцером и Россини [1562]. В связи с этим интересно отметить, что последние работы по определению энтальпии сгорания графита выявили значительное влияние метода приготовления графита [858]. Этот факт может иметь большое значение в случае реакций с участием углерода как продукта реакции или реагента, например при пиролизе углеводородов.

Энтальпии сгорания хлорсодержащих соединений обычно относят к конечному состоянию водной соляной кислоты. В книге в качестве энтальпии образования HCl (в 600 частях H_2O) принята величина, использованная в таблицах Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе [1249]. Соединения серы, как правило, относят к конечному состоянию водного раствора серной кислоты. Величина энтальпии образования H_2SO_4 (в 115 частях H_2O) усреднена из определений энтальпии образования водной серной кислоты, выполненных Центром по исследованию нефти в Бартлесвилле, Оклахома [509], и термохимической лабораторией в Лунде, Швеция [926]. Значения энтальпий растворения до соответствующих концентраций взяты из работы Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе [1249]. Сравнительно небольшое число данных по сгоранию бромсодержащих соединений отнесено к конечному состоянию жидкого брома. Переход от водной бромистоводородной кислоты к жидкому бромю берется из таблиц Россини и сотр. [1249]. Данные для HF взяты из недавней работы Лейчера и Скиннера [833]. Эти значения энтальпии сведены в табл. VIII.2.

Таблица VIII.2

Энтальпия образования

Вещество	Состояние	$\Delta H_f^\circ_{298}$, ккал/моль
CO_2	Газ	-94,0519
H_2O	Жидкость	-68,3174
HF	(в 50 ч. H_2O)	-77,03
HCl	(в 600 ч. H_2O)	-39,881
HBr	(в 600 ч. H_2O)	-28,775
H_2SO_4	(в 115 ч. H_2O)	-212,20

Несмотря на то что данные, приведенные в табл. VIII.2, считались наиболее достоверными из всех доступных к моменту сдачи книги в печать, необходимо обратить внимание на целый ряд исследований, проводимых во многих лабораториях. В результате этих работ, возможно, окажется необходимым внести соответствующие изменения в приведенные здесь данные.

Машинный расчет табличных данных

Данные химической термодинамики чаще находят практическое применение в виде табулированных значений соответствующих функций при определенных температурах, а не используются каждым исследователем для нахождения по уравнениям своих собственных значений при той или иной температуре. Для составления соответствующих таблиц применяется метод, основанный на использовании счетно-вычислительных машин. Ниже дается информация, показывающая, какие основные сведения, характеризующие термодинамические свойства того или иного соединения, содержатся в таблицах:

1. Округленные значения теплоемкостей веществ в состоянии идеального газа при 1 атм для девяти температур (298,15, 300, 400, 500, 600, 700, 800, 900 и 1000° К) *.

2. Практические величины энтропии веществ в состоянии идеального газа при 1 атм и 298,15° К.

3. Величины энтальпии образования соединений в состоянии идеального газа при 1 атм и 298,15° К.

4. Виды атомов и их число в каждом конкретном соединении.

5. Данные, характеризующие элементы, используемые при расчетах (в этой главе): а) грамм-атомный вес, б) практические величины грамм-атомной энтропии при каждой из девяти температур и в) величины грамм-атомной энтальпии при каждой из девяти температур и ее стандартное значение при 298,15° К.

В книге рассматриваются элементы С, Н, Вг, Cl, F, I, N, O и S. Соответствующие значения величин, указанных в пунктах 1—5, переносятся на перфокарту как исходные данные для электронно-счетной машины типа «Барроус 5500». Для последующего использования при расчетах величины, определяемые пунктом 5 (данные об элементах), сохранялись в блоке памяти электронно-счетной машины. Данные, указанные в пунктах 1—4, вводились в электронно-

* Органические реакции редко проводятся при температурах выше 1000° К. И хотя в литературе часто указываются значения для более высоких температур, вплоть до 1500° К, они не находят практического применения, поскольку промышленные процессы в химии органических соединений осуществляются при температурах, не превышающих 1000° К (исключение составляет, пожалуй, только cracking насыщенных углеводородов с целью получения этилена и ацетилена).

но-счетную машину. Из значений теплоемкостей при 300, 400 и 500° К вычислялись коэффициенты квадратного уравнения (II.13), как указано на стр. 64. Изменения энтальпии $H_{300}^{\circ} - H_{298}^{\circ}$ и $H_{400}^{\circ} - H_{300}^{\circ}$ рассчитывались путем интегрирования теплоемкости в соответствии с уравнением (II.17); таким образом были получены значения энтальпии при 300 и 400° К. Соответствующие изменения энтропии рассчитывались путем интегрирования данных по теплоемкостям согласно уравнению (IV.25) и прибавлялись к значению, указанному в пункте 2 (практическая энтропия при 298,15° К), а это и дает значения энтропии при 300 и 400° К. Затем вычислялись значения приведенной функции энергии Гиббса при 300 и 400° К по уравнению

$$-\frac{(G_T^{\circ} - H_{298}^{\circ})}{T} = S_T^{\circ} - 1000 \frac{(H_T^{\circ} - H_{298}^{\circ})}{T}.$$

Здесь T — абсолютная температура для данного расчета, а 1000 — коэффициент перехода от килокалорий к калориям. Энтальпии образования при 300 и 400° К рассчитываются по формуле

$$\Delta H f_T^{\circ} = \Delta H f_{298}^{\circ} + (H_T^{\circ} - H_{298}^{\circ}) (\text{соединение}) - \sum (H_T^{\circ} - H_{298}^{\circ}) (\text{элементы}),$$

где суммирование производится по элементам, входящим в состав данного соединения.

Стандартная энергия Гиббса образования 1 моля вещества рассчитывается по соотношению

$$\Delta G f_T^{\circ} = \Delta H f_T^{\circ} - T \Delta S f_T^{\circ}.$$

Входящая в это соотношение величина $\Delta S f_T^{\circ}$ — стандартная энтропия образования данного соединения из элементов при T° К — вычисляется по уравнению

$$\Delta S f_T^{\circ} = S_T^{\circ} (\text{соединение}) - \sum S_T^{\circ} (\text{элементы}).$$

При этом суммируются энтропии всех элементов, образующих данное соединение.

Обычный логарифм стандартной константы равновесия, выражаемой через давления, рассчитывается по уравнению

$$\lg K_p = \frac{-\Delta G f_T^{\circ}}{0,004575845T}.$$

Затем на основании определяемых в пункте 1 данных о теплоемкостях при 400, 500 и 600° К рассчитываются коэффициенты уравнения (II.13), как указано выше, и получают значения изменений энтальпии и энтропии, относящиеся к 400° К. Эти величины прибавляются к значениям для 400° К и дают новые значения уже для 500° К. Таким же образом последовательно вычисляются значения $\Delta H f^{\circ}$, $\Delta S f^{\circ}$ и $\lg K_p$ для более высоких температур, вплоть до 1000° К. Молекулярный вес рассчитывается по данным, указанным в пунктах 4 и 5а.

Такой метод расчета термодинамических функций позволяет получать таблицы, отличающиеся высокой внутренней согласованностью. Если доступны точные данные по теплоемкостям, то и для производных функций получают точные значения. В табл. VIII.3

Таблица VIII.3

Термодинамические функции бензола

T, °K	$H^\circ - H_{298}^\circ$, ккал/моль		S° , ккал/(моль·°K)	
	данные Россини и сотр. [1248]	рассчитано по описанному методу	данные Россини и сотр. [1248]	рассчитано по описанному методу
298	0,000	0,00	64,34	64,34
300	0,036	0,04	64,46	64,46
400	2,361	2,36	71,10	71,11
500	5,349	5,35	77,74	77,75
600	8,884	8,89	84,17	84,18
700	12,866	12,87	90,30	90,31
800	17,211	17,21	96,10	96,10
900	21,859	21,86	101,57	101,58
1000	26,762	26,76	106,73	106,74

значения термодинамических функций бензола, рассчитанные по вышеописанному методу, сравниваются с соответствующими данными, вычисленными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248] непосредственно из молекулярных и спектроскопических констант. Соответствие данных вполне удовлетворительное. В то же время следует отметить, что ошибки, допущенные при определении теплоемкостей, должны сказываться на всех значениях, даваемых в таблице. Приводимые в работе Россини и сотрудников данные по теплоемкостям для *n*-алкилзамещенных циклопентанов (более высоких, чем метилзамещенный), по-видимому, неточны. В табл. VIII.4 указаны значения C_p , ΔC_p и $\Delta^2 C_p$ для метилциклопентана и этилциклопентана. Значения для этилпроизводного при 400° K, очевидно, слишком завышены. Учитывая такие отклонения, в этом случае не следует ожидать столь же хорошего соответствия величин производных термодинамических функций, как для бензола. Значения энтальпии и энтропии, полученные по описанной выше программе, сравниваются в табл. VIII.5 с соответствующими данными Россини и сотрудников; таблица выявляет ожидаемые отклонения. В данных Россини и сотрудников были обнаружены и другие очевидные расхождения такого же типа, однако в большинстве случаев различия в величинах не столь серьезны.

Авторы тщательно выверили исходные данные и проконтролировали перфорирование, чтобы обеспечить точность табулирования

Таблица VIII.4

Теплоемкости двух алкилциклопентанов а)

T, °K	Метилциклопентан			Этилциклопентан		
	C_p	ΔC_p	$\Delta^2 C_p$	C_p	ΔC_p	$\Delta^2 C_p$
300	26,46			31,75		
400	36,11	9,65	-0,82	43,89	12,14	-3,00
500	44,94	8,83	-1,34	53,03	9,14	-0,47
600	52,43	7,49	-1,24	61,70	8,67	-1,35
700	58,68	6,25	-0,93	69,02	7,32	-1,12
800	64,00	5,32	-0,79	75,22	6,20	-0,88
900	68,53	4,53	-0,62	80,54	5,32	-0,70
1000	72,44	3,91		85,16	4,62	

а) Данные Россини и сотр. [1248].

Таблица VIII.5

Термодинамические функции этилциклопентана

T, °K	$H^\circ - H_{298}^\circ$, ккал/моль		S° , ккал/(моль·°K)	
	данные Россини и сотр. [1248]	рассчитано по описанному методу	данные Россини и сотр. [1248]	рассчитано по описанному методу
298	0,000	0,00	90,42	90,42
300	0,063	0,06	90,64	90,62
400	3,791	3,87	101,40	101,48
500	8,592	8,72	112,18	112,27
600	14,337	14,46	122,69	122,72
700	20,898	21,01	132,85	132,80
800	28,103	28,23	142,53	142,43
900	35,913	36,02	151,71	151,60
1000	44,187	44,31	160,42	160,33

счетной машиной. При частом использовании электронно-счетной машины контроль за ее работой можно осуществлять с помощью специальной системы, которая позволяет немедленно обнаруживать ошибки, допускаемые машиной. Авторы выявили больше ошибок, сделанных людьми, чем ошибок машины. Указания на любые погрешности, которые, возможно, обнаружатся в этой книге, будут приняты авторами с признательностью.

Стандартные состояния элементов

Обычно в качестве стандартного состояния элемента (простого вещества) выбирается такое состояние, при котором данный элемент устойчив при 1 атм. Выбор стандартного состояния для шести из рассматриваемых здесь девяти элементов очевиден — углерод в виде графита, водород, кислород, азот, фтор и хлор в состоянии идеального двухатомного газа при 1 атм во всем интервале температур от 298 до 1000° К. Бром, иод и сера стабильны в конденсированных фазах при 1 атм в интервале температур от 298° К до точек кипения этих элементов. Поэтому мы приняли в качестве стандартных состояний эти конденсированные фазы до нормальных точек кипения, а выше этих температур — состояния идеального двухатомного газа. Необходимо отметить, что это обуславливает при температурах фазовых переходов разрыв непрерывности изменения энтальпии образования всех соединений, в состав которых входят данные элементы. В случае серы наблюдается также небольшой разрыв непрерывности изменения энергии Гиббса для процессов образования, поскольку пар, находящийся в равновесии с жидкой серой при температуре кипения, представляет собой сложную смесь многоатомных молекул S_x ($x=4, 6, 8$, причем возможны и другие значения). Испарение с образованием молекул S_2 при 1 атм и 717,75° К не является равновесным процессом и, следовательно, связано с изменением энергии Гиббса.

Можно было бы исключить такого рода скачки в изменении свойств, приняв в качестве стандартного состояния состояние идеального двухатомного газа во всем интервале температур от 298 до 1000° К, однако это привело бы к путанице в интерпретации энтальпии и энергии Гиббса для процессов образования, поскольку выбранное стандартное состояние значительно отличалось бы от состояния, встречающегося на практике. Такие осложнения привели бы к значительно большей путанице, чем скачки в изменении свойств, обусловленные выбором тех или иных стандартных состояний. Преимущество выбранных стандартных состояний состоит также и в том, что они при 298° К идентичны с теми состояниями, которые были приняты Россини, Вагманом, Эвансом, Левином и Джаффе [1249]. Значениями, принятыми в результате расчетов этих авторов, можно непосредственно пользоваться наряду со значениями, указанными в данной

книге, без утомительных и сложных пересчетов, обусловленных различием в стандартных состояниях.

№ 1. Углерод (графит), С (твердое состояние). Ат. вес 12,010

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	2,066	1,361	1,361	0,000	0,000	0,000	0,000
300	2,083	1,374	1,361	0,004	0,000	0,000	0,000
400	2,851	2,081	1,453	0,251	0,000	0,000	0,000
500	3,496	2,788	1,649	0,569	0,000	0,000	0,000
600	4,030	3,474	1,896	0,947	0,000	0,000	0,000
700	4,430	4,127	2,169	1,370	0,000	0,000	0,000
800	4,750	4,740	2,453	1,830	0,000	0,000	0,000
900	4,980	5,314	2,739	2,318	0,000	0,000	0,000
1000	5,140	5,846	3,023	2,823	0,000	0,000	0,000

Недавние обзоры, выполненные Келли [736, 738] и составителями термохимических таблиц [1435], не выявили значительных изменений в термодинамических функциях графита по сравнению со сводкой Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. Поэтому нами приняты значения для стандартного состояния, которые были даны в работе Россини и сотрудников. Это имеет то преимущество, что предлагаемые здесь таблицы сопоставимы с подробными таблицами Исследовательского проекта 44 Американского нефтяного института. Атомный вес углерода, принятый Россини и сотрудниками, также не был изменен во избежание необходимого пересчета всех таблиц Американского нефтяного института без сколько-нибудь значительного повышения точности.

№ 2. Водород, H₂ (состояние идеального двухатомного газа). Мол. вес 2,0160

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	6,892	31,211	31,211	0,000	0,000	0,000	0,000
300	6,895	31,253	31,211	0,013	0,000	0,000	0,000
400	6,974	33,250	31,482	0,707	0,000	0,000	0,000
500	6,993	34,809	31,997	1,406	0,000	0,000	0,000
600	7,008	36,085	32,575	2,106	0,000	0,000	0,000
700	7,035	37,167	33,156	2,808	0,000	0,000	0,000
800	7,078	38,103	33,707	3,514	0,000	0,000	0,000
900	7,139	38,946	34,253	4,224	0,000	0,000	0,000
1000	7,217	39,704	34,762	4,942	0,000	0,000	0,000

Термодинамические функции для водорода также взяты из обзора Россини, Питгера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248] с тем, чтобы можно было сопоставлять данные для углеводов с более подробными табличными данными. В значительной части, если не полностью, приводимые значения основаны на результатах тщательной работы, выполненной Вулли, Скоттом и Брикуеддом [1630]. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] указывают следующие значения: $T_{tr} = 13,96^\circ \text{K}$, $\Delta H_{tr}^\circ = 0,028 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 20,39^\circ \text{K}$ и $\Delta H_v = 0,216 \text{ ккал/моль}$.

№ 3. Бром, Br_2 (жидкость от 298 до $332,62^\circ \text{K}$; состояние идеального двухатомного газа от $332,62$ до 1000°K). Мол. вес 159,832

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p °	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	18,090	36,384	36,384	0,000	0,000	0,000	0,000
300	18,077	36,496	36,384	0,033	0,000	0,000	0,000
400	8,775	61,263	40,520	8,273	0,000	0,000	0,000
500	8,857	63,172	44,860	9,156	0,000	0,000	0,000
600	8,908	64,791	48,051	10,044	0,000	0,000	0,000
700	8,944	66,167	50,543	10,937	0,000	0,000	0,000
800	8,970	67,363	52,573	11,833	0,000	0,000	0,000
900	8,992	68,421	54,276	12,731	0,000	0,000	0,000
1000	9,011	69,370	55,739	13,631	0,000	0,000	0,000

Сводка термодинамических функций элементарного брома была недавно опубликована в Термохимических таблицах [1435]. Данные о теплоемкости при низких температурах и энтальпии плавления сообщались Хильдебрандом, Крамером, Мак-Доналдом и Сталлом [596]. Термодинамические функции для состояния идеального газа были рассчитаны на основании спектроскопических данных, приведенных в работе Герцберга [590], и они хорошо согласуются с соответствующими значениями, вычисленными Эвансом, Мансоном и Вагманом [398]. После этого термодинамические функции для жидкого и газообразного состояния были использованы в сочетании с данными о давлении паров для расчета величины энтальпии испарения при 298°K по методам, основанным на третьем законе термодинамики. Данные Фишера и Бингла [428], а также Шеффера и Воогда [1280] показывают, что расчетные значения $H_v^\circ_{298}$ сильно зависят от температуры, тогда как данные Рамсея и Юнга [1212] свидетельствуют лишь о незначительной температурной зависимости, что в среднем хорошо согласуется с калориметрическим значением, указанным Хильденбрандом и сотр. [596]. Приведенные здесь стандарт-

ные значения получены на основании калориметрически установленной величины $7,39 \text{ ккал/моль}$. По расчетным данным точка кипения $332,62^\circ \text{K}$.

№ 4. Хлор, Cl_2 (состояние идеального двухатомного газа). Мол. вес 70,914

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p °	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	8,111	53,289	53,289	0,000	0,000	0,000	0,000
300	8,119	53,339	53,289	0,015	0,000	0,000	0,000
400	8,437	55,724	53,612	0,845	0,000	0,000	0,000
500	8,624	57,628	54,231	1,698	0,000	0,000	0,000
600	8,741	59,212	54,933	2,567	0,000	0,000	0,000
700	8,821	60,565	55,643	3,445	0,000	0,000	0,000
800	8,878	61,747	56,334	4,331	0,000	0,000	0,000
900	8,922	62,796	56,995	5,221	0,000	0,000	0,000
1000	8,956	63,737	57,623	6,115	0,000	0,000	0,000

Мы приняли термодинамические функции, сравнительно недавно рассчитанные Поттером [1183] путем прямого суммирования по энергетическим уровням молекулы хлора. Предшествующие расчеты, выполненные Эвансом, Мансоном и Вагманом [398] менее строгими методами, приводили к результатам, мало отличающимся в интересующей нас области температур. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] приводят следующие значения: $T_m = 172,16^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,531 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 239,10^\circ \text{K}$ и $\Delta H_v = 4,878 \text{ ккал/моль}$.

№ 5. Фтор, F_2 (состояние идеального двухатомного газа). Мол. вес 38,00

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p °	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	7,490	48,447	48,447	0,000	0,000	0,000	0,000
300	7,498	48,493	48,447	0,014	0,000	0,000	0,000
400	7,900	50,707	48,746	0,784	0,000	0,000	0,000
500	8,207	52,505	49,324	1,591	0,000	0,000	0,000
600	8,429	54,022	49,983	2,423	0,000	0,000	0,000
700	8,591	55,334	50,656	3,274	0,000	0,000	0,000
800	8,713	56,439	51,314	4,140	0,000	0,000	0,000
900	8,808	57,521	51,948	5,016	0,000	0,000	0,000
1000	8,885	58,453	52,553	5,901	0,000	0,000	0,000

Современные расчеты термодинамических функций фтора можно найти в работах Марфи и Ванса [1038], Коула, Фарбера и Эльверума [243], Эванса, Мансона и Вагмана [398], Поттера [1182], а также в Термохимических таблицах [1435]. Расхождения в данных небольшие, и мы приняли последнюю из указанных работ [1435], в основу которой были положены значения молекулярных постоянных, рассчитанные Рисом [1219] из спектров комбинационного рассеяния, полученных Андричуком [23], и непрерывных спектров, снятых Штейнбергом и Фогелем [1417]. По измерениям Ху, Уайта и Джонстона [626] $Tt = 45,55^\circ \text{K}$, $\Delta Ht^\circ = 0,174 \text{ ккал/моль}$, $Ttp = 53,54^\circ \text{K}$, $\Delta Hm^\circ = 0,122 \text{ ккал/моль}$, $Tb = 85,02^\circ \text{K}$ и $\Delta Hv = 1,562 \text{ ккал/моль}$.

№ 6. Иод, I₂ (кристаллическая форма от 298 до 386,75° К; жидкость от 386,75 до 458,39° К; состояние идеального газа от 458,39 до 1000° К). Мол. вес 253,82

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cr°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	13,014	27,758	27,758	0,000	0,000	0,000	0,000
300	13,028	27,839	27,758	0,024	0,000	0,000	0,000
400	19,281	41,602	28,612	5,196	0,000	0,000	0,000
500	8,948	66,877	33,438	16,719	0,000	0,000	0,000
600	8,980	68,511	39,152	17,616	0,000	0,000	0,000
700	9,005	69,897	43,447	18,515	0,000	0,000	0,000
800	9,025	71,101	46,830	19,416	0,000	0,000	0,000
900	9,044	72,165	49,587	20,320	0,000	0,000	0,000
1000	9,061	73,119	51,894	21,225	0,000	0,000	0,000

Термодинамические данные для иода опубликованы в Термохимических таблицах [1435]. Недавние измерения теплоемкости при низких температурах, произведенные Ширли и Джиоком [1347], были нами использованы для расчета энтропии кристаллического иода при 298° К. Более ранняя работа Ланге не учитывалась, поскольку давала отклонения 1% и более. Энтальпия иода в твердом и жидком состояниях при температурах выше 298° К, а также значение энтальпии плавления были взяты из работы Фредерика и Гильдебранда [444]; эти данные оказались более предпочтительными, нежели данные Карпентера и Харле [193]. В связи с тем что энтальпия меди, использовавшейся Фредериком и Гильдебрандом для калибровки, изменяется с температурой, их результаты были исправлены на линейно зависящий от температуры коэффициент, равный единице при 300° К, 0,995 при 400° К и 0,990 при 500° К. Исправленные данные Ширли и Джиока по энтальпии и теплоемкости рассчитывались

в соответствии с уравнениями (величины в килокалориях на 1 моль)

Кристалл: $H_T^\circ - H_{298}^\circ = -0,0121048T + 2,9506 \cdot 10^{-6}T^2 - 668,6T^{-1} + 3,22865,$

Жидкость: $H_T^\circ - H_{298}^\circ = 0,019281T - 2,5165.$

При температуре плавления (386,75° К) $\Delta Hm^\circ = 3,7087 \text{ ккал/моль}$. Термодинамические функции идеального газа рассчитывались на основании значений молекулярных постоянных, которые приведены в работе Рэнка и Болдуина [1213], и исправленного значения ω_e , указанного в работе Верма [1539]. Результаты хорошо согласуются с данными Эванса, Мансона и Вагмана [398]. Термодинамические функции для кристаллического и газообразного состояний в сочетании с данными о давлении пара, опубликованными Бакстером, Хики и Холмсом [86], а также Бакстером и Гроссом [85], позволили определить $\Delta Hv_{298}^\circ = 14,924 \text{ ккал/моль}$. Были проверены и другие данные по давлению пара, причем они подтвердили этот результат или оказались слишком неточными и не заслуживающими серьезного внимания. Расчетное значение для точки кипения равно 458,39° К.

№ 7. Азот, N₂ (состояние идеального двухатомного газа). Мол. вес 28,016

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cr°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	6,960	45,767	45,767	0,000	0,000	0,000	0,000
300	6,961	45,809	45,767	0,013	0,000	0,000	0,000
400	6,991	47,818	46,043	0,710	0,000	0,000	0,000
500	7,070	49,385	46,559	1,413	0,000	0,000	0,000
600	7,197	50,685	47,142	2,126	0,000	0,000	0,000
700	7,351	51,805	47,729	2,853	0,000	0,000	0,000
800	7,512	52,797	48,302	3,596	0,000	0,000	0,000
900	7,671	53,692	48,852	4,356	0,000	0,000	0,000
1000	7,816	54,509	49,379	5,130	0,000	0,000	0,000

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. Термодинамические функции азота, пересчитанные с учетом новейших данных по спектроскопическим и молекулярным постоянным и опубликованные в Термохимических таблицах [1435], не внесли существенных для наших целей изменений. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] приводят следующие значения: $Tt = 35,62^\circ \text{K}$, $\Delta Ht^\circ = 0,055 \text{ ккал/моль}$, $Ttp = 63,15^\circ \text{K}$, $\Delta Hm^\circ = 0,172 \text{ ккал/моль}$, $Tb = 77,34^\circ \text{K}$ и $\Delta Hv = 1,333 \text{ ккал/моль}$.

№ 8. Кислород, O₂ (состояние идеального двухатомного газа).
Мол. вес 32,000

T, °K	кал/(моль·°K)			кал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	7,017	49,003	49,003	0,000	0,000	0,000	0,000
300	7,019	49,048	49,004	0,013	0,000	0,000	0,000
400	7,194	51,093	49,285	0,723	0,000	0,000	0,000
500	7,429	52,723	49,815	1,454	0,000	0,000	0,000
600	7,670	54,100	50,418	2,209	0,000	0,000	0,000
700	7,885	55,296	51,027	2,988	0,000	0,000	0,000
800	8,064	56,364	51,631	3,786	0,000	0,000	0,000
900	8,212	57,322	52,211	4,600	0,000	0,000	0,000
1000	8,335	58,194	52,767	5,427	0,000	0,000	0,000

Для кислорода приведены значения термодинамических функций, взятые из работы Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пимента [1248] и основанные главным образом, если не полностью, на тщательно выполненном исследовании Вулли [1629]. По данным Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе [1249], $Tt = 23,66^\circ \text{K}$, $\Delta Ht^\circ = 0,022 \text{ ккал/моль}$, $Tt = 43,77^\circ \text{K}$, $\Delta Ht^\circ = 0,178 \text{ ккал/моль}$. $Ttp = 54,40^\circ \text{K}$, $\Delta Htp^\circ = 0,106 \text{ ккал/моль}$, $Tb = 90,19^\circ \text{K}$ и $\Delta Hv = 1,630 \text{ ккал/моль}$.

№ 9. Сера, S₂ (ромбические кристаллы от 298 до 368,46° K; моноклинные кристаллы от 368,46 до 388,36° K; жидкость от 388,36 до 717,75° K; состояние идеального двухатомного газа от 717,75 до 1000° K). Ат. вес 32,066

T, °K	кал/(моль·°K)			кал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	5,401	7,631	7,631	0,000	0,000	0,000	0,000
300	5,412	7,665	7,632	0,010	0,000	0,000	0,000
400	7,734	10,674	7,901	1,109	0,000	0,000	0,000
500	9,081	12,768	8,673	2,047	0,000	0,000	0,000
600	8,200	14,333	9,492	2,904	0,000	0,000	0,000
700	7,799	15,601	10,309	3,704	0,000	0,000	0,000
800	4,368	31,363	9,452	17,529	0,000	0,000	0,000
900	4,396	31,879	11,916	17,967	0,000	0,000	0,000
1000	4,418	32,344	13,936	18,408	0,000	0,000	0,000

Термодинамические данные для серы опубликованы в Термодинамических таблицах [1435]. Сведения о теплоемкости при низких температурах и значении энтропии ромбической модификации серы сообщены Истманом и Мак-Гейвоком [362]. Значения теплоемкостей

и энтальпий переходов при температурах выше 298° K взяты из работы Веста [1590] с исправлениями, указанными Мак-Каллохом и Скоттом [961]. При температуре перехода 368,46° K $\Delta Ht^\circ = 0,0960 \text{ ккал/моль}$, при температуре плавления 388,36° K $\Delta Hm^\circ = 0,4105 \text{ ккал/моль}$. Точка кипения 717,75° K является стандартной температурой по международной температурной шкале. Пары серы имеют сложный состав, они представляют собой смесь многоатомных молекул, содержащих от 2 до 8 атомов серы. Для интервала температур 717,75—1000° K в качестве наилучшего приближения достаточно оправданно было принято состояние идеального двухатомного газа. Для более строгих расчетов можно рекомендовать таблицы Сталла и Зинке [1437]. Термодинамические функции и энтальпия образования S₂(g), использованные здесь, взяты из обзора Эванса и Вагмана [399].

Термодинамические свойства некоторых неорганических соединений

Для удобства читателей ниже приводится сводка термодинамических свойств целого ряда неорганических соединений, с которыми часто приходится иметь дело в органической химии. Во многих случаях критическая оценка существующих данных была уже сделана и они могут быть использованы при общем рассмотрении тех или иных проблем. В некоторых случаях новейшие работы потребовали пересмотра или изменения ранее рассчитанных значений; приведена более подробная информация. Таблицы расположены в соответствии с системой формульного указателя, принятой в «Chemical Abstracts»*.

№ 10. Бромистый водород, BrH (состояние идеального газа). Мол. вес 80,924

T, °K	кал/(моль·°K)			кал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	6,96	47,44	47,44	0,00	-8,66	-12,73	9,328
300	6,97	47,49	47,44	0,02	-8,67	-12,75	9,289
400	6,98	49,49	47,72	0,71	-12,44	-13,34	7,290
500	7,03	51,05	48,23	1,41	-12,53	-13,56	5,926
600	7,12	52,34	48,81	2,12	-12,62	-13,76	5,011
700	7,24	53,45	49,40	2,84	-12,70	-13,94	4,352
800	7,38	54,42	49,97	3,57	-12,77	-14,11	3,855
900	7,53	55,30	50,51	4,32	-12,83	-14,28	3,467
1000	7,68	56,10	51,03	5,08	-12,88	-14,43	3,154

* Последовательность расположения таблиц при переводе сохранена. Формулы и названия неорганических соединений даны в том виде, в котором они используются в отечественной литературе. — Прим. перев.

Термодинамические функции, рассчитанные Плайлером [1174] на основании молекулярных постоянных, впоследствии были отнесены к природной смеси изотопов и опубликованы в Термодинамических таблицах [1435]. Энтальпия образования, взятая из работы Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе [1249], была подтверждена определениями в пределах ошибки эксперимента Лейчером, Кланпоуром, Оттингом и Парком [827]. По данным Россини и др. [1249], $T_m = 186,28^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 0,575 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 206,43^\circ \text{K}$ и $\Delta H_v = 4,210 \text{ ккал/моль}$.

№ 11. Бромциан, BrCN (состояние идеального газа). Мол. вес 105,934

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	11,12	59,07	59,07	0,00	43,35	38,39	-28,140
300	11,14	59,14	59,08	0,03	43,34	38,36	-27,944
400	11,85	62,45	59,52	1,18	39,78	37,44	-20,454
500	12,32	65,15	60,39	2,39	39,88	36,84	-16,102
600	12,68	67,43	61,37	3,64	39,95	36,22	-13,194
700	12,98	69,40	62,38	4,92	40,00	35,60	-11,114
800	13,24	71,16	63,37	6,23	40,03	34,97	-9,552
900	13,46	72,73	64,33	7,57	40,05	34,33	-8,337
1000	13,64	74,16	65,24	8,92	40,06	33,70	-7,364

Энтальпия образования $\Delta H_f^\circ(s)$ по данным Лорда и Вулфа [883] равна $32,5 \text{ ккал/моль}$; это значение получено на основании щелочного гидролиза до цианата натрия, бромистого натрия и воды. Энтальпия образования водного цианата натрия была установлена в отдельных экспериментах. Лорд и Вулф [883] измерили также давление пара в интервале температур от 273 до 308°K . Эти данные в сочетании с соответствующими данными Бакстера, Беззенбергера и Уилсона [84] нами использованы для вывода по наименьшим квадратам уравнения Антуана: $\lg P$ (мм рт. ст.) = $9,4559 - 2041,8/(t + 251,70)$, из которого мы нашли $\Delta H_{s,298}^\circ = 10,85 \text{ ккал/моль}$. Лорд и Вулф [883] вычислили энтропию газа при 298°K ; Кобе и Лонг [779] и Стивенсон [1418] опубликовали данные о теплоемкостях для состояния идеального газа. Согласно уравнению для давления пара и рассчитанному значению энтальпии сублимации, получено $S_{298}^\circ(s) = 26,37 \text{ кал/(моль·°K)}$. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] дают значения $T_m = 324,5^\circ \text{K}$ и $T_b = 334,5^\circ \text{K}$.

№ 12. Хлорциан, ClCN (состояние идеального газа). Мол. вес 61,475

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	10,69	56,28	56,28	0,00	31,60	29,99	-21,984
300	10,72	56,35	56,29	0,02	31,60	29,98	-21,841
400	11,54	59,55	56,72	1,14	31,71	29,43	-16,078
500	12,07	62,19	57,56	2,32	31,79	28,85	-12,609
600	12,48	64,43	58,52	3,55	31,85	28,25	-10,290
700	12,83	66,38	59,50	4,82	31,89	27,65	-8,632
800	13,12	68,11	60,47	6,11	31,92	27,04	-7,387
900	13,36	69,67	61,41	7,44	31,93	26,43	-6,448
1000	13,56	71,09	62,31	8,78	31,93	25,82	-5,643

Энтальпия образования газообразного хлорциана была установлена Лордом и Вулфом [883] на основании измерений энтальпии щелочного гидролиза. Энтальпия образования цианата натрия устанавливалась экспериментальным путем с использованием энтальпии реакции между иодом и цианидом натрия, а также энтальпии гидролиза дициана. Лорд и Вулф рассчитали также $S_{298}^\circ(g) = 56,28 \text{ кал/(моль·°K)}$; Кобе и Лонг [779] и Стивенсон [1418] рассчитали значение теплоемкости для состояния идеального газа. По сообщению Дугласа и Уинклера [337], $T_m = 266,25^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,720 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 286,1^\circ \text{K}$.

№ 13. Фосген, COCl_2 (состояние идеального газа). Мол. вес 98,924

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	13,79	67,82	67,82	0,00	-52,80	-49,42	36,225
300	13,82	67,91	67,83	0,03	-52,80	-49,40	35,986
400	15,28	72,10	68,39	1,49	-52,77	-48,27	26,372
500	16,27	75,62	69,49	3,07	-52,73	-47,15	20,607
600	16,98	78,65	70,77	4,73	-52,69	-46,04	16,768
700	17,52	81,31	72,09	6,46	-52,65	-44,93	14,027
800	17,92	83,68	73,39	8,23	-52,63	-43,83	11,973
900	18,24	85,81	74,66	10,04	-52,60	-42,73	10,376
1000	18,49	87,74	75,87	11,88	-52,58	-41,64	9,099

Термодинамические функции, опубликованные в Термохимических таблицах [1435], основаны на данных Робинсона [1235] по молекулярным размерам и колебательным отнесениям согласно Каталано и Питцеру [203]. Это новое колебательное отнесение при постулировании случайного вырождения было подтверждено термическими данными для низких температур, опубликованными Джиоком и Оттом [477]; указанные исследователи обнаружили три формы кристаллического фосгена, характеризующиеся следующими точками плавления и энтальпиями плавления: кристалл I, $T_m = 145,37^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,3715 \text{ ккал/моль}$; кристалл II, $T_m = 142,09^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,3354 \text{ ккал/моль}$; кристалл III, $T_m = 139,19^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,131 \text{ ккал/моль}$. Согласно более ранней работе Джиока и Джонса [476], $T_b = 280,7^\circ \text{K}$, при которой $\Delta H_v = 5,832 \text{ ккал/моль}$. Томпсон [1487] приводит значения для энтальпии образования, выведенные из равновесных данных по диссоциации фосгена на окись углерода и хлор. Пересчет с использованием приведенных здесь термодинамических функций дает $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -52,7 \text{ ккал/моль}$. Среднее значение, согласно термохимическим данным Томсена [1495], составляет $-52,9 \text{ ккал/моль}$. Такое хорошее совпадение в известной мере можно считать случайным, если учесть неопределенности. Принято среднее значение $-52,8 \text{ ккал/моль}$.

№ 14. Фтористый карбонил, CF_2O (состояние идеального газа).
Мол. вес 66,010

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p °	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	11,29	61,84	61,84	0,00	-153,00	-149,28	109,421
300	11,33	61,91	61,85	0,03	-153,00	-149,26	108,730
400	13,09	65,42	62,31	1,25	-153,15	-147,99	80,851
500	14,46	68,50	63,25	2,63	-153,26	-146,68	64,111
600	15,51	71,23	64,36	4,13	-153,35	-145,36	52,944
700	16,31	73,69	65,52	5,72	-153,42	-144,02	44,963
800	16,93	75,90	66,68	7,39	-153,48	-142,67	38,974
900	17,41	77,93	67,82	9,10	-153,53	-141,32	34,315
1000	17,79	79,78	68,92	10,87	-153,58	-139,98	30,590

По энтальпии гидролиза, измеренной Вартенбергом [1572], была найдена величина $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -153,2 \text{ ккал/моль}$. На основании значений констант равновесия реакции $2\text{CF}_2\text{O} = \text{CF}_4 + \text{CO}_2$ при разных температурах (Рафф и Ли [1267]) в сочетании с функциями свободной энергии было установлено, что $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) =$

$= -152,5 \text{ ккал/моль}$. Принята величина -153 ккал/моль , придающая большее значение калориметрическим данным. Расчетные значения термодинамических функций, опубликованные в Термохимических таблицах [1435], основаны на молекулярных данных Ловелла, Стефенсона и Джонса [888]. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] отобрали следующие значения: $T_p = 159,2^\circ \text{K}$, $T_b = 189,9^\circ \text{K}$ и $\Delta H_v = 3,86 \text{ ккал/моль}$.

№ 15. Цианистый водород, HCN (состояние идеального газа).
Мол. вес 27,026

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p °	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	8,59	48,21	48,21	0,00	31,20	28,71	-21,042
300	8,61	48,27	48,22	0,02	31,20	28,69	-20,901
400	9,42	50,86	48,56	0,92	31,16	27,86	-15,223
500	10,04	53,03	49,25	1,90	31,11	27,04	-11,820
600	10,56	54,91	50,04	2,93	31,06	26,23	-9,555
700	11,03	56,57	50,85	4,01	31,00	25,43	-7,941
800	11,45	58,07	51,66	5,13	30,94	24,64	-6,732
900	11,83	59,44	52,45	6,30	30,88	23,86	-5,793
1000	12,18	60,71	53,22	7,50	30,83	23,08	-5,044

Термодинамические функции для состояния идеального газа рассчитаны Брэдли, Хааром и Фридманом [157]. Менее полные расчеты даны Стаммом, Хальверсоном и Уаленом [1404], а также Кубе и Лонгом [779]. Джиок и Руервейн [478] опубликовали данные для низких температур, согласно которым $T_m = 259,91^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,009 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 298,85^\circ \text{K}$, $\Delta H_v = 6,027 \text{ ккал/моль}$ и $C_p(l) = 16,9 \text{ ккал/(моль·°K)}$ ($260-300^\circ \text{K}$). После внесения поправок на ассоциацию в газообразном состоянии калориметрическое значение энтропии достаточно хорошо согласуется с результатами расчетов, основанных на спектроскопических методах. Измерения теплоемкости газа, выполненные Фелсингом и Драке [415], также указывают на полимеризацию в газовой фазе. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] на основании анализа данных по энтальпии образования остановились на значениях $\Delta H_{f_{298}}^\circ(l) = 25,2 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = 31,2 \text{ ккал/моль}$. Эти значения хорошо согласуются с результатами Накамуры [1045], полученными на основании констант равновесия реакции между окисью углерода и аммиаком.

№ 16. Иодциан, ICN (состояние идеального газа). Мол. вес 152,928

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cr°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	11,55	61,33	61,33	0,00	53,80	46,88	-36,363
300	11,57	61,41	61,34	0,03	53,80	46,84	-34,120
400	12,15	64,82	61,80	1,21	51,80	44,60	-24,365
500	12,54	67,57	62,69	2,45	46,61	43,28	-18,919
600	12,85	69,89	63,70	3,72	46,70	42,61	-15,520
700	13,11	71,89	64,73	5,02	46,76	41,92	-13,089
800	13,34	73,65	65,74	6,34	46,80	41,23	-11,263
900	13,55	75,24	66,71	7,68	46,82	40,53	-9,842
1000	13,72	76,68	67,63	9,05	46,84	39,83	-8,705

Лорд и Вулф [883], основываясь на определениях энтальпии щелочного гидролиза твердого иодциана, нашли, что $\Delta H_{298}^{\circ}(s) = 38,3$ ккал/моль. Энтальпия образования цианата натрия, одного из продуктов гидролиза, измерялась в отдельных экспериментах по гидролизу дициана и реакции между иодом и цианидом натрия. Лорд и Вулф высчитали также статистическое значение энтропии для состояния идеального газа. Кобе и Лонг [779] и Стивенсон [1418] рассчитали значения теплоемкости для газообразного состояния; их значения хорошо согласуются. Мы вывели уравнение Антуана для давления пара на основании данных Иоста и Стоуна [1639], а также Кетелаара и Крюера [742] и использовали его для расчета энтальпии сублимации при 373° K, соответствующей средней точке данного температурного интервала. Приняв $\Delta Cr = 10$ кал/(моль·°K), мы исправили этот результат применительно к 298° K и получили значение $\Delta H_{298}^{\circ}(s) = 15,5$ ккал/моль, из которого рассчитали $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 53,8$ ккал/моль. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] приводят следующие значения: $Tt = 419^{\circ}$ K, $Ts = 413,0^{\circ}$ K и $\Delta Hs = 14,2$ ккал/моль.

Термодинамические функции и энтальпия образования окиси углерода взяты из обзорной статьи Вагмана, Килпатрика, Тейлора, Питцера и Россини [1562]. Клейтов и Джиок [233] приводят следующие значения: $Tt = 61,53^{\circ}$ K, $\Delta Ht^{\circ} = 0,151$ ккал/моль, $Ttp = 68,10^{\circ}$ K, $\Delta Htp^{\circ} = 0,200$ ккал/моль, $Tb = 81,66^{\circ}$ K и $\Delta Hv = 1,444$ ккал/моль. Сравнение значений энтропии, рассчитанных на основании третьего закона и статистическими методами, позволяет сделать вывод о беспорядочной ориентации молекул окиси углерода в твердом состоянии.

№ 17. Окись углерода, CO (состояние идеального газа). Мол. вес 28,010

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cr°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	6,97	47,30	47,30	0,00	-26,42	-32,81	24,050
300	6,97	47,35	47,31	0,02	-26,42	-32,85	23,931
400	7,01	49,36	47,58	0,72	-26,32	-35,01	19,128
500	7,12	50,93	48,10	1,42	-26,30	-37,19	16,254
600	7,28	52,24	48,68	2,14	-26,33	-39,36	14,337
700	7,45	53,38	49,27	2,88	-26,41	-41,53	12,966
800	7,62	54,39	49,85	3,63	-26,52	-43,68	11,933
900	7,79	55,29	50,41	4,40	-26,64	-45,82	11,126
1000	7,93	56,12	50,94	5,19	-26,77	-47,95	10,478

№ 18. Сероокись углерода, SCO (состояние идеального газа). Мол. вес 60,076

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cr°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	9,92	55,32	55,32	0,00	-33,08	-39,59	29,017
300	9,94	55,39	55,32	0,02	-33,08	-39,63	28,867
400	10,96	58,39	55,73	1,07	-33,74	-41,77	22,821
500	11,69	60,92	56,52	2,20	-34,22	-43,72	19,110
600	12,25	63,10	57,44	3,40	-34,64	-45,58	16,602
700	12,70	65,03	58,39	4,65	-35,00	-47,35	14,784
800	13,07	66,75	59,33	5,94	-48,40	-50,36	13,758
900	13,37	68,30	60,24	7,26	-48,41	-50,61	12,289
1000	13,62	69,73	61,12	8,61	-48,42	-50,85	11,113

Термодинамические функции были рассчитаны Гордоном [519]. Энтальпия образования основана на значениях констант равновесия, приведенных в работе Терреса и Весемана [1479] для реакции $\text{CO}_2(g) + \text{H}_2\text{S}(g) = \text{SCO}(g) + \text{H}_2\text{O}(g)$, и энтальпий образования CO_2 , H_2S и H_2O . Кемп и Джиок [739] на основании низкотемпературных измерений получили значения: $Tt = 134,34^{\circ}$ K, $\Delta Ht^{\circ} = 1,130$ ккал/моль, $Tb = 222,92^{\circ}$ K и $\Delta Hv = 4,423$ ккал/моль.

Нами приняты строго рассчитанные термодинамические функции, недавно опубликованные Гордоном [519], хотя они немного и отличаются от более ранних значений, рекомендованных Вагманом, Килпатриком, Тейлором, Питцером и Россини [1562]. Принята энтальпия образования, данная в обзоре Вагмана и сопр. [1562]. Джиок и Эган [474] приводят значения: $Ts = 194,71^{\circ}$ K, $\Delta Hs = 6,030$ ккал/моль, $Tc = 304,1^{\circ}$ K и $Pc = 72,8$ атм. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] принимают $Tt = 217,0^{\circ}$ K и $\Delta Ht = 1,99$ ккал/моль.

№ 19. Двуокись углерода, CO₂ (состояние идеального газа). Мол. вес 44,010

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	8,87	51,07	51,07	0,00	-94,05	-94,26	69,091
300	8,89	51,13	51,08	0,02	-94,05	-94,26	68,666
400	9,87	53,83	51,44	0,96	-94,07	-94,33	51,535
500	10,66	56,12	52,15	1,99	-94,09	-94,39	41,255
600	11,31	58,12	52,98	3,09	-94,12	-94,45	34,400
700	11,84	59,90	53,84	4,25	-94,17	-94,50	29,503
800	12,29	61,51	54,70	5,45	-94,22	-94,54	25,826
900	12,66	62,98	55,54	6,70	-94,27	-94,58	22,966
1000	12,97	64,33	56,36	7,98	-94,32	-94,61	20,676

№ 20. Сероуглерод, CS₂ (состояние идеального газа). Мол. вес 76,142

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	10,87	56,83	56,83	0,00	27,98	15,99	-11,722
300	10,90	56,90	56,84	0,03	27,98	15,92	-11,596
400	11,82	60,17	57,27	1,16	26,67	11,97	-6,542
500	12,48	62,88	58,13	2,38	25,69	8,42	-3,678
600	12,97	65,20	59,12	3,65	24,87	5,04	-1,835
700	13,35	67,23	60,14	4,97	24,17	1,84	-0,574
800	13,64	69,03	61,14	6,32	-2,59	-3,84	1,050
900	13,86	70,65	62,11	7,70	-2,58	-4,00	0,971
1000	14,03	72,12	63,04	9,09	-2,57	-4,16	0,909

Браун и Манов [175] опубликовали данные, относящиеся к области низких температур; они установили значения $T_{lp} = 161,11^\circ \text{K}$ и $\Delta H_{lp} = 4,05 \text{ ккал/моль}$ и вывели значение $S_{298}^o(l) = 36,10 \text{ кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$. Уаллингтон, Смит, Уильямсон и Скотт [1550] измеряли энтальпию испарения, давление паров и теплоемкость паров при разных температурах. Они рассчитали термодинамические функции из полной информации, полученной спектроскопическими методами, включающей учет эффектов ангармоничности, центробежного растяжения, колебательно-вращательного взаимодействия и изотопного состава. Рассчитанные теплоемкости находились в прекрасном соответствии с калориметрическими значениями, и было предложено принять CS₂ в качестве стандартного вещества для паровой калориметрии. Расчетное значение

энтропии $56,84 \text{ кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$ хорошо совпадает со значением $56,75 \text{ кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$, найденным на основании третьего закона термодинамики. Хорошо согласуются и полученные Гордоном [519] расчетные значения термодинамических функций, а соответствующие величины Мак-Бриджа и Гордона [944] несколько отклоняются. Ранее Кросс [295] сообщил результаты менее точных расчетов жесткого ротатора в приближении гармонического осциллятора.

Данные о теплоемкости жидкости в температурном интервале от 270 до 320°K приводятся в работах Брауна и Манова [175], Ставели, Тупмана и Харта [1407], Жданова [1644] и Мазура [943]. Все эти данные не согласуются между собой, поэтому не предпринималось попыток вывести уравнение. Гуд, Лейцина и Мак-Каллох [511] измеряли энтальпию сгорания во вращающейся калориметрической бомбе и установили следующие значения: $\Delta H_{f_{298}}^o(l) = 21,37 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{f_{298}}^o(g) = 27,98 \text{ ккал/моль}$; Гуд и сотрудники проанализировали также более ранние работы по определению энтальпии образования.

№ 21. Дициан, C₂N₂ (состояние идеального газа). Мол. вес 52,036

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	13,60	57,90	57,90	0,00	73,84	71,03	-52,067
300	13,63	57,99	57,91	0,03	73,84	71,02	-51,733
400	14,80	62,08	58,45	1,45	74,08	70,04	-38,266
500	15,65	65,48	59,53	2,98	74,26	69,01	-30,162
600	16,33	68,39	60,77	4,58	74,39	67,94	-24,747
700	16,91	70,95	62,04	6,24	74,48	66,86	-20,874
800	17,43	73,24	63,30	7,96	74,54	65,77	-17,966
900	17,87	75,32	64,52	9,72	74,57	64,67	-15,703
1000	18,25	77,23	65,70	11,53	74,59	63,57	-13,892

Руервейн и Джиок [1263] на основании измерения термических свойств при низких температурах получили значения: $T_{lp} = 245,31^\circ \text{K}$, $\Delta H_{lp} = 1,938 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 252,00^\circ \text{K}$ и $\Delta H_v = 5,576 \text{ ккал/моль}$. Калориметрическое значение энтропии согласуется в пределах ошибок опыта со значением, рассчитанным из спектроскопических данных Стивенсоном [1418]. Теплоемкость идеального газа, вычисленная Стивенсоном, была пересчитана для более широкого диапазона температур Томпсоном [1488] и Кубе и Лонгом [779]. Рассчитанные значения находятся в соответствии с экспериментальными определениями Бардича и Иоста [182] и Ститта [1425].

При определении энтальпии сгорания решающее значение имела работа, выполненная Ноултоном и Прозеном [769]. Эти исследователи нашли $\Delta H_{c_{298}}^o(g) = -261,94 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{f_{298}}^o(g) = 73,84 \text{ ккал/моль}$. Из всех предшествующих значений, указываемых Ноултоном и Прозеном, заслуживают внимания два более поздних — значение Вартенберга и Шитца [1576], находящееся в хорошем соответствии, и Мак-Морриса и Баджера [978], — заниженное.

№ 22. Недокись углерода, C_3O_2 (состояние идеального газа). Мол. вес 68,030

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	16,01	66,05	66,05	0,00	-22,38	-26,25	19,237
300	16,05	66,15	66,06	0,03	-22,38	-26,27	19,136
400	17,92	71,04	66,71	1,74	-22,12	-27,60	15,081
500	19,31	75,19	68,00	3,60	-21,95	-29,00	12,673
600	20,43	78,81	69,51	5,59	-21,85	-30,42	11,079
700	21,37	82,04	71,07	7,68	-21,80	-31,85	9,944
800	22,15	84,94	72,63	9,86	-21,80	-33,29	9,093
900	22,97	87,60	74,14	12,12	-21,82	-34,72	8,431
1000	23,34	90,04	75,61	14,44	-21,85	-36,15	7,901

Кибетт, Джонсон, Баркер и Маргрейв [819] на основании измерений энтальпии сгорания установили значение $\Delta H_{298}^\circ(l) = -28,03$ ккал/моль. Мак-Дугалл и Килпатрик [971] опубликовали низкотемпературные данные, согласно которым $T_p = 160,96^\circ K$, $\Delta H_m = 1,291$ ккал/моль, $\Delta H_{298}^\circ = 6,421$ ккал/моль и $S_{298}^\circ(K) = 62,12$ кал/(моль·°K). Самая низкая частота колебаний, согласно энтропии, установленной в соответствии с третьим законом термодинамики, составляет 63 см⁻¹. Остальные частоты взяты из работы Лонга, Марфина и Уильямса [881], а значение момента инерции принято по Лафферти, Маки и Плайлеру [837]. Путем прямых измерений в далекой инфракрасной области Миллер, Леммон и Витковский [1004] установили наличие колебаний с частотой 63 см⁻¹.

Значения теплоемкости для жидкости и паров в сочетании с величинами энтальпии испарения, найденной Мак-Дугаллом и Килпатриком, позволили установить следующие величины: $\Delta H_{298}^\circ = 5,65$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^\circ(g) = -22,38$ ккал/моль.

№ 23. Динитрил ацетилендикарбоновой кислоты, C_4N_2 (состояние идеального газа). Мол. вес 76,056

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	20,53	69,31	69,31	0,00	127,50	122,10	-89,500
300	20,58	69,44	69,32	0,04	127,51	122,07	-88,923
400	22,66	75,66	70,15	2,21	127,99	120,19	-65,663
500	24,16	80,88	71,79	4,55	128,36	118,19	-51,657
600	25,37	85,40	73,69	7,03	128,61	116,12	-42,296
700	26,39	89,39	75,65	9,62	128,78	114,03	-35,601
800	27,26	92,97	77,60	12,30	128,88	111,92	-30,573
900	28,00	96,23	79,49	15,07	128,94	109,79	-26,659
1000	28,62	99,21	81,31	17,90	128,97	107,66	-23,529

Армстронг и Маранц [26] измеряли энтальпию сгорания и нашли $\Delta H_{298}^\circ(g) = 127,5$ ккал/моль. Термодинамические функции, опубликованные в Термодинамических таблицах [1435], составлены с учетом структурных параметров Миллера и Ханпана [1002], а также отношений колебательных частот по Миллеру, Хашпану и Коузинсу [1003].

№ 24. Перхлорилфторид, $ClFO_3$ (состояние идеального газа). Мол. вес 102,457

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	15,52	66,65	66,65	0,00	-6,49	10,72	-7,858
300	15,57	66,75	66,66	0,03	-6,50	10,83	-7,887
400	18,15	71,60	67,30	1,73	-6,67	16,64	-9,089
500	20,00	75,86	68,59	3,64	-6,68	22,47	-9,819
600	21,32	79,63	70,13	5,71	-6,60	28,29	-10,304
700	22,27	82,99	71,73	7,89	-6,45	34,09	-10,642
800	22,97	86,01	73,33	10,15	-6,26	39,87	-10,891
900	23,49	88,75	74,89	12,48	-6,04	45,62	-11,078
1000	23,88	91,24	76,40	14,85	-5,80	51,34	-11,220

Энтальпия образования определена Неугебауэром и Маргрейвом [1060]. Опубликованные в Термодинамических таблицах [1435] значения термодинамических функций были рассчитаны на основании выполненных Лайде и Манном [869] отнесений колебаний и расчетных величин длин связей и углов между атомами. Низкотемпературные данные Кёхлера и Джиока [785] свидетельствуют о беспорядочной ориентации молекул перхлорилфторида в твердом состоянии. Они нашли $T_m = 125,41^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 0,916$ ккал/моль, $T_b = 226,48^\circ K$ и $\Delta H_v = 4,619$ ккал/моль.

№ 25. Хлористый водород, HCl (состояние идеального газа). Мол. вес 36,465

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	6,96	44,64	44,64	0,00	-22,06	-22,77	16,692
300	6,96	44,69	44,65	0,02	-22,06	-22,78	16,592
400	6,97	46,69	44,92	0,71	-22,13	-23,01	12,570
500	7,00	48,25	45,43	1,41	-22,20	-23,22	10,148
600	7,07	49,53	46,01	2,12	-22,29	-23,41	8,528
700	7,17	50,63	46,60	2,83	-22,36	-23,59	7,366
800	7,29	51,59	47,16	3,55	-22,44	-23,77	6,492
900	7,42	52,46	47,70	4,29	-22,50	-23,93	5,810
1000	7,56	53,25	48,22	5,03	-22,56	-24,08	5,263

Термодинамические функции хлористого водорода рассчитаны Поттером [1183]. Принято значение энтальпии образования, указанное в работе Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе [1249]. Россини и сотрудники приняли также $Tt = 98,38^\circ \text{K}$, $\Delta H^\circ = -0,284 \text{ ккал/моль}$, $T_{tr} = 158,94^\circ \text{K}$, $\Delta H_{tr}^\circ = 0,476 \text{ ккал/моль}$, $Tb = 188,11^\circ \text{K}$ и $\Delta H_v = 3,86 \text{ ккал/моль}$.

№ 26. Хлористый нитрозил, ClNO (состояние идеального газа). Мол. вес 65,465

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	10,68	62,53	62,53	0,00	12,57	16,00	-11,727
300	10,69	62,60	62,54	0,02	12,57	16,02	-11,670
400	11,31	65,76	62,96	1,13	12,55	17,18	-9,384
500	11,79	68,34	63,79	2,28	12,56	18,33	-8,012
600	12,20	70,53	64,73	3,48	12,60	19,48	-7,096
700	12,54	72,43	65,70	4,72	12,64	20,62	-6,439
800	12,83	74,13	66,65	5,99	12,70	21,76	-5,944
900	13,07	75,65	67,57	7,28	12,76	22,89	-5,558
1000	13,27	77,04	68,45	8,60	12,83	24,01	-5,248

Точный расчет термодинамических функций хлористого нитрозила проведен Гордоном [520]. Значение энтальпии образования взято из работы Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе [1249], в которой приведены также следующие величины: $T_{tr} = 211,7^\circ \text{K}$, $Tb = 267,4^\circ \text{K}$ и $\Delta H_v = 6,0 \text{ ккал/моль}$.

№ 27. Хлорокись азота, ClNO₂ (состояние идеального газа). Мол. вес 81,465

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	12,71	65,01	65,01	0,00	3,12	13,11	-9,613
300	12,74	65,09	65,02	0,03	3,12	13,18	-9,599
400	14,26	68,98	65,53	1,38	3,00	16,55	-9,044
500	15,41	72,29	66,56	2,87	2,97	19,95	-8,718
600	16,29	75,18	67,76	4,45	3,01	23,34	-8,501
700	16,97	77,74	69,01	6,12	3,10	26,72	-8,341
800	17,49	80,04	70,25	7,84	3,21	30,09	-8,219
900	17,89	82,13	71,45	9,61	3,34	33,44	-8,120
1000	18,20	84,03	72,62	11,42	3,48	36,78	-8,037

Энтальпия образования измерена Реем и Оггом [1217]. Термодинамические функции, рассчитанные Ларманом, Мартиром и Шолларой [848] и Пураником и Рао [1206], хорошо согласуются. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] отобрали следующие значения: $Tt = 128^\circ \text{K}$, $Tb = 257,9^\circ \text{K}$ и $\Delta H_v = 5,0 \text{ ккал/моль}$.

№ 28. Тионилхлорид, SOCl₂ (состояние идеального газа). Мол. вес 118,980

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	15,88	73,23	73,23	0,00	-50,60	-46,97	34,425
300	15,91	73,33	73,24	0,03	-50,60	-46,94	34,196
400	17,03	78,07	73,87	1,68	-51,24	-45,69	24,960
500	17,75	81,95	75,11	3,43	-51,65	-44,25	19,340
600	18,25	85,24	76,53	5,23	-51,95	-42,74	15,566
700	18,60	88,08	77,99	7,07	-52,18	-41,16	12,850
800	18,85	90,58	79,41	8,94	-65,41	-40,84	11,157
900	19,04	92,81	80,77	10,84	-65,25	-37,78	9,173
1000	19,18	94,82	82,08	12,75	-65,09	-34,73	7,594

Энтальпия образования жидкого тионилхлорида измерена Ниллом и Уилямсом [1048]. Их значение в сочетании со значением энтальпии испарения при точке кипения, взятым из работы Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе [1249], с учетом приведения к 298°K позволило вывести энтальпию образования для газообразного состояния. Частоты, принятые Келли [738], были использованы и здесь для расчета теплоемкости идеального газа. Россини и сотр. [1249] приводят следующие значения: $Tt = 168,7^\circ \text{K}$, $Tb = 348,9^\circ \text{K}$ и $\Delta H_v = 7,41 \text{ ккал/моль}$.

№ 29. Сульфурилхлорид, SO₂Cl₂ (состояние идеального газа). Мол. вес 134,980

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	18,34	74,37	74,37	0,00	-85,40	-74,80	54,827
300	18,38	74,49	74,38	0,04	-85,40	-74,73	54,441
400	20,06	80,02	75,12	1,97	-86,12	-71,13	38,859
500	21,10	84,62	76,57	4,03	-86,58	-67,32	29,425
600	21,79	88,53	78,25	6,17	-86,91	-63,44	23,106
700	22,25	91,92	79,96	8,38	-87,17	-59,48	18,571
800	22,58	94,92	81,65	10,62	-100,43	-56,78	15,511
900	22,82	97,59	83,27	12,89	-100,30	-51,33	12,465
1000	23,00	100,00	84,83	15,18	-100,17	-45,90	10,031

Значение энтальпии образования жидкого сульфурилхлорида, которое определили Нил и Уильямс [1048], в сочетании с величиной энтальпии испарения при точке кипения из работы Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе [1249] с учетом приведения к 298° К позволило вывести энтальпию образования идеального газа. Келли [738] вычислил энтропию из молекулярных данных; принятые им частоты использованы и здесь для расчета теплоемкостей, приведенных в таблице. Россини и сотр. [1249] отобрали следующие значения: $T_m = 227^\circ \text{ К}$, $T_b = 342,4^\circ \text{ К}$ и $\Delta H_v = 7,50 \text{ ккал/моль}$.

№ 30. Однохлористая сера, S_2Cl_2 (состояние идеального газа). Мол. вес 135,046

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	17,41	76,35	76,35	0,00	-4,66	-6,99	5,420
300	17,43	76,46	76,36	0,04	-4,66	-7,00	5,099
400	18,37	81,62	77,05	1,83	-5,90	-7,71	4,214
500	18,87	85,77	78,39	3,69	-6,76	-8,06	3,525
600	19,16	89,24	79,92	5,60	-7,44	-8,26	3,008
700	19,34	92,21	81,47	7,52	-8,00	-8,30	2,592
800	19,46	94,80	82,98	9,46	-34,59	-10,85	2,963
900	19,54	97,10	84,42	11,41	-34,41	-7,89	1,916
1000	19,61	99,16	85,79	13,37	-34,23	-4,95	1,083

Энтальпия образования получена из данных, указанных в работе Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе [1249]. Келли [738] рассчитал энтропию из молекулярных данных. Основные частоты, принятые Келли, использованы и здесь при расчете значений теплоемкости для идеального газа. Имеются некоторые сомнения относительно частот крутильных колебаний; Люфт и Тодхантер [893] вычислили несколько отличающиеся значения, основанные на ограниченном внутреннем вращении. Россини и сотр. [1249] выбрали величины $T_m = 193^\circ \text{ К}$, $T_b = 411,2^\circ \text{ К}$ и $\Delta H_v = 8,61 \text{ ккал/моль}$.

№ 31. Фтористый водород, HF (состояние идеального газа). Мол. вес 20,008

Термохимические данные для фтористого водорода в газообразном состоянии были критически пересмотрены и опубликованы в Термохимических таблицах [1435]; приведенное там значение $\Delta H_{298}^\circ(g) = -64,8 \text{ ккал/моль}$ принято и здесь. Поттер [1182] строго рассчитал термодинамические функции. Ху, Уайт и Джонстон [625] опубликовали низкотемпературные данные, согласно которым $T_{tr} = 189,79^\circ \text{ К}$ и $\Delta H_{tr}^\circ = 0,939 \text{ ккал/моль}$. Россини, Вагман, Эванс,

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	6,96	41,51	41,51	0,00	-64,80	-65,30	47,865
300	6,96	41,56	41,52	0,02	-64,80	-65,30	47,572
400	6,97	43,56	41,79	0,71	-64,84	-65,47	35,768
500	6,97	45,12	42,30	1,41	-64,89	-65,62	28,681
600	6,99	46,39	42,88	2,11	-64,96	-65,76	23,951
700	7,02	47,47	43,46	2,81	-65,04	-65,89	20,569
800	7,06	48,41	44,02	3,51	-65,12	-66,00	18,030
900	7,13	49,24	44,56	4,22	-65,20	-66,11	16,052
1000	7,21	50,00	45,06	4,94	-65,29	-66,21	14,470

Левин и Джаффе [1249] отобрали значения $T_b = 293,1^\circ \text{ К}$ и $\Delta H_v = 1,8 \text{ ккал/моль}$. Это соответствует ненормально низкой энтропии испарения, что объясняется ассоциацией в газовой фазе. При рассмотрении термодинамики HF в условиях низких температур и (или) высоких давлений эффекты такого рода ассоциации следует принимать во внимание.

№ 32. Фтористый нитрозил, FNO (состояние идеального газа). Мол. вес 49,008

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	9,88	59,27	59,27	0,00	-15,70	-12,02	8,811
300	9,90	59,34	59,28	0,02	-15,70	-12,00	8,741
400	10,65	62,29	59,67	1,05	-15,76	-10,75	5,874
500	11,23	64,73	60,45	2,15	-15,79	-9,50	4,151
600	11,69	66,82	61,34	3,29	-15,79	-8,24	3,000
700	12,06	68,65	62,26	4,48	-15,78	-6,98	2,180
800	12,35	70,28	63,16	5,70	-15,76	-5,72	1,564
900	12,59	71,75	64,03	6,95	-15,74	-4,47	1,086
1000	12,78	73,09	64,87	8,22	-15,71	-3,23	0,706

Энтальпия образования была определена Джонстоном и Бертингом [696]. Термодинамические функции были рассчитаны [1435] из молекулярных размеров и основных частот, взятых из работы Стивенсона и Джонса [1412]. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] приводят следующие значения: $T_m = 140,7^\circ \text{ К}$, $T_b = 213,3^\circ \text{ К}$ и $\Delta H_v = 4,61 \text{ ккал/моль}$.

№ 33. Фторокись азота, FNO_2 (состояние идеального газа). Мол. вес 65,008

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	11,92	62,24	62,24	0,00	-19,00	-8,90	6,525
300	11,96	62,32	62,25	0,03	-19,00	-8,84	6,439
400	13,64	66,00	62,74	1,31	-19,16	-5,42	2,961
500	14,90	69,18	63,71	2,74	-19,22	-1,98	0,864
600	15,88	71,99	64,86	4,28	-19,21	1,47	-0,537
700	16,62	74,50	66,06	5,91	-19,15	4,91	-1,534
800	17,19	76,75	67,26	7,60	-19,06	8,35	-2,280
900	17,64	78,81	68,43	9,34	-18,95	11,77	-2,857
1000	17,98	80,68	69,56	11,12	-18,82	15,16	-3,344

Термодинамические функции фтороксида азота опубликованы в работе Пураника и Рао [1206]. Прекрасно согласующиеся с ними значения были рассчитаны Чуйков-Ру [1520]; в этой же работе [1520] приведено значение $\Delta H_f^\circ(g) = -19$ ккал/моль. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] отобрали значения: $T_m = -107,2^\circ\text{K}$, $T_b = 200,8^\circ\text{K}$ и $\Delta H_v = 4,31$ ккал/моль.

№ 34. Четырехфтористая сера, SF_4 (состояние идеального газа). Мол. вес 108,066

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	17,21	69,58	69,58	0,00	-174,10	-163,68	119,976
300	17,27	69,69	69,59	0,04	-174,11	-163,62	119,189
400	19,99	75,06	70,30	1,91	-174,87	-160,06	87,448
500	21,69	79,71	71,73	4,00	-175,34	-156,30	68,316
600	22,78	83,77	73,40	6,22	-175,63	-152,46	55,532
700	23,50	87,34	75,14	8,54	-175,82	-148,56	46,380
800	24,01	90,51	76,87	10,92	-189,00	-145,93	39,864
900	24,36	93,36	78,55	13,34	-188,77	-140,56	34,130
1000	24,63	95,94	80,16	15,79	-188,53	-135,25	29,557

Энтальпия образования четырехфтористой серы измерена Воном и Мючтертисом [1529]. Термодинамические функции были рассчитаны на основании молекулярных постоянных и частот колебаний, указанных в работе Додда, Вудворда и Роберта [332]. Поскольку некоторые величины оценочные, неопределенность в значениях энтропии составляет ± 1 кал/(моль·°K).

№ 35. Иодистый водород, HI (состояние идеального газа). Мол. вес 127,918

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	6,97	49,35	49,35	0,00	6,30	0,38	-0,276
300	6,97	49,40	49,36	0,02	6,29	0,34	-0,248
400	7,01	51,41	49,63	0,72	4,06	-1,53	0,836
500	7,11	52,98	50,15	1,42	-1,35	-2,41	1,054
600	7,25	54,29	50,73	2,14	-1,43	-2,62	0,954
700	7,42	55,42	51,32	2,87	-1,49	-2,81	0,878
800	7,60	56,42	51,90	3,62	-1,55	-3,00	0,818
900	7,77	57,33	52,45	4,39	-1,58	-3,17	0,771
1000	7,92	58,15	52,98	5,18	-1,61	-3,35	0,732

Термодинамические функции, основанные на молекулярных постоянных, взятых из работ Коуана и Горди [282] и Бойда и Томпсона [153], были опубликованы в Термохимических таблицах [1435]. Энтальпия образования была рассчитана из функций свободной энергии, принятых в этой книге для I_2 , H_2 и HI , а также из значений констант равновесия, определенных Тейлором и Кристом [1473], поскольку эти значения лучше всего согласуются с имеющимися данными. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] отобрали следующие значения: $T_m = 222,36^\circ\text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 0,686$ ккал/моль, $T_b = 237,80^\circ\text{K}$ и $\Delta H_v = 4,724$ ккал/моль.

№ 36. Азотная кислота, HNO_3 (состояние идеального газа). Мол. вес 63,016

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	12,82	63,68	63,68	0,00	-32,02	-17,62	12,912
300	12,87	63,76	63,69	0,03	-32,03	-17,53	12,767
400	15,21	67,80	64,22	1,44	-32,38	-12,63	6,900
500	17,09	71,40	65,30	3,05	-32,56	-7,67	3,352
600	18,57	74,65	66,59	4,84	-32,61	-2,68	0,977
700	19,71	77,60	67,96	6,76	-32,58	2,30	-0,718
800	20,64	80,30	69,34	8,78	-32,48	7,28	-1,989
900	21,37	82,77	70,69	10,88	-32,34	12,24	-2,973
1000	21,95	85,06	72,02	13,04	-32,16	17,19	-3,756

Термодинамические функции азотной кислоты были рассчитаны Паллом и Килпатриком [1099]. Энтальпия образования, которую приводят Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249], находят-

ся в хорошем соответствии со значением, вычисленным Фейком [413] по давлению диссоциации нитрата аммония. Россини и сотр. [1249] приводят следующие значения: $T_m = 231,56^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = -2,503 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 293^\circ \text{K}$ и $\Delta H_v = 9,43 \text{ ккал/моль}$:

№ 37. Вода, H_2O (состояние идеального газа). Мол. вес 18,016

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	8,03	45,11	45,11	0,00	-57,80	-54,64	40,049
300	8,03	45,16	45,12	0,02	-57,80	-54,62	39,788
400	8,19	47,49	45,43	0,83	-58,04	-53,52	29,241
500	8,42	49,35	46,04	1,66	-58,28	-52,36	22,887
600	8,68	50,90	46,72	2,52	-58,50	-51,16	18,634
700	8,95	52,26	47,42	3,40	-58,71	-49,92	15,585
800	9,25	53,48	48,10	4,31	-58,91	-48,65	13,290
900	9,55	54,58	48,76	5,25	-59,08	-47,36	11,499
1000	9,85	55,61	49,39	6,22	-59,24	-46,04	10,062

Термодинамические функции воды опубликованы в работе Фридмана и Хаара [445]. Энтальпия образования взята из обзора Вагмана, Килпатрика, Тейлора, Питцера и Россини [1562]. Точки плавления и кипения соответственно $273,15$ и $373,15^\circ \text{K}$ являются реперными температурами международной шкалы. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] указывают значения $\Delta H_m^\circ = 1,4363 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_v = 9,7171 \text{ ккал/моль}$.

№ 38. Перекись водорода, H_2O_2 (состояние идеального газа). Мол. вес 34,016

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	10,31	55,66	55,66	0,00	-32,53	-25,21	18,478
300	10,33	55,73	55,67	0,02	-32,54	-25,16	18,331
400	11,58	58,88	56,09	1,12	-32,84	-22,66	12,378
500	12,56	61,57	56,92	2,33	-33,06	-20,08	8,777
600	13,31	63,93	57,90	3,63	-33,22	-17,47	6,363
700	13,86	66,03	58,91	4,99	-33,35	-14,84	4,632
800	14,30	67,91	59,92	6,39	-33,44	-12,18	3,328
900	14,69	69,61	60,90	7,84	-33,52	-9,52	2,312
1000	15,02	71,18	61,85	9,33	-33,57	-6,85	1,497

Термические и термодинамические данные для перекиси водорода были получены в результате тщательно выполненных исследований Жигера [480], Жигера и Лиу [481], Жигера, Лиу, Дагдейла и Моррисона [482], Жигера, Морисетта, Олмоса и Кнопа [483]. Полученные результаты включают следующие значения: $T_m = 272,75^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,987 \text{ ккал/моль}$, $\Delta H_v_{298}^\circ = 12,34 \text{ ккал/моль}$.

№ 39. Серная кислота, H_2SO_4 (безводная жидкость). Мол. вес 98,082

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	33,18	37,49	37,49	0,00	-194,45	-164,83	120,815
300	33,30	37,70	37,50	0,07	-194,44	-164,64	119,936
400	36,70	47,78	38,85	3,58	-194,14	-154,80	84,577
500	38,70	56,20	41,50	7,35	-193,46	-145,05	63,397
600	40,00	63,37	44,56	11,29	-192,59	-135,44	49,332
700	41,10	69,62	47,70	15,35	-191,60	-125,98	39,329

Рабин и Джиок [1260] установили для жидкой серной кислоты следующие данные, относящиеся к условиям низких температур: $T_m = 283,53^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,560 \text{ ккал/моль}$ и $S_{298}^\circ(l) = 37,49 \text{ ккал/(моль·°K)}$. Полученные этими исследователями данные по теплоемкости в области 300°K экстраполированы для получения значений теплоемкости при более высоких температурах. Гуд, Лейцина и Мак-Каллох [509] с высокой степенью точности определили энтальпию образования водной серной кислоты. Энтальпия образования безводной серной кислоты рассчитана по энтальпии растворов, указанной в работе Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе [1249].

№ 40. Сероводород, H_2S (состояние идеального газа). Мол. вес 34,082

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	8,17	49,18	49,18	0,00	-4,82	-7,90	5,792
300	8,18	49,24	49,19	0,02	-4,83	-7,92	5,771
400	8,51	51,63	49,51	0,85	-5,79	-8,87	4,845
500	8,90	53,57	50,13	1,72	-6,55	-9,55	4,174
600	9,32	55,23	50,85	2,64	-7,20	-10,09	3,673
700	9,75	56,70	51,58	3,59	-7,75	-10,50	3,278
800	10,18	58,03	52,31	4,59	-21,28	-12,13	3,313
900	10,59	59,25	53,01	5,62	-21,39	-10,97	2,665
1000	10,97	60,39	53,69	6,70	-21,47	-9,81	2,144

Термодинамические функции для сероводорода были вычислены Хааром, Брэдли и Фридманом [557]. Энтальпия образования принята по Эвансу и Вагману [399], которые установили ее на основании литературных данных. В пределах ошибок эксперимента с принятым значением согласуются недавние определения Капустинского и Каньковского [715]. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] отобрали следующие значения: $Tt = 103,54$ ккал/моль, $\Delta Ht^\circ = 0,366$ ккал/моль, $Tt = 126,24^\circ$ К, $\Delta Ht^\circ = 0,108$ ккал/моль, $Ttp = 187,63^\circ$ К, $\Delta Htp^\circ = 0,568$ ккал/моль, $Tb = 212,82^\circ$ К, $\Delta Hv = 4,463$ ккал/моль.

№ 41. Аммиак, NH_3 (состояние идеального газа). Мол. вес 17,032

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔHf°	ΔGf°	
298	8,51	46,03	46,03	0,00	-10,92	-3,86	2,831
300	8,53	46,09	46,04	0,02	-10,93	-3,82	2,783
400	9,24	48,64	46,38	0,91	-11,43	-1,37	0,749
500	10,04	50,79	47,05	1,87	-11,87	1,20	-0,522
600	10,81	52,68	47,83	2,92	-12,23	3,84	-1,400
700	11,54	54,41	48,65	4,03	-12,53	6,55	-2,044
800	12,23	55,99	49,47	5,22	-12,77	9,29	-2,537
900	12,87	57,47	50,28	6,48	-12,96	12,06	-2,928
1000	13,47	58,86	51,07	7,80	-13,11	14,85	-3,245

Обзор и пересмотр химических и термодинамических свойств аммиака выполнены Харрисоном и Кобе [573]. Были приняты значения, указанные ими. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] отобрали следующие значения: $Ttp = 195,40^\circ$ К, $\Delta Htp^\circ = 1,351$ ккал/моль, $Tb = 239,73^\circ$ К и $\Delta Hv = 5,581$ ккал/моль.

№ 42. Гидразин N_2H_4 (состояние идеального газа). Мол. вес 32,048

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔHf°	ΔGf°	
298	12,60	57,41	57,41	0,00	22,75	37,89	-27,773
300	12,61	57,49	57,42	0,03	22,73	37,98	-27,669
400	15,10	61,48	57,94	1,42	22,04	43,18	-23,590
500	16,90	65,05	59,01	3,02	21,54	48,52	-21,208
600	18,30	68,26	60,29	4,78	21,19	53,95	-19,652
700	19,50	71,17	61,64	6,68	20,95	59,43	-18,555
800	20,60	73,85	63,0	8,68	20,80	64,94	-17,740
900	21,50	76,33	64,34	10,79	20,73	70,47	-17,111
1000	22,30	78,63	65,66	12,98	20,71	76,00	-16,609

Термические данные для гидразина при низких температурах были получены Скоттом, Оливером, Гроссом, Хаббардом и Хаффманом [1323]. Согласно сообщениям этих исследователей, $Tt = 274,69^\circ$ К, $\Delta Ht^\circ = 3,025$ ккал/моль и $S_{298}^\circ(l) = 28,97$ ккал/(моль·°K). На основании измерения давления пара они установили, что энтальпия испарения при 298° К равна $10,70$ ккал/моль; основываясь на этом значении в сочетании с величиной энтальпии образования жидкого гидразина согласно работе Хьюза, Корручини и Джилберта [658], они определили $\Delta Hf_{298}^\circ(g) = 22,75$ ккал/моль. Скотт и сотрудники вычислили термодинамические функции из отнесения колебаний и молекулярных постоянных. Расчетное значение энтропии $0,44$ ккал/(моль·°K) оказалось выше экспериментального; расхождение, однако, было меньше возможного согласно общей неопределенности эксперимента.

№ 43. Окись азота, NO (состояние идеального газа). Мол. вес 30,008

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔHf°	ΔGf°	
298	7,13	50,35	50,35	0,00	21,60	20,72	-15,184
300	7,13	50,40	50,36	0,02	21,60	20,71	-15,087
400	7,16	52,45	50,63	0,73	21,61	20,41	-11,153
500	7,29	54,06	51,16	1,45	21,62	20,11	-8,791
600	7,47	55,41	51,76	2,19	21,62	19,81	-7,217
700	7,66	56,57	52,37	2,95	21,62	19,51	-6,094
800	7,83	57,61	52,96	3,72	21,63	19,21	-5,247
900	7,99	58,54	53,53	4,51	21,63	18,91	-4,591
1000	8,12	59,39	54,07	5,32	21,64	18,60	-4,066

Энтальпия образования взята из работы Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе [1249]. Термодинамические функции, опубликованные в Термохимических таблицах [1435], основаны на спектроскопических данных Герцберга [590]. Россини и сотр. [1249] отобрали следующие значения: $Ttp = 109,51^\circ$ К, $\Delta Htp^\circ = 0,550$ ккал/моль, $Tb = 121,39^\circ$ К и $\Delta Hv = 3,293$ ккал/моль.

№ 44. Двуокись азота, NO_2 (состояние идеального газа). Мол. вес 46,008

Термодинамические функции рассчитаны Гордоном [519]. Энтальпия образования взята из работы Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе [1249]. При низких температурах двуокись азота димеризуется до N_2O_4 , и процесс испарения становится сложным, требующим учета наряду с диссоциацией также и обычной энтальпии испарения.

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	8,86	57,35	57,35	0,00	8,09	12,42	-9,107
300	8,87	57,41	57,36	0,02	8,09	12,45	-9,070
400	9,64	60,07	57,71	0,95	7,95	13,93	-7,611
500	10,38	62,30	58,41	1,95	7,87	15,43	-6,746
600	11,02	64,25	59,23	3,02	7,83	16,95	-6,174
700	11,56	65,99	60,07	4,15	7,82	18,47	-5,766
800	12,00	67,56	60,91	5,33	7,83	19,99	-5,461
900	12,35	69,00	61,73	6,55	7,85	21,51	-5,223
1000	12,63	70,32	62,52	7,80	7,89	23,03	-5,032

№ 45. Закись азота, N₂O (состояние идеального газа). Мол. вес 44,016

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	9,23	52,56	52,56	0,00	19,49	24,77	-18,156
300	9,25	52,62	52,57	0,02	19,49	24,80	-18,068
400	10,20	55,42	52,94	1,00	19,41	26,59	-14,528
500	10,95	57,78	53,68	2,05	19,40	28,39	-12,407
600	11,56	59,83	54,54	3,18	19,44	30,18	-10,993
700	12,06	61,65	55,42	4,36	19,50	31,97	-9,980
800	12,48	63,29	56,31	5,59	19,59	33,74	-9,218
900	12,82	64,78	57,17	6,86	19,69	35,51	-8,622
1000	13,11	66,14	58,00	8,15	19,79	37,26	-8,143

Расчитанные термодинамические функции, опубликованные в Термохимических таблицах [1435], основаны на частотах, приведенных Герцбергом [591], и вращательных постоянных Коулса и Хьюза [248]. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] отобрали следующие значения: $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 19,49$ ккал/моль, $T_{tr} = 182,30^{\circ}$ K, $\Delta H_{tr}^{\circ} = 1,563$ ккал/моль, $T_b = 184,68^{\circ}$ K и $\Delta H_v = 3,956$ ккал/моль.

№ 46. Двуокись серы, SO₂ (состояние идеального газа) Мол. вес 64,066

Были использованы термодинамические функции, расчитанные Гордоном [519], хотя они лишь немного отличались от функций, приведенных в работе Эванса и Вагмана [399]. Энтальпия образова-

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	9,53	59,30	59,30	0,00	-70,95	-71,74	52,588
300	9,55	59,36	59,31	0,02	-70,96	-71,75	52,267
400	10,39	62,23	59,69	1,02	-71,77	-71,95	39,309
500	11,13	64,63	60,44	2,10	-72,36	-71,93	31,437
600	11,72	66,71	61,32	3,24	-72,83	-71,79	26,149
700	12,18	68,56	62,22	4,44	-73,21	-71,57	22,313
800	12,53	70,21	63,12	5,67	-86,60	-72,58	19,826
900	12,81	71,70	63,99	6,94	-86,58	-70,82	17,198
1000	13,02	73,06	64,83	8,23	-86,56	-69,07	15,095

ния взята из обзора Эванса и Вагмана [399]; она основана на энтальпии сгорания ромбической серы, согласно измерениям Экмана и Россини [364]. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] отобрали следующие значения: $T_{tr} = 197,68^{\circ}$ K, $\Delta H_{tr}^{\circ} = 1,769$ ккал/моль, $T_b = 263,14^{\circ}$ K и $\Delta H_v = 5,955$ ккал/моль.

№ 47. Озон, O₃ (состояние идеального газа). Мол. вес 48,000

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	9,37	57,05	57,05	0,00	34,00	38,91	-28,517
300	9,39	57,11	57,06	0,02	34,00	38,94	-28,364
400	10,43	59,96	57,44	1,02	33,93	40,60	-22,181
500	11,26	62,38	58,19	2,10	33,92	42,27	-18,475
600	11,87	64,49	59,07	3,26	33,94	43,94	-16,004
700	12,30	66,36	59,98	4,47	33,98	45,60	-14,235
800	12,62	68,02	60,88	5,72	34,03	47,26	-12,909
900	12,86	69,52	61,76	6,99	34,09	48,91	-11,875
1000	13,04	70,89	62,60	8,29	34,14	50,55	-11,047

Энтальпия образования взята из работы Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе [1249]. Термодинамические функции расчитаны Бирдсолом, Дженкинсом, Дипалло, Битти и Аптом [133] и Клейном, Клевеландом и Мейстером [766]. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] отобрали следующие значения: $T_b = 162,65^{\circ}$ K и $\Delta H_v = 2,59$ ккал/моль.

№ 48. Трехокись серы, SO₂ (состояние идеального газа). Мол. вес 80,066

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	12,10	61,19	61,19	0,00	-94,47	-88,52	64,886
300	12,13	61,27	61,20	0,03	-94,48	-88,49	64,458
400	14,06	65,03	61,70	1,34	-95,33	-86,41	47,212
500	15,66	68,35	62,70	2,83	-95,87	-84,12	36,767
600	16,90	71,32	63,89	4,46	-96,23	-81,73	29,769
700	17,86	74,00	65,15	6,20	-96,46	-79,27	24,749
800	18,61	76,43	66,41	8,02	-109,66	-78,07	21,328
900	19,23	78,66	67,65	9,92	-109,43	-74,14	18,003
1000	19,76	80,71	68,85	11,87	-109,16	-70,23	15,348

Эванс и Вагман [399] на основании обзора данных по энтальпии образования рассчитали термодинамические функции для трехоксида серы. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] приводят следующие точки плавления и энтальпии плавления для трех кристаллических форм: кристалл III — $T_{tp} = 290,0^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 0,47$ ккал/моль; кристалл II — $T_{tp} = 305,7^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,47$ ккал/моль; кристалл I — $T_{tp} = 335,4^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 6,09$ ккал/моль. Жидкость кипит при $316,5^\circ \text{K}$ и $\Delta H_v = 9,99$ ккал/моль.

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА УГЛЕВОДОРОДОВ

Исторический обзор

Из 154 соединений, рассмотренных в основополагающей монографии Паркса и Хаффмана «Свободные энергии некоторых органических соединений» [1105], более трети составляют углеводороды. Систематическое описание термодинамических свойств этих веществ основано главным образом на данных, полученных авторами названного труда и их учениками при финансовой поддержке компании «Универсал ойл продактс», Американского нефтяного института и некоторых других нефтяных компаний.

Уже в самом начале второй мировой войны возникла срочная необходимость в получении более полных и точных термодинамических данных, относящихся к компонентам нефти. Несколько позже, в 1942 г., Американский нефтяной институт подписал проект А.Р.1.44 предусматривавший организацию при Национальном бюро стандартов, которым руководил Ф. Д. Россини, всестороннего, тщательного и строгого изучения термодинамических свойств углеводородов. Эта весьма объемная работа объединяла усилия экспериментаторов, обеспечивавших получение точных данных, теоретиков, рассчитывавших термодинамические свойства статистическим методом на основе первого закона термодинамики, и представителей нефтяной промышленности, финансировавших данную работу и обеспечивавших получение необходимых образцов, отличавшихся вполне определенными характеристиками и высокой чистотой. С 1950 г. в течение последующих десяти лет работы над проектом велись в Технологическом институте Карнеги. С сентября 1960 г. этими исследованиями руководил Б. Зволинский. В апреле 1961 г. работа над проектом А.Р.1.44 была перенесена в Центр по изучению химических термодинамических свойств при сельскохозяйственном и механическом колледже Техаса. Над осуществлением проекта А.Р.1.44 работала большая группа сотрудников. Из официального отчета [1248] и последующего дополнения [1653] можно почерпнуть подробные сведения о персонале, об оригинальных публикациях, связанных с проектом, получить полную библиографию по термодинамике углеводородов, а также извлечь информацию относительно наиболее надежных значений величин, характеризующих физические и термодинамические свойства углеводородов. В основе многих данных, приводимых в этой главе, лежат упомянутые выше сводки.

В 1943 г. была основана Нефтяная термодинамическая лаборатория при Нефтяном исследовательском центре Горного бюро США в Барглесвилле. Программа этой лаборатории, имевшая целью определение основных химических термодинамических свойств соединений, содержащихся в нефти, и ряда других веществ, продолжала выполняться и была расширена, для того чтобы можно было получить данные, необходимые для развития послевоенной экономики. Работа указанной термодинамической лаборатории была начата и продолжалась под руководством Х. Хаффмана, а с января 1950 г. под руководством Г. Уаддингтона, Дж. Мак-Каллоха, Д. Скотта и Д. Доуслина. Учитывая полученные в лаборатории хорошие результаты измерений термодинамических свойств углеводородов, знакомство с целями и планами систематических исследований, проводимых в этой лаборатории, может быть весьма поучительным. Поскольку в настоящее время не закончена работа по получению вполне надежных экспериментальных данных и соответствующих расчетных данных для множества органических веществ, имеющих промышленное значение, Нефтяная термодинамическая лаборатория продолжает свою деятельность, руководствуясь следующей систематической «идеальной» программой:

1. Выбор важного класса веществ, для которых необходимо получить информацию.

2. Выбор для индивидуального изучения «ключевых» членов из каждого гомологического ряда данного класса.

3. Получение возможно более полных и точных термодинамических данных для каждого «ключевого» вещества в твердом, жидком и газообразном состояниях и в широкой области температур и давлений.

4. Сопоставление и интерпретация экспериментальных результатов для всех «ключевых» соединений.

5. Расчет по методам статистической механики значений термодинамических функций для тех областей изменения переменных, которые недоступны для экспериментов.

6. Применение полутеоретических методов для расчета термодинамических свойств всех важных членов каждого гомологического ряда [736].

Полный указатель работ, выполненных в этой лаборатории и опубликованных в научных журналах, выпущен отдельным изданием [947].

В 1940 г. К. Питцер [1150, 1153] разработал полуэмпирические методы расчета термодинамических свойств парафинов с прямой цепью и родственных углеводородов. На протяжении последующих 12 лет были опубликованы результаты многочисленных экспериментальных и теоретических работ. Персон и Пиментел [1140] в 1953 г., проверив и пересмотрев ранние расчеты Питцера, дали уточненные значения соответствующих параметров. Эти исследователи предло-

жили основные уравнения для расчета термодинамических функций нормальных алканов и табулировали расчетные значения от бутана до гептана включительно; кроме того, они составили таблицу инкрементов, необходимых для расчета значений для каждого члена ряда алканов до эйкозана включительно. Многие другие исследователи также внесли свой вклад в современные знания о свойствах углеводородов.

Значение углеводородов

Очень важно сначала рассмотреть термодинамические свойства углеводородов, поскольку они создают основу для сопоставления свойств других органических соединений. На изучение углеводородов было затрачено больше усилий, нежели на изучение всех остальных органических соединений; следствием этого явилось то, что этот основной раздел термодинамики органических соединений, к счастью, оказался самым пространным и наиболее разработанным разделом.

Более того, обобщая можно сказать, что углеводороды — это такие соединения, от которых происходят все другие органические соединения. Они составляют самую большую группу родственных соединений, образованных из двух ковалентно связанных элементов. Химические и физические характеристики, обусловленные этими связями, изменяются вполне определенно и закономерно в гомологических рядах углеводородов при переходе от одного члена ряда к другому. Обычно свойства первых трех или четырех членов такого ряда углеводородов сильнее всего отклоняются от значений, которые предопределяются закономерностями изменения свойств более высоких членов данного ряда. И тем не менее можно со значительной точностью предсказать свойства самых различных углеводородов.

Несмотря на недостаточность конкретных данных относительно других типов органических соединений, само по себе расчленение структуры соединения на скелетную основу и различные присоединенные к ней части позволяет со значительной достоверностью предвидеть неизвестные свойства. Измерение определенных термодинамических свойств ряда «ключевых» спиртов оказывается достаточным для установления меры изменения термодинамических свойств, обусловленной заменой метильной группы выпестоящего углеводорода на гидроксильную группу. Установленную величину инкремента можно использовать для каждого углеводорода и в принципе получить достоверную информацию, относящуюся к группе спиртов, соответствующих углеводородам с тем же числом углеродных атомов.

Подобным же образом по установленным термодинамическим свойствам небольшого числа ключевых хлорпроизводных углеводородов можно рассчитать значения инкрементов, характерных для замещения метильных групп в том или ином углеводороде на атом хлора. Использование определенных значений инкрементов приме-

Зависимость между величинами отклонения инкремента δ от линейности и числом углеродных атомов m в нормальных алкильных радикалах^{a)}

Строение	Ряды					алкилциклопентаны	алкилциклогексаны
	алканы	(1-алкены)	алкилбензолы	Циклопентил — (CH ₂) _m — H	Циклогексил — (CH ₂) _m — H		
Метил — (CH ₂) _m — H	9,740	16,404	2,76 ± 0,37	2,05 ± 0,40	1,82 ± 0,41		
Винил — (CH ₂) _m — H	9,740	16,404	0,07 ± 0,33	-0,06 ± 0,37	-0,82 ± 0,40		
Фенил — (CH ₂) _m — H	9,740	16,404	0,39 ± 0,30	-0,01 ± 0,36	0,05 ± 0,45		
Метил — (CH ₂) _m — H	-15,334	-4,926	0,04 ± 0,48	-0,10 ± 0,37	-0,18 ± 0,37		
Винил — (CH ₂) _m — H	-15,334	-4,926	0,00 ± 0,47	0,00 ± 0,39	0,00 ± 0,37		
Фенил — (CH ₂) _m — H	-15,334	-4,926	0,00 ± 0,47	0,00 ± 0,39	0,00 ± 0,37		
Метил — (CH ₂) _m — H	-2,55 ± 0,37						
Винил — (CH ₂) _m — H	0,02 ± 0,33						
Фенил — (CH ₂) _m — H	0,37 ± 0,30						
Метил — (CH ₂) _m — H	0,30 ± 0,28						
Винил — (CH ₂) _m — H	0,04 ± 0,23						
Фенил — (CH ₂) _m — H	0,00 ± 0,23						

^{a)} Указанные в таблице значения получены на основании использования величин энтальпии образования низших членов соответствующих гомологических рядов углеводородов в газобразном состоянии при 25° С и применения соотношения $\Delta H_f^\circ = A + Bm + \delta$; Прозен, Джонсон, Россини [1196]

нительно к конкретным соединениям, принадлежащим к данному типу углеводородов, позволяет получать полезные сведения, относящиеся к соответствующей группе хлорпроизводных углеводородов. Таким образом появляется возможность во много раз расширить имеющуюся информацию по углеводородам путем приложения указанного метода, основанного на использовании закономерного изменения термодинамических свойств углеводородов при замещении элементами Br, Cl, F, I, N, O и S каждым в отдельности или в сочетании с другими элементами.

Закономерности изменения термодинамических свойств

Закономерности изменения энтальпии образования были наглядно показаны в работе Прозена, Джонсона и Россини [1196]. Эти исследователи установили отклонения от линейной зависимости изменения энтальпии образования для некоторых гомологических рядов углеводородов с числом углеродных атомов m в нормальных алкильных радикалах. Их результаты выражаются соотношением

$$\Delta H_f^\circ [g, Y-(CH_2)_m-H] = A + Bm + \delta \text{ ккал/моль}, \quad (IX.1)$$

где $-(CH_2)_m-H$ означает нормальный алкильный радикал (метил, этил, пропил и т. д.), присоединенный к любой концевой группе Y (метил, винил, фенил, циклопентил, циклогексил и т. д.); A — константа, характерная для данной концевой группы Y; B — инкремент на группу $-CH_2-$, представляющий собой постоянную величину для всех нормальных алкильных рядов, не зависящую от Y; δ — небольшая конечная величина для низших членов ряда, максимальное значение она принимает при $m = 0$ и становится равной нулю для высших членов, когда $m > 4$; графически это показано на рис. IX.1.

В табл. IX.1 приведены численные значения констант A и B, а также значения δ в уравнении (IX.1) для низших членов пяти рядов. Неопределенность значения δ в каждом отдельном случае обусловлена неопределенностью, связанной с экстраполяцией линейной части уравнения (IX.1) к низшим значениям m . Значения δ для $m = 0$ являются характеристиками концевых групп каждой серии и их следует учитывать при определении закономерности изменения соответствующих свойств с изменением числа водородных атомов, а также числа и вида атомов углерода, связанных с основным или присоединенным атомом углерода концевой группы. Значение B представляет собой инкремент энтальпии образования при переходе к последующему члену в каждом ряду. Иными словами, включение в алкильный радикал группы $-CH_2-$ (при этом алкильный радикал удлиняется на один атом углерода) всегда приводит к тому,

что энтальпия образования становится более отрицательной на 4,926 ккал/моль.

Закономерности изменения термодинамических функций для гомологического ряда в случае газообразного состояния веществ были надежно установлены Тейлором, Вагманом, Уильямсом, Питцером и Россини [1477] при изучении ими ряда алкилбензолов. Тщательные расчеты температурной зависимости термодинамических функций (энтальпийной функции, функции энергии Гиббса, энтропии, энтальпии и теплоемкости) были произведены для девяти простейших членов

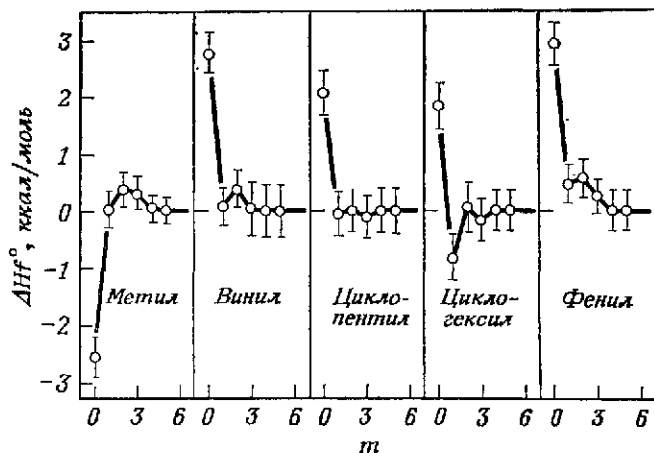


Рис. IX.1. Диаграмма отклонений от линейной зависимости между числом углеродных атомов (n) в нормальных алкильных радикалах и энтальпиями образования нижних членов гомологических рядов углеводородов; эти отклонения учитываются величиной δ в уравнении (IX.1).

ряда алкилбензолов: бензола, толуола, m -, o - и p -ксилолов, этилбензола, 1,2,3- и 1,2,4-триметилбензола и мезитилена. Такой расчет включает определение: а) вкладов поступательного движения и свободного вращения, б) вкладов колебаний и в) вкладов ограниченного вращения, где это применимо. Следует отметить, что в случае 1,2,3- и 1,2,4-триметилбензолов колебательные вклады были учтены эмпирическим путем из значений, строго рассчитанных для мезитилена и для трех указанных выше ксилолов. На основании предположения об аддитивности эффектов, определяемых положением замещающих групп, были установлены следующие эмпирические соотношения для определения вкладов колебательного движения:

$$(1,2,3\text{-Триметилбензол}) = (\text{Мезитилен}) + 2[(o\text{-Ксилол}) - (m\text{-Ксилол})] \quad (\text{IX.2})$$

$$(1,2,4\text{-Триметилбензол}) = (\text{Мезитилен}) + [(o\text{-Ксилол}) + (p\text{-Ксилол}) - 2(m\text{-Ксилол})]. \quad (\text{IX.3})$$

Из определенных по описанному здесь способу термодинамических функций для девяти указанных выше членов этого ряда остальные термодинамические функции еще для 18 членов ряда были рассчитаны методом инкрементов следующим образом.

Для трех метилэтилбензолов функции рассчитывали на основании значений для соответствующих нижних алкилбензолов и алканов по формуле

$$x\text{-Этилтолуол} = x\text{-Ксилол} + \text{Этилбензол} - \text{Толуол} + R \ln 2. \quad (\text{IX.4})$$

где $x = m$ -, o - или p -. Для двух пропилбензолов

$$\text{Пропилбензол} = \text{Этилбензол} + \text{Бутан} - \text{Пропан}, \quad (\text{IX.5})$$

$$\text{Изопропилбензол} = \text{Этилбензол} + 2\text{-Метилпропан} - \text{Пропан} + R \ln (3/2). \quad (\text{IX.6})$$

Функции для 13 алкилбензолов от бутилбензола ($C_{10}H_{14}$) до гексадецилбензола ($C_{22}H_{26}$) рассчитывали по формуле

$$\text{Алкилбензол} (C_nH_{2n-6}) = \text{Этилбензол} + \text{Алкан} (C_{n-5}H_{2n-8}) - \text{Пропан} (n \geq 9). \quad (\text{IX.7})$$

При $n = 9$ эта формула сводится к соотношению (IX.5) для пропилбензола (C_9H_{12}).

В приведенных выше формулах логарифмические члены служат для исправления расхождения в общих числах симметрии для суммарного и внутреннего вращения. Их следует включать при расчете энтропии и отрицательного значения функции энергии Гиббса $-(G_T^\circ - H_{298}^\circ)/T$, но опускать при расчетах энтальпии и теплоемкости.

Некоторые представления о точности значений для пропилбензола можно получить на основании сравнения непосредственно рассчитанных значений для этилбензола и величин, рассчитанных по формуле

$$\text{Этилбензол} = \text{Толуол} + \text{Пропан} - \text{Этан}. \quad (\text{IX.8})$$

Вычисленные таким образом значения термодинамических функций для этих и других алкилбензолов часто используются в тексте книги. В табл. IX.2 приводятся величины инкрементов для каждой из термодинамических функций при введении группы $-\text{CH}_2-$ в молекулу алкилбензола, стоящего в ряду после пентилбензола ($C_{11}H_{16}$).

Аллен [10] предложил один из наиболее точных методов корреляции и предсказания энтальпий образования углеводородов, основанный на использовании термодинамических энергий связи. Энтальпия атомизации ΔH_a° алканов, например, дается выражением

$$\Delta H_a^\circ = N_{\text{CH}} E_{\text{CH}} + N_{\text{CC}} E_{\text{CC}} + X_{\alpha\text{CC}} - T\beta_{\text{CC}} - SA, \quad (\text{IX.9})$$

где N_{CH} и N_{CC} — число связей C — H и C — C в данной молекуле; E_{CH} и E_{CC} — термодинамические энергии связей C — H и C — C;

Таблица IX.2

Значения инкрементов группы $-\text{CH}_2-$ для газообразных алкилбензолов, стоящих в ряду после пентилбензола ($\text{C}_{11}\text{H}_{18}$)

$T, ^\circ\text{K}$	C_p° а)	S_T° а)	$\frac{-(G_T^{\circ}-H_{298}^{\circ})^{\text{а)}}}{T}$	$H_T^{\circ}-H_{298}^{\circ}$ б)	ΔH_f° б)	ΔG_f° б)
298	5,466	9,309	-2,649	0,000	-4,926	2,009
300	5,494	9,343	-2,687	0,010	-4,932	2,053
400	6,941	11,124	-4,577	0,632	-5,252	4,431
500	8,246	12,817	-6,056	1,394	-5,507	6,882
600	9,342	14,409	-7,317	2,270	-5,708	9,382
700	10,276	15,918	-8,437	3,250	-5,854	11,910
800	11,065	17,348	-9,464	4,321	-5,948	14,451
900	11,746	18,692	-10,612	5,455	-6,002	17,009
1000	12,33	19,962	-11,306	6,670	-6,02	19,57

а) В кал/(моль·°К).

б) В ккал/моль.

$\alpha_{\text{ССС}}$ — энергия взаимодействия для пары следующих ближайших соседних углеродных атомов, соединенных с данным атомом углерода; X — число таких пар; $\beta_{\text{ССС}}$ — тригональная энергия взаимодействия между тремя углеродными атомами, каждый из которых является ближайшим соседом двух других; T — число тригональных взаимодействий; A — энергия *gosh*-бутан взаимодействия и S — число таких взаимодействий.

Этот метод основан на предположении, что энтальпия образования алканового углеводорода может быть рассчитана путем суммирования соответствующего числа постоянных метиленовых инкрементов и учета энергии взаимодействия при определении энтальпии образования метана. Таким образом, для газообразных углеводородов $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$

$$\Delta H_f^{\circ} = \Delta H_f^{\circ}(\text{CH}_4, g) + (n-1) [\Delta H_f^{\circ}(\text{C}_2\text{H}_6, g) - \Delta H_f^{\circ}(\text{CH}_4, g)] - X\alpha_{\text{ССС}} - T\beta_{\text{ССС}} + SA. \quad (\text{IX.10})$$

Подстановка соответствующих значений приводит к соотношению

$$\Delta H_f^{\circ} (\text{алкан}, g) = -15,54 - 2,35n - 2,58X + 0,65T + 0,5S. \quad (\text{IX.11})$$

Точно таким же образом можно получить следующее соотношение для газообразных циклопарафинов (нафтен) с общей форму-

лой C_nH_{2n} :

$$\Delta H_f^{\circ} = -n[\Delta H_f^{\circ}(\text{C}_2\text{H}_6, g) - \Delta H_f^{\circ}(\text{CH}_4, g)] - X\alpha_{\text{ССС}} + SA + T\beta_{\text{ССС}} - E_s, \quad (\text{IX.12})$$

где E_s — энергия деформации циклической молекулы. Подстановка соответствующих значений приводит к соотношению

$$\Delta H_f^{\circ} (\text{циклопарафин}, g) = -2,35n - 2,58X + 0,5S + 0,65T + E_s \quad (\text{IX.13})$$

Алканы. Таблицы для состояния идеального газа

№ 101. Метан, CH_4 (состояние идеального газа). Мол. вес 16,042

$T, ^\circ\text{K}$	кал/(моль·°К)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	8,54	44,52	44,52	0,00	-17,89	-12,15	8,903
300	8,55	44,58	44,53	0,02	-17,90	-12,11	8,823
400	9,71	47,19	44,87	0,93	-18,63	-10,07	5,502
500	11,12	49,51	45,57	1,97	-19,30	-7,85	3,432
600	12,55	51,66	46,41	3,16	-19,90	-5,51	2,005
700	13,91	53,70	47,31	4,48	-20,40	-3,06	0,957
800	15,18	55,64	48,23	5,94	-20,82	-0,56	0,154
900	16,34	57,50	49,16	7,51	-21,15	1,99	-0,484
1000	17,40	59,28	50,08	9,20	-21,40	4,58	-1,001

Колуелл, Джилл и Моррисон [257] на основании тщательно выполненной работы по изучению теплоемкости при низких температурах и термических переходов установили значения: $T_{tp} = 90,67^\circ\text{K}$ и $\Delta H_{tp} = 0,222$ ккал/моль. Они отметили хорошее совпадение с предшествующими результатами. Хестерманс и Уайт [593] измеряли давление паров, энтальпию испарения и теплоемкость жидкости в диапазоне от точки кипения до критической температуры. По данным этих исследователей, $T_b = 111,42^\circ\text{K}$, при этом $\Delta H_v = 1,953$ ккал/моль, $T_c = 190,55^\circ\text{K}$ и $P_c = 45,41$ атм. Результаты более ранних работ сопоставимы с этими значениями.

В этой книге приняты термодинамические функции, рассчитанные Мак-Доуеллом и Крузе [972] и включающие поправки на ангармоничность. Питцер [1155] рассчитал термодинамические функции для жесткого ротатора — в приближении гармонического осциллятора. Колуелл, Джилл и Моррисон [257] вывели значение калориметрической энтропии $S_{298}^{\circ}(g) = 45,09$ кал/(моль·°К), которое на $0,57$ кал/(моль·°К) больше «практической» спектроскопической величины. Они отнесли это различие за счет ядерных спинов атомов водорода.

Энтальпия сгорания метана была точно установлена Россини [1239]. Это значение исправлено в соответствии с изменением атомных весов и приведено к нулевому давлению Проzenом и Россини [1203], которые установили, что $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -17,889$ ккал/моль.

В работе Доуслина, Харрисона, Мура и Мак-Каллоха [340] приводятся *PVT*-данные для метана, относящиеся к широкому диапазону температур и давлений.

№ 102. Этан, C_2H_6 (состояние идеального газа). Мол. вес 30,068

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	12,58	54,85	54,85	0,00	-20,24	-7,87	5,765
300	12,64	54,93	54,86	0,03	-20,26	-7,79	5,675
400	15,68	58,99	55,39	1,44	-21,42	-3,45	1,886
500	18,66	62,81	56,49	3,16	-22,44	1,16	-0,508
600	21,35	66,46	57,85	5,17	-23,29	5,96	-2,171
700	23,72	69,93	59,33	7,42	-23,99	10,90	-3,402
800	25,83	73,24	60,86	9,90	-24,54	15,91	-4,347
900	27,69	76,39	62,42	12,58	-24,97	21,00	-5,100
1000	29,33	79,39	63,96	15,43	-25,28	26,13	-5,711

Проzen и Россини [1203] внесли небольшие исправления в тщательно определенное Россини [1241] значение энтальпии сгорания, и по их расчетам $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -20,236$ ккал/моль.

На основании опубликованных данных по установленным в соответствии с третьим законом значениям энтропии и теплоемкости пара Питцер [1157] пришел к выводу, что барьер внутреннего вращения равен $2,875 \pm 0,125$ ккал/моль. Из спектроскопической информации Лайд [866] нашел, что этот барьер составляет $3,03 \pm 0,30$ ккал/моль. Термодинамические функции, основанные на работе Питцера, опубликованы Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]; в этой работе указаны также следующие значения: $T_m = 89,88^{\circ}K$, $\Delta H_m^{\circ} = 0,683$ ккал/моль и $T_b = 184,52^{\circ}K$, при этом $\Delta H_v = 3,517$ ккал/моль. На основании обзора работ по критическим константам Кубе и Линн [780] отобрали в качестве лучших значения Битти, Су и Симарда [88]: $T_c = 305,4^{\circ}K$ и $P_c = 48,2$ атм.

№ 103. Пропан, C_3H_8 (состояние идеального газа). Мол. вес 44,094

Приняты значения, отображенные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 85,46^{\circ}K$, $\Delta H_m^{\circ} = 0,842$ ккал/моль и $T_b = 231,08^{\circ}K$, при этом $\Delta H_v = 4,487$ ккал/моль. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 379,9^{\circ}K$, $P_c = 42,0$ атм и $dc = 0,220$ г/см³.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	17,57	64,51	64,51	0,00	-24,82	-5,61	4,115
300	17,66	64,62	64,52	0,04	-24,85	-5,50	4,004
400	22,54	70,38	65,27	2,05	-26,36	1,19	-0,651
500	27,02	75,90	66,85	4,53	-27,62	8,23	-3,596
600	30,88	81,18	68,80	7,43	-28,66	15,50	-5,644
700	34,20	86,20	70,93	10,69	-29,48	22,93	-7,157
800	37,08	90,95	73,14	14,26	-30,11	30,45	-8,318
900	39,61	95,47	75,37	18,10	-30,58	38,05	-9,240
1000	41,83	90,76	77,60	22,17	-30,89	45,71	-9,988

№ 104. Бутан, C_4H_{10} (состояние идеального газа). Мол. вес 58,120

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	23,29	74,12	74,12	0,00	-30,15	-4,10	3,004
300	23,40	74,27	74,13	0,05	-30,19	-3,94	2,869
400	29,60	81,86	75,12	2,70	-31,99	5,10	-2,784
500	35,34	89,10	77,20	5,96	-33,51	14,55	-6,358
600	40,30	95,99	79,76	9,74	-34,73	24,27	-8,841
700	44,55	102,53	82,55	13,99	-35,68	34,19	-10,674
800	48,23	108,72	85,44	18,63	-36,41	44,21	-12,078
900	51,44	114,59	88,35	23,62	-36,93	54,33	-13,193
1000	54,22	120,16	91,26	28,91	-37,25	64,50	-14,095

Приняты значения, отображенные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 107,55^{\circ}K$, $\Delta H_m^{\circ} = 0,494$ ккал/моль, $T_m = 134,81^{\circ}K$, $\Delta H_m^{\circ} = 1,114$ ккал/моль и $T_b = 272,65^{\circ}K$, при этом $\Delta H_v = 5,352$ ккал/моль. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 425,1^{\circ}K$, $P_c = 37,5$ атм и $dc = 0,228$ г/см³.

№ 105. 2-Метилпропан (изобутан), C_4H_{10} (состояние идеального газа). Мол. вес 58,120

Приняты значения, отображенные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 113,56^{\circ}K$, $\Delta H_m^{\circ} = 1,085$ ккал/моль и $T_b = 261,42^{\circ}K$, при этом $\Delta H_v = 5,089$ ккал/моль. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 408,0^{\circ}K$, $P_c = 36,0$ атм и $dc = 0,228$ г/см³.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	23,14	70,42	70,42	0,00	-32,15	-4,99	3,661
300	23,25	70,57	70,43	0,05	-32,19	-4,83	3,518
400	29,77	78,17	71,42	2,70	-33,99	4,58	-2,500
500	35,62	85,45	73,50	5,98	-35,48	14,39	-6,291
600	40,62	92,40	76,08	9,80	-36,67	24,48	-8,917
700	44,85	98,99	78,88	14,08	-37,60	34,75	-10,850
800	48,49	105,22	81,79	18,75	-38,30	45,13	-12,329
900	51,65	111,12	84,72	23,76	-38,79	55,60	-13,500
1000	54,40	116,71	87,65	29,07	-39,09	66,11	-14,448

№ 106. Пентан, C₅H₁₂ (состояние идеального газа). Мол. вес. 72,146

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	28,73	83,40	83,40	0,00	-35,00	-2,00	1,468
300	28,87	83,58	83,41	0,06	-35,04	-1,80	1,343
400	36,53	92,95	84,63	3,33	-37,17	9,61	-5,253
500	43,58	101,88	87,20	7,35	-38,94	21,52	-9,406
600	49,64	110,37	90,36	12,02	-40,36	33,75	-12,291
700	54,83	118,42	93,80	17,24	-41,46	46,19	-14,422
800	59,30	126,04	97,36	22,96	-42,28	58,76	-16,053
900	63,18	133,26	100,95	29,08	-42,85	71,44	-17,347
1000	66,55	140,09	104,52	35,58	-43,20	84,17	-18,394

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], а также результаты измерений Питцера [1154] и Мессерли и Кеннеди [992]. $T_t = 143,43^\circ \text{K}$, $\Delta H_t^\circ = 2,006 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 309,22^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 6,160 \text{ ккал/моль}$. По наблюдениям Пардингтона, Роулинсона и Уестона [1123] $T_c = 469,5^\circ \text{K}$; по данным Кубе и Линна [780], $P_c = 33,3 \text{ атм}$ и $d_c = 0,232 \text{ г/см}^3$.

№ 107. 2-Метилбутан (изопентан), C₅H₁₂ (состояние идеального газа). Мол. вес 72,146

Приняты результаты измерений Гатри и Хаффмана [550] а также значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_t = 113,26^\circ \text{K}$, $\Delta H_t^\circ = 1,231 \text{ ккал/моль}$

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	28,39	82,12	82,12	0,00	-36,92	-3,54	2,596
300	28,54	82,30	82,13	0,06	-36,97	-3,34	2,431
400	36,49	91,62	83,34	3,32	-39,11	8,21	-4,486
500	43,71	100,56	85,90	7,33	-40,87	20,25	-8,851
600	49,89	109,08	89,06	12,02	-42,27	32,61	-11,876
700	55,19	117,18	92,50	17,28	-43,34	45,18	-14,105
800	59,71	124,85	96,07	23,03	-44,13	57,87	-15,809
900	63,66	132,12	99,68	29,20	-44,65	70,66	-17,159
1000	67,12	139,01	103,27	35,75	-44,94	83,50	-18,249

и $T_b = 301,00^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 5,901 \text{ ккал/моль}$. Вора и Кубе [1544] в результате измерений получили $T_c = 460,9^\circ \text{K}$, а по данным Кубе и Линна [780], $P_c = 32,9 \text{ атм}$ и $d_c = 0,234 \text{ г/см}^3$.

№ 108. 2,2-Диметилпропан (неопентан), C₅H₁₂ (состояние идеального газа). Мол. вес 72,146

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	29,07	73,23	73,23	0,00	-39,67	-3,64	2,669
300	29,21	73,42	73,24	0,06	-39,71	-3,42	2,492
400	37,55	82,98	74,48	3,40	-41,77	9,00	-4,919
500	45,00	92,18	77,11	7,54	-43,41	21,89	-9,569
600	51,21	100,95	80,36	12,36	-44,68	35,07	-12,775
700	56,40	109,25	83,90	17,75	-45,62	48,45	-15,127
800	60,78	117,07	87,56	23,61	-46,30	61,93	-16,917
900	64,55	124,45	91,25	29,88	-46,73	75,49	-18,331
1000	67,80	131,43	94,93	36,51	-46,94	89,10	-19,471

Приняты результаты измерений Астона и Мессерли [39a] и отобранные значения Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_t = 140,01^\circ \text{K}$, $\Delta H_t^\circ = 0,616 \text{ ккал/моль}$, $T_m = 256,60^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 0,778 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 282,65^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 5,438 \text{ ккал/моль}$. По наблюдениям Пардингтона, Роулинсона и Уестона [1123] $T_c = 433,7^\circ \text{K}$. По данным Кубе и Линна [780]. $P_c = 31,6 \text{ атм}$ и $d_c = 0,238 \text{ г/см}^3$.

№ 109. Гексан, C_6H_{14} (состояние идеального газа). Мол. вес 86,172

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	34,20	92,83	92,83	0,00	-39,96	-0,06	0,047
300	34,37	93,05	92,84	0,07	-40,01	0,13	-0,131
400	43,47	104,20	94,29	3,97	-42,45	13,96	-7,629
500	51,83	114,82	97,35	8,74	-44,48	28,31	-12,373
600	58,99	124,92	101,11	14,29	-46,10	43,02	-15,669
700	65,10	134,48	105,20	20,50	-47,34	57,98	-18,101
800	70,36	143,52	109,43	27,28	-48,26	73,08	-19,963
900	74,93	152,08	113,70	34,55	-48,89	88,30	-21,440
1000	78,89	160,19	117,94	42,25	-49,25	103,57	-22,635

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 507,8^\circ K$, $P_c = 29,9$ атм и $dc = 0,234$ г/см³. $T_m = 177,80^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 3,114$ ккал/моль и $T_b = 341,89^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 6,896$ ккал/моль.

№ 110. 2-Метилпентан, C_6H_{14} (состояние идеального газа). Мол. вес 86,172

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	34,46	90,95	90,95	0,00	-41,66	-1,20	0,882
300	34,63	91,17	90,96	0,07	-41,71	-0,96	0,696
400	44,00	102,44	92,43	4,01	-44,11	13,01	-7,108
500	52,50	113,19	95,51	8,84	-46,08	27,53	-12,031
600	59,60	123,41	99,32	14,46	-47,63	42,39	-15,440
700	65,70	133,07	103,46	20,73	-48,81	57,50	-17,951
800	70,80	142,18	107,73	27,56	-49,68	72,74	-19,870
900	75,30	150,78	112,04	34,87	-50,27	88,09	-21,389
1000	79,20	158,92	116,33	42,60	-50,60	103,49	-22,616

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 497,8^\circ K$, $P_c = 29,9$ атм и $dc = 0,235$ г/см³. $T_m = 119,49^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 1,500$ ккал/моль и $T_b = 333,42^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 6,643$ ккал/моль.

№ 111. 3-Метилпентан, C_6H_{14} (состояние идеального газа). Мол. вес 86,172

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	34,20	90,77	90,77	0,00	-41,02	-0,51	0,373
300	34,37	90,99	90,78	0,07	-41,07	-0,26	0,191
400	43,47	102,14	92,23	3,97	-43,51	13,73	-7,500
500	51,83	112,76	95,29	8,74	-45,54	28,28	-12,360
600	59,00	122,86	99,05	14,29	-47,16	43,19	-15,733
700	65,10	132,42	103,14	20,50	-48,40	58,36	-18,221
800	70,40	141,47	107,37	27,29	-49,32	73,67	-20,124
900	74,90	150,03	111,64	34,55	-49,95	89,09	-21,633
1000	78,90	158,13	115,89	42,25	-50,31	104,57	-22,853

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 504,6^\circ K$, $P_c = 30,8$ атм и $dc = 0,235$ г/см³. $T_b = 336,43^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 6,711$ ккал/моль.

№ 112. 2,2-Диметилбутан, C_6H_{14} (состояние идеального газа). Мол. вес 86,172

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	33,91	85,62	85,62	0,00	-44,35	-2,30	1,689
300	34,09	85,84	85,63	0,07	-44,40	-2,05	1,491
400	43,70	96,98	87,08	3,96	-46,85	12,46	-6,807
500	52,50	107,70	90,14	8,78	-48,83	27,52	-12,030
600	60,00	117,95	93,93	14,42	-50,36	42,94	-15,639
700	66,10	127,67	98,06	20,73	-51,50	58,59	-18,291
800	71,40	136,86	102,34	27,62	-52,32	74,36	-20,313
900	75,60	145,51	106,66	34,97	-52,86	90,24	-21,912
1000	79,70	153,69	110,96	42,73	-53,15	106,17	-23,202

Приняты результаты низкотемпературных измерений Килпатрика и Питцера [750], а также значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], $T_m = 125,81^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 1,289$ ккал/моль, $T_i = 140,87^\circ K$, $\Delta H_i^\circ = 0,068$ ккал/моль, $T_m = 173,28^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 0,138$ ккал/моль и $T_b = 322,89^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 6,289$ ккал/моль. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 489,3^\circ K$, $P_c = 30,7$ атм и $dc = 0,240$ г/см³.

№ 113. 2,3-Диметилбутан, C_6H_{14} (состояние идеального газа). Мол. вес 86,172

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	33,59	87,42	87,42	0,00	-42,49	-0,98	0,719
300	33,76	87,63	87,43	0,07	-42,54	-0,73	0,529
400	43,30	98,67	88,87	3,93	-45,02	13,60	-7,433
500	51,90	109,28	91,90	8,70	-47,05	28,50	-12,458
600	59,20	119,41	95,65	14,26	-48,66	43,77	-15,941
700	65,40	129,01	99,73	20,50	-49,87	59,28	-18,506
800	70,70	138,10	103,97	27,31	-50,76	74,92	-20,466
900	75,20	146,69	108,24	34,61	-51,36	90,68	-22,018
1000	79,10	154,82	112,50	42,33	-51,69	106,49	-23,273

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 144,61^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 0,194 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 331,14^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 6,519 \text{ ккал/моль}$. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 500,2^\circ \text{K}$, $P_c = 30,9 \text{ атм}$ и $d_c = 0,241 \text{ г/см}^3$.

№ 114. Гептан, C_7H_{16} (состояние идеального газа). Мол. вес 100,198

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	39,67	102,27	102,27	0,00	-44,88	1,91	-1,402
300	39,86	102,52	102,28	0,08	-44,94	2,20	-1,602
400	50,42	115,46	103,97	4,60	-47,70	18,35	-10,025
500	60,07	127,77	107,51	10,14	-49,98	35,13	-15,355
600	68,33	139,47	111,87	16,57	-51,80	52,32	-19,058
700	75,38	150,55	116,61	23,76	-53,18	69,80	-21,792
800	81,43	161,01	121,51	31,61	-54,20	87,43	-23,883
900	86,68	170,92	126,46	40,02	-54,88	105,19	-25,541
1000	91,20	180,29	131,38	48,92	-55,26	123,01	-26,882

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248] с учетом результатов измерений Хаффмана, Гросса, Скотта и Мак-Каллоха [654]. $T_m = 182,54^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 3,354 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 371,58^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 7,575 \text{ ккал/моль}$. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 540,1^\circ \text{K}$, $P_c = 27,0 \text{ атм}$ и $d_c = 0,235 \text{ г/см}^3$.

№ 115. 2-Метилгексан, C_7H_{16} (состояние идеального газа). Мол. вес 100,198

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	39,67	100,38	100,38	0,00	-46,59	0,77	-0,562
300	39,86	100,63	100,39	0,08	-46,65	1,06	-0,770
400	50,42	113,57	102,08	4,60	-49,41	17,39	-9,503
500	60,07	125,88	105,62	10,14	-51,69	34,37	-15,021
600	68,33	137,58	109,98	16,57	-53,51	51,75	-18,848
700	75,38	148,66	114,72	23,76	-54,89	69,41	-21,671
800	81,43	159,12	119,62	31,61	-55,91	87,23	-23,829
900	86,68	169,03	124,57	40,02	-56,59	105,18	-25,539
1000	91,20	178,40	129,49	48,92	-56,97	123,19	-26,921

Значения, принятые Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], находятся в соответствии с результатами измерений Хаффмана, Гросса, Скотта и Мак-Каллоха [654]. $T_m = 154,87^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,195 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 363,20^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 7,329 \text{ ккал/моль}$. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 531,0^\circ \text{K}$, $P_c = 27,2 \text{ атм}$ и $d_c = 0,234 \text{ г/см}^3$.

№ 116. 3-Метилгексан, C_7H_{16} (состояние идеального газа). Мол. вес 100,198

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	39,67	101,37	101,37	0,00	-45,96	1,10	-0,807
300	39,86	101,62	101,38	0,08	-46,02	1,39	-1,012
400	50,42	114,56	103,07	4,60	-48,78	17,63	-9,631
500	60,07	126,87	106,61	10,14	-51,06	34,50	-15,080
600	68,33	138,57	110,97	16,57	-52,88	51,78	-18,861
700	75,38	149,65	115,71	23,76	-54,26	69,35	-21,651
800	81,43	160,11	120,61	31,61	-55,28	87,07	-23,785
900	86,68	170,02	125,56	40,02	-55,96	104,92	-25,476
1000	91,20	179,39	130,48	48,92	-56,34	122,83	-26,842

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], $T_b = 365,00^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 7,358 \text{ ккал/моль}$. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 535,5^\circ \text{K}$, $P_c = 28,1 \text{ атм}$ и $d_c = 0,240 \text{ г/см}^3$.

№ 117. 3-Этилпентан, C_7H_{16} (состояние идеального газа). Мол. вес 100,198

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	39,67	98,35	98,35	0,00	-45,33	2,63	-1,929
300	39,86	98,60	98,36	0,08	-45,39	2,93	-2,131
400	50,42	111,54	100,05	4,60	-48,15	19,47	-10,636
500	60,07	123,85	103,59	10,14	-50,43	36,64	-16,015
600	68,33	135,55	107,95	16,57	-52,25	54,23	-19,751
700	75,38	146,63	112,69	23,76	-53,63	72,09	-22,508
800	81,43	157,09	117,59	31,61	-54,65	90,11	-24,617
900	86,68	167,00	122,54	40,02	-55,33	108,26	-26,289
1000	91,20	176,37	127,46	48,92	-55,71	126,48	-27,640

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248] и частично основывающиеся на результатах измерений Хаффмана, Гросса, Скотта и Мак-Каллоха [654]; $T_m = 154,55^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 2,282$ ккал/моль и $T_b = 366,62^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 7,398$ ккал/моль. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 540,7^\circ K$, $P_c = 28,6$ атм и $d_c = 0,241$ г/см³.

№ 118. 2,2-Диметилпентан, C_7H_{16} (состояние идеального газа). Мол. вес 100,198

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	39,67	93,90	93,90	0,00	-49,27	0,02	-0,014
300	39,86	94,15	93,91	0,08	-49,33	0,32	-0,233
400	50,42	107,09	95,60	4,60	-52,09	17,31	-9,455
500	60,07	119,40	99,14	10,14	-54,37	34,93	-15,266
600	68,33	131,10	103,50	16,57	-56,19	52,96	-19,288
700	75,38	142,18	108,24	23,76	-57,57	71,27	-22,250
800	81,43	152,64	113,14	31,61	-58,59	89,73	-24,513
900	86,68	162,55	118,09	40,02	-59,27	108,33	-26,304
1000	91,20	171,92	123,01	48,92	-59,65	126,99	-27,752

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248] и частично основывающиеся на результатах измерений Хаффмана, Гросса, Скотта и Мак-Каллоха [654]. $T_m = 149,34^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 1,392$ ккал/моль и $T_b = 352,35^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 6,969$ ккал/моль. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 520,8^\circ K$, $P_c = 28,4$ атм и $d_c = 0,248$ г/см³.

№ 119. 2,3-Диметилпентан, C_7H_{16} (состояние идеального газа). Мол. вес 100,198

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	39,67	98,96	98,96	0,00	-47,62	0,16	-0,117
300	39,86	99,21	98,97	0,08	-47,68	0,45	-0,330
400	50,42	112,15	100,66	4,60	-50,44	16,93	-9,251
500	60,07	124,46	104,20	10,14	-52,72	34,05	-14,881
600	68,33	136,16	108,56	16,57	-54,54	51,57	-18,783
700	75,38	147,24	113,30	23,76	-55,92	69,38	-21,660
800	81,43	157,70	118,20	31,61	-56,94	87,34	-23,858
900	86,68	167,61	123,15	40,02	-57,62	105,42	-25,599
1000	91,20	176,98	128,07	48,92	-58,00	123,58	-27,006

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_b = 362,93^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 7,262$ ккал/моль. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 537,7^\circ K$, $P_c = 29,2$ атм и $d_c = 0,247$ г/см³.

№ 120. 2,4-Диметилпентан, C_7H_{16} (состояние идеального газа). Мол. вес 100,198

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	39,67	94,80	94,80	0,00	-48,28	0,74	-0,543
300	39,86	95,05	94,81	0,08	-48,34	1,04	-0,758
400	50,42	107,99	96,50	4,60	-51,10	17,94	-9,800
500	60,07	120,30	100,04	10,14	-53,38	35,47	-15,502
600	68,33	132,00	104,40	16,57	-55,20	53,41	-19,452
700	75,38	143,08	109,14	23,76	-56,58	71,63	-22,363
800	81,43	153,54	114,04	31,61	-57,60	90,00	-24,587
900	86,68	163,45	118,99	40,02	-58,28	108,51	-26,348
1000	91,20	172,82	123,91	48,92	-58,66	127,08	-27,771

Результаты измерений Хаффмана, Гросса, Скотта и Мак-Каллоха [654] учтены в данных, отобранных Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 153,91^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 1,635$ ккал/моль и $T_b = 353,65^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 7,050$ ккал/моль. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 520,2^\circ K$, $P_c = 27,4$ атм и $d_c = 0,239$ г/см³.

№ 121. 3,3-Диметилпентан, C_7H_{16} (состояние идеального газа). Мол. вес 100,198

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	39,67	95,53	95,53	0,00	-48,17	0,63	-0,464
300	39,86	95,78	95,54	0,08	-48,23	0,93	-0,678
400	50,42	108,72	97,23	4,60	-50,99	17,75	-9,700
500	60,07	121,03	100,77	10,14	-53,27	35,21	-15,390
600	68,33	132,73	105,13	16,57	-55,09	53,08	-19,333
700	75,38	143,81	109,87	23,76	-56,47	71,23	-22,237
800	81,43	154,27	114,77	31,61	-57,49	89,53	-24,457
900	86,68	164,18	119,72	40,02	-58,17	107,96	-26,215
1000	91,20	173,55	124,64	48,92	-58,55	126,46	-27,636

Приняты значения Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $Tt = 137,79^\circ K$, $Tt = 138,20^\circ K$, $Tm = 138,69^\circ K$, $\Delta Hm^\circ = 1,689$ ккал/моль и $Tb = 359,21^\circ K$, при этом $\Delta Hv = 7,058$ ккал/моль. По данным Кубе и Линна [780], $Tc = 536^\circ K$ и $Pc = 36$ атм.

№ 122. 2,2,3-Триметилбутан, C_7H_{16} (состояние идеального газа). Мол. вес 100,198

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	39,33	91,61	91,61	0,00	-48,95	1,02	-0,749
300	39,54	91,86	91,62	0,08	-49,01	1,33	-0,967
400	50,83	104,81	93,30	4,61	-51,76	18,54	-10,131
500	61,04	117,28	96,86	10,21	-53,97	36,39	-15,903
600	69,61	129,18	101,26	16,76	-55,67	54,62	-19,893
700	76,74	140,46	106,07	24,08	-56,92	73,11	-22,825
800	82,73	151,11	111,04	32,06	-57,81	91,74	-25,060
900	87,88	161,16	116,05	40,60	-58,37	110,48	-26,826
1000	92,32	170,66	121,04	49,62	-58,64	129,27	-28,250

В работе Хаффмана, Гросса, Скотта и Мак-Каллоха [654] было установлено сложное поведение этого соединения в условиях низких температур. При повышении температуры, начиная с $10^\circ K$, было обнаружено два неизотермических перехода [$C_p = 39,00$ кал/(моль \times $^\circ K$) при $86,8^\circ K$ и $C_p = 50,13$ кал/(моль \cdot $^\circ K$) при $108,0^\circ K$], после чего следовал изотермический переход при $Tt = 121,4^\circ K$, $\Delta Ht^\circ = 0,586$ ккал/моль и, наконец, плавление при $Ttp = 248,56^\circ K$,

$\Delta Hm^\circ = 0,540$ ккал/моль, $Tb = 354,02^\circ K$, при этом $\Delta Hv = 6,918$ ккал/моль. По данным Кубе и Линна [780], $Tc = 531,4^\circ K$, $Pc = 29,75$ атм и $dc = 0,254$ г/см³.

№ 123. Октан, C_8H_{18} (состояние идеального газа). Мол. вес 114,224

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	45,14	111,55	111,55	0,00	-49,82	3,92	-2,872
300	45,35	111,83	111,56	0,09	-49,89	4,25	-3,093
400	57,36	126,55	113,48	5,23	-52,96	22,78	-12,445
500	68,32	140,56	117,51	11,53	-55,50	42,02	-18,364
600	77,67	153,86	122,47	18,84	-57,51	61,71	-22,475
700	85,66	166,45	127,86	27,02	-59,04	81,71	-25,511
800	92,50	178,34	133,43	35,93	-60,16	101,88	-27,832
900	98,43	189,59	139,05	45,49	-60,90	122,20	-29,672
1000	103,60	200,23	144,64	55,59	-61,29	142,58	-31,160

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $Tm = 216,36^\circ K$, $\Delta Hm^\circ = 4,957$ ккал/моль и $Tb = 398,81^\circ K$, при этом $\Delta Hv = 8,224$ ккал/моль. Согласно измерениям Амброза, Кокса и Таунсенда [13], $Tc = 568,5^\circ K$.

№ 124. 2-Метилпентан, C_8H_{18} (состояние идеального газа). Мол. вес 114,224

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	45,14	108,81	108,81	0,00	-51,50	3,05	-2,239
300	45,35	109,09	108,82	0,09	-51,57	3,39	-2,468
400	57,36	123,81	110,74	5,23	-54,64	22,19	-12,125
500	68,32	137,82	114,77	11,53	-57,18	41,71	-18,228
600	77,67	151,12	119,73	18,84	-59,19	61,67	-22,462
700	85,66	163,71	125,12	27,02	-60,72	81,95	-25,585
800	92,50	175,60	130,69	35,93	-61,84	102,40	-27,972
900	98,43	186,85	136,31	45,49	-62,58	122,98	-29,863
1000	103,60	197,49	141,90	55,59	-62,97	143,64	-31,391

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $Tm = 164,11^\circ K$, $\Delta Hm^\circ = 2,45$ ккал/моль и $Tb = 390,80^\circ K$, при этом $\Delta Hv = 8,08$ ккал/моль. Согласно измерениям Амброза, Кокса и Таунсенда [13], $Tc = 559,5^\circ K$.

№ 125. 3-Метилгептан, C₈H₁₈ (состояние идеального газа). Мол. вес 114,224

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	45,14	110,32	110,32	0,00	-50,82	3,28	-2,407
300	45,35	110,60	110,33	0,09	-50,89	3,62	-2,634
400	57,36	125,32	112,25	5,23	-53,96	22,27	-12,167
500	68,32	139,33	116,28	11,53	-56,50	41,63	-18,196
600	77,67	152,63	121,24	18,84	-58,51	61,44	-22,380
700	85,66	165,22	126,63	27,02	-60,04	81,57	-25,467
800	92,50	177,11	132,20	35,93	-61,16	101,87	-27,828
900	98,43	188,36	137,82	45,49	-61,90	122,31	-29,698
1000	103,60	199,00	143,41	55,59	-62,29	142,81	-31,210

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 152,65^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,72 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 392,07^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,10 \text{ ккал/моль}$.

№ 126. 4-Метилгептан, C₈H₁₈ (состояние идеального газа). Мол. вес 114,224

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	45,14	108,35	108,35	0,00	-50,69	4,60	-2,933
300	45,35	108,63	108,36	0,09	-50,76	4,34	-3,159
400	57,36	123,35	110,28	5,23	-53,83	23,19	-12,669
500	68,32	137,36	114,31	11,53	-56,37	42,75	-18,683
600	77,67	150,66	119,27	18,84	-58,38	62,76	-22,858
700	85,66	163,25	124,66	27,02	-59,91	83,08	-25,938
800	92,50	175,14	130,23	35,93	-61,03	103,57	-28,294
900	98,43	186,39	135,85	45,49	-61,77	124,21	-30,161
1000	103,60	197,03	141,44	55,59	-62,16	144,91	-31,669

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 152,20^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,59 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 390,86^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,100 \text{ ккал/моль}$.

№ 127. 3-Этилгексан, C₈H₁₈ (состояние идеального газа). Мол. вес 114,224

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_b = 391,68^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,032 \text{ ккал/моль}$.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	45,14	109,51	109,51	0,00	-50,40	3,95	-2,892
300	45,35	109,79	109,52	0,09	-50,47	4,28	-3,117
400	57,36	124,51	111,44	5,23	-53,54	23,01	-12,573
500	68,32	138,52	115,47	11,53	-56,08	42,46	-18,556
600	77,67	151,82	120,43	18,84	-58,09	62,35	-22,710
700	85,66	164,41	125,82	27,02	-59,62	82,56	-25,775
800	92,50	176,30	131,39	35,93	-60,74	102,94	-28,119
900	98,43	187,55	137,01	45,49	-61,48	123,45	-29,977
1000	103,60	198,19	142,60	55,59	-61,87	144,04	-31,479

№ 128. 2,2-Диметилгексан, C₈H₁₈ (состояние идеального газа). Мол. вес 114,224

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	45,14	103,06	103,06	0,00	-53,71	2,56	-1,876
300	45,35	103,34	103,07	0,09	-53,78	2,90	-2,115
400	57,36	118,06	104,99	5,23	-56,85	22,28	-12,175
500	68,32	132,07	109,02	11,53	-59,39	42,37	-18,519
600	77,67	145,37	113,98	18,84	-61,40	62,91	-22,914
700	85,66	157,96	119,37	27,02	-62,93	83,77	-26,152
800	92,50	169,85	124,94	35,93	-64,05	104,79	-28,625
900	98,43	181,10	130,56	45,49	-64,79	125,95	-30,583
1000	103,60	191,74	136,15	55,59	-65,18	147,18	-32,165

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], $T_m = 151,97^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,62 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 379,99^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 7,71 \text{ ккал/моль}$.

№ 129. 2,3-Диметилгексан, C₈H₁₈ (состояние идеального газа). Мол. вес 114,224

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_b = 388,76^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 7,935 \text{ ккал/моль}$.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	45,14	106,11	106,11	0,00	-51,13	4,23	-3,100
300	45,35	106,39	106,12	0,09	-51,20	4,57	-3,328
400	57,36	121,11	108,04	5,23	-54,27	23,64	-12,918
500	68,32	135,12	112,07	11,53	-56,81	43,43	-18,980
600	77,67	148,42	117,03	18,84	-58,82	63,66	-23,187
700	85,66	161,01	122,42	27,02	-60,35	84,21	-26,290
800	92,50	172,90	127,99	35,93	-61,47	104,93	-28,663
900	98,43	184,15	133,61	45,49	-62,21	125,78	-30,543
1000	103,60	194,79	139,20	55,59	-62,60	146,71	-32,062

№ 130. 2,4-Диметилгексан, C₈H₁₈ (состояние идеального газа). Мол. вес 114,224

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	45,14	106,51	106,51	0,00	-52,44	2,80	-2,053
300	45,35	106,79	106,52	0,09	-52,51	3,14	-2,286
400	57,36	121,51	108,44	5,23	-55,58	22,17	-12,115
500	68,32	135,52	112,47	11,53	-58,12	41,92	-18,320
600	77,67	148,82	117,43	18,84	-60,13	62,11	-22,623
700	85,66	161,41	122,82	27,02	-61,66	82,62	-25,794
800	92,50	173,30	128,39	35,93	-62,78	103,30	-28,218
900	98,43	184,55	134,01	45,49	-63,52	124,11	-30,138
1000	103,60	195,49	139,60	55,59	-63,91	145,00	-31,689

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 382,58° K, при этом ΔH_v = 7,79 ккал/моль.

№ 131. 2,5-Диметилгексан, C₈H₁₈ (состояние идеального газа). Мол. вес. 114,224

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	45,14	104,93	104,93	0,00	-53,21	2,50	-1,833
300	45,35	105,21	104,94	0,09	-53,28	2,84	-2,071
400	57,36	119,93	106,86	5,23	-56,35	22,04	-12,039
500	68,32	133,94	110,89	11,53	-58,89	41,94	-18,329
600	77,67	147,24	115,85	18,84	-60,90	62,29	-22,687
700	85,66	159,83	121,24	27,02	-62,43	82,96	-25,899
800	92,50	171,72	126,81	35,93	-63,55	103,79	-28,353
900	98,43	182,97	132,43	45,49	-64,29	124,77	-30,296
1000	103,60	193,61	138,02	55,59	-64,68	145,81	-31,866

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 181,95° K, ΔH_m^o = 3,07 ккал/моль и T_b = 382,25° K, при этом ΔH_v = 7,80 ккал/моль.

№ 132. 3,3-Диметилгексан, C₈H₁₈ (состояние идеального газа). Мол. вес 114,224

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	45,14	104,70	104,70	0,00	-52,61	3,17	-2,324
300	45,35	104,98	104,71	0,09	-52,68	3,51	-2,558
400	57,36	119,70	106,63	5,23	-55,75	22,73	-12,417
500	68,32	133,71	110,66	11,53	-58,29	42,65	-18,642
600	77,67	147,01	115,62	18,84	-60,30	63,03	-22,956
700	85,66	159,60	121,01	27,02	-61,83	83,72	-26,137
800	92,50	171,49	126,58	35,93	-62,95	104,57	-28,567
900	98,43	182,74	132,20	45,49	-63,69	125,57	-30,492
1000	103,60	193,38	137,79	55,59	-64,08	146,64	-32,047

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 147,05° K, ΔH_m^o = 1,7 ккал/моль и T_b = 385,12° K, при этом ΔH_v = 7,76 ккал/моль.

№ 133. 3,4-Диметилгексан, C₈H₁₈ (состояние идеального газа). Мол. вес 114,224

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	45,14	107,15	107,15	0,00	-50,91	4,14	-3,034
300	45,35	107,43	107,16	0,09	-50,98	4,48	-3,261
400	57,36	122,15	109,08	5,23	-54,05	23,45	-12,811
500	68,32	136,16	113,11	11,53	-56,59	43,13	-18,849
600	77,67	149,46	118,07	18,84	-58,60	63,26	-23,040
700	85,66	162,05	123,46	27,02	-60,13	83,70	-26,132
800	92,50	173,94	129,03	35,93	-61,25	104,31	-28,496
900	98,43	185,19	134,65	45,49	-61,99	125,07	-30,369
1000	103,60	195,83	140,24	55,59	-62,38	145,89	-31,883

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_b = 390,87° K, при этом ΔH_v = 7,952 ккал/моль.

№ 134. 3-Этил-2-метилпентан, C_8H_{18} (состояние идеального газа).
Мол. вес 114,224

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	45,14	105,43	105,43	0,00	-50,48	5,08	-3,725
300	45,35	105,71	105,44	0,09	-50,55	5,42	-3,950
400	57,36	120,43	107,36	5,23	-53,62	24,57	-13,421
500	68,32	134,44	111,39	11,53	-56,16	44,42	-19,413
600	77,67	147,74	116,35	18,84	-58,17	64,72	-23,573
700	85,66	160,33	121,74	27,02	-59,70	85,34	-26,642
800	92,50	172,22	127,31	35,93	-60,82	106,12	-28,989
900	98,43	183,47	132,93	45,49	-61,56	127,05	-30,850
1000	103,60	194,11	138,52	55,59	-61,95	148,04	-32,353

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 258,19^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 2,71$ ккал/моль и $T_b = 388,80^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 7,878$ ккал/моль.

№ 135. 3-Этил-3-метилпентан, C_8H_{18} (состояние идеального газа).
Мол. вес 114,224

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	45,14	103,48	103,48	0,00	-51,38	4,76	-3,492
300	45,35	103,76	103,49	0,09	-51,45	5,11	-3,721
400	57,36	118,48	105,41	5,23	-54,52	24,45	-13,356
500	68,32	132,49	109,44	11,53	-57,06	44,49	-19,446
600	77,67	145,79	114,40	18,84	-59,07	64,99	-23,671
700	85,66	158,38	119,79	27,02	-60,60	85,80	-26,787
800	92,50	170,27	125,36	35,93	-61,72	106,78	-29,170
900	98,43	181,52	130,98	45,49	-62,46	127,90	-31,057
1000	103,60	192,16	136,57	55,59	-62,85	149,09	-32,582

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 182,28^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 2,59$ ккал/моль и $T_b = 391,41^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 7,837$ ккал/моль.

№ 136. 2,2,3-Триметилпентан, C_8H_{18} (состояние идеального газа).
Мол. вес 114,224

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 160,88^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 2,06$ ккал/моль и $T_b = 382,99^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 7,65$ ккал/моль.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	45,14	101,62	101,62	0,00	-52,61	4,09	-2,997
300	45,35	101,90	101,63	0,09	-52,68	4,44	-3,231
400	57,36	116,62	103,55	5,23	-55,75	23,96	-13,090
500	68,32	130,63	107,58	11,53	-58,29	44,19	-19,315
600	77,67	143,93	112,54	18,84	-60,30	64,87	-23,629
700	85,66	156,52	117,93	27,02	-61,83	85,87	-26,810
800	92,50	168,41	123,50	35,93	-62,95	107,04	-29,240
900	98,43	179,66	129,12	45,49	-63,69	128,35	-31,165
1000	103,60	190,30	134,71	55,59	-64,08	149,72	-32,720

№ 137. 2,2,4-Триметилпентан, C_8H_{18} (состояние идеального газа).
Мол. вес 114,224

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	45,14	101,15	101,15	0,00	-53,57	3,27	-2,396
300	45,35	101,43	101,16	0,09	-53,64	3,62	-2,634
400	57,36	116,15	103,08	5,23	-56,71	23,19	-12,669
500	68,32	130,16	107,11	11,53	-59,25	43,47	-18,998
600	77,67	143,46	112,07	18,84	-61,26	64,20	-23,382
700	85,66	156,05	117,46	27,02	-62,79	85,24	-26,613
800	92,50	167,94	123,03	35,93	-63,91	106,45	-29,081
900	98,43	179,19	128,65	45,49	-64,65	127,81	-31,035
1000	103,60	189,83	134,24	55,59	-65,04	149,23	-32,613

Приняты результаты низкотемпературных измерений Питцера [1152] и значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 165,77^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 2,202$ ккал/моль и $T_b = 372,39^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 7,410$ ккал/моль. Согласно измерениям Амброза, Кокса и Таунсенда [13], $T_c = 543,6^\circ K$.

№ 138. 2,3,3-Триметилпентан, C_8H_{18} (состояние идеального газа).
Мол. вес 114,224

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 172,45^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 0,37$ ккал/моль и $T_b = 387,91^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 7,73$ ккал/моль.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	45,14	103,14	103,14	0,00	-51,73	4,52	-3,309
300	45,35	103,42	103,15	0,09	-51,80	4,86	-3,540
400	57,36	118,14	105,07	5,23	-54,87	24,23	-13,239
500	68,32	132,15	109,10	11,53	-57,41	44,31	-19,367
600	77,67	145,45	114,06	18,84	-59,42	64,84	-23,618
700	85,66	158,04	119,45	27,02	-60,95	85,69	-26,752
800	92,50	169,93	125,02	35,93	-62,07	106,70	-29,148
900	98,43	181,18	130,64	45,49	-62,81	127,86	-31,047
1000	103,60	191,82	136,23	55,59	-63,20	149,08	-32,580

№ 139. 2,3,4-Триметилпентан, C₈H₁₈ (состояние идеального газа).
Мол. вес 114,224

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	45,14	102,31	102,31	0,00	-51,97	4,52	-3,315
300	45,35	102,59	102,32	0,09	-52,04	4,87	-3,546
400	57,36	117,31	104,24	5,23	-55,11	24,32	-13,289
500	68,32	131,32	108,27	11,53	-57,65	44,49	-19,444
600	77,67	144,62	113,23	18,84	-59,66	65,10	-23,712
700	85,66	157,21	118,62	27,02	-61,19	86,03	-26,859
800	92,50	169,10	124,19	35,93	-62,31	107,13	-29,264
900	98,43	180,35	129,81	45,49	-63,05	128,36	-31,170
1000	103,60	190,99	135,40	55,59	-63,44	149,67	-32,709

Значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], учитывают результаты низкотемпературных измерений, выполненных Питцером и Скоттом [1165], которые предложили простую полуэмпирическую формулу для расчета энтропии больших углеводородных молекул с разветвленной цепью. $T_t = 163,94^\circ \text{K}$, $\Delta H_t^\circ = 2,215 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 386,62^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 7,822 \text{ ккал/моль}$.

№ 140. 2,2,3,3-Тетраметилбутан, C₈H₁₈ (состояние идеального газа).
Мол. вес 114,224

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	46,03	93,06	93,06	0,00	-53,99	5,26	-3,856
300	46,29	93,35	93,07	0,09	-54,05	5,62	-4,096
400	59,88	108,57	95,05	5,41	-56,95	25,98	-14,194
500	71,76	123,25	99,23	12,01	-59,19	46,98	-20,535
600	81,52	137,22	104,41	19,69	-60,83	68,37	-24,903
700	89,52	150,40	110,05	28,25	-61,97	90,01	-28,101
800	96,18	162,80	115,87	37,55	-62,71	111,76	-30,530
900	101,80	174,46	121,74	47,45	-63,10	133,61	-32,443
1000	106,60	185,45	127,57	57,88	-63,18	155,49	-33,980

Приняты значения, надежно установленные в исчерпывающей работе Скотта, Доуслина, Гросса, Оливера и Хаффмана [1300]. Энтальпия образования рассчитана Прозеном и Россини [1202]. $T_t = 152,5^\circ \text{K}$, $\Delta H_t^\circ = 0,478 \text{ ккал/моль}$, $T_{tp} = 373,96^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,802 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 379,62^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 7,51 \text{ ккал/моль}$.

№ 141. Нонан, C₉H₂₀ (состояние идеального газа). Мол. вес 128,250.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	50,60	120,86	120,86	0,00	-54,74	5,93	-4,349
300	50,85	121,18	120,87	0,10	-54,81	6,30	-4,593
400	64,30	137,68	123,02	5,87	-58,21	27,21	-14,869
500	76,56	153,38	127,54	12,92	-61,00	48,90	-21,375
600	87,01	168,28	133,10	21,12	-63,21	71,09	-25,894
700	95,93	182,38	139,14	30,27	-64,88	93,62	-29,229
800	103,56	195,70	145,39	40,26	-66,10	116,34	-31,780
900	110,17	208,29	151,68	50,95	-66,90	139,21	-33,802
1000	115,90	220,20	157,94	62,26	-67,31	162,15	-35,436

Низкотемпературные измерения, выполненные Финком, Гроссом, Уаддингтоном и Хаффманом [420], использованы в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_t = 217,2^\circ \text{K}$, $\Delta H_t^\circ = 1,501 \text{ ккал/моль}$, $T_m = 219,63^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 3,697 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 423,95^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 9,030 \text{ ккал/моль}$. Согласно измерениям Амброза, Кюкса и Тоунсенда [13], $T_c = 594,6^\circ \text{K}$.

№ 142. 2-Метилоттан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	51,88	118,52	118,52	0,00	-56,45	4,92	-3,607
300	52,12	118,85	118,53	0,10	-56,52	5,30	-3,858
400	65,26	135,67	120,73	5,98	-59,80	26,42	-14,436
500	77,24	151,55	125,32	13,12	-62,52	48,30	-21,112
600	87,63	166,57	130,96	21,37	-64,66	70,67	-25,739
700	96,44	180,76	137,07	30,59	-66,28	93,37	-29,149
800	103,93	194,14	143,37	40,62	-67,45	116,24	-31,753
900	110,32	206,75	149,72	51,34	-68,22	139,26	-33,816
1000	116,04	218,68	156,03	62,66	-68,62	162,36	-35,481

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], $T_m = 192,75^\circ \text{K}$ и $T_b = 416,41^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,76$ ккал/моль.

№ 143. 3-Метилоттан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	50,81	119,90	119,90	0,00	-55,77	5,19	-3,804
300	51,05	120,22	119,91	0,10	-55,84	5,56	-4,052
400	64,67	136,80	122,08	5,90	-59,21	26,56	-14,513
500	76,91	152,58	126,61	12,99	-61,97	48,34	-21,127
600	87,47	167,56	132,20	21,22	-64,14	70,60	-25,715
700	96,36	181,73	138,27	30,43	-65,76	93,20	-29,097
800	103,89	195,10	144,55	40,45	-66,94	115,98	-31,682
900	110,31	207,72	150,87	51,16	-67,71	138,90	-33,729
1000	116,04	219,64	157,16	62,49	-68,12	161,90	-35,382

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], $T_m = 165,55^\circ \text{K}$ и $T_b = 417,36^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,79$ ккал/моль.

№ 144. 4-Метилоттан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	50,81	119,90	119,90	0,00	-55,77	5,19	-3,804
300	51,05	120,22	119,91	0,10	-55,84	5,56	-4,052
400	64,67	136,80	122,08	5,90	-59,21	26,56	-14,513
500	76,91	152,58	126,61	12,99	-61,97	48,34	-21,127
600	87,47	167,56	132,20	21,22	-64,14	70,60	-25,715
700	96,36	181,73	138,27	30,43	-65,76	93,20	-29,097
800	103,89	195,10	144,55	40,45	-66,94	115,98	-31,682
900	110,31	207,72	150,87	51,16	-67,71	138,90	-33,729
1000	116,04	219,64	157,16	62,49	-68,12	161,90	-35,382

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 159,9^\circ \text{K}$ и $T_b = 415,57^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,75$ ккал/моль.

№ 145. 3-Этилгептан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	49,74	118,52	118,52	0,00	-55,08	6,29	-4,611
300	49,98	118,83	118,53	0,10	-55,15	6,67	-4,856
400	64,08	135,18	120,66	5,81	-58,60	27,82	-15,200
500	76,58	150,86	125,14	12,86	-61,40	49,76	-21,749
600	87,31	165,79	130,68	21,07	-63,60	72,20	-26,297
700	96,28	179,94	136,72	30,26	-65,23	94,98	-29,652
800	103,85	193,31	142,97	40,28	-66,42	117,93	-32,216
900	110,30	205,92	149,27	50,99	-67,20	141,04	-34,247
1000	116,04	217,84	155,53	62,31	-67,60	164,22	-35,888

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_b = 416,1^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,78$ ккал/моль.

№ 146. 4-Этилгептан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	49,74	118,52	118,52	0,00	-55,08	6,29	-4,611
300	49,98	118,83	118,53	0,10	-55,15	6,67	-4,856
400	64,08	135,18	120,66	5,81	-58,60	27,82	-15,200
500	76,58	150,86	125,14	12,86	-61,40	49,76	-21,749
600	87,31	165,79	130,68	21,07	-63,60	72,20	-26,297
700	96,28	179,94	136,72	30,26	-65,23	94,98	-29,652
800	103,85	193,31	142,97	40,28	-66,42	117,93	-32,216
900	110,30	205,92	149,27	50,99	-67,20	141,04	-34,247
1000	116,04	217,84	155,53	62,31	-67,60	164,22	-35,888

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_b = 414,3^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 8,76$ ккал/моль.

№ 147. 2,2-Диметилгептан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	52,01	113,07	113,07	0,00	-59,00	4,00	-2,929
300	52,25	113,40	113,08	0,10	-59,07	4,38	-3,192
400	66,16	130,37	115,30	6,03	-62,30	26,05	-14,230
500	78,66	146,51	119,94	13,29	-64,89	48,44	-21,174
600	89,17	161,81	125,65	21,70	-66,89	71,30	-25,969
700	97,94	176,23	131,86	31,06	-68,35	94,46	-29,491
800	105,36	189,80	138,26	41,24	-69,38	117,78	-32,173
900	111,66	202,58	144,71	52,09	-70,01	141,22	-34,292
1000	117,33	214,65	151,10	63,55	-70,28	164,73	-36,000

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 160,15^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 2,14$ ккал/моль и $T_b = 405,84^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 8,31$ ккал/моль.

№ 148. 2,3-Диметилгептан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	50,30	116,79	116,79	0,00	-56,32	5,57	-4,080
300	50,53	117,11	116,80	0,10	-56,39	5,95	-4,331
400	64,53	133,60	118,95	5,87	-59,79	27,26	-14,896
500	76,84	149,35	123,47	12,95	-62,56	49,36	-21,573
600	87,50	164,33	129,04	21,18	-64,73	71,94	-26,204
700	96,43	178,51	135,11	30,39	-66,35	94,87	-29,618
800	103,97	191,89	141,38	40,42	-67,52	117,97	-32,225
900	110,41	204,51	147,70	51,14	-68,29	141,21	-34,290
1000	116,09	216,45	153,98	62,47	-68,68	164,53	-35,957

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_b = 413,6^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 8,63$ ккал/моль.

№ 149. 2,4-Диметилгептан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	49,25	116,79	116,79	0,00	-57,48	4,41	-3,23
300	49,48	117,10	116,80	0,10	-57,55	4,79	-3,486
400	63,96	133,36	118,92	5,78	-61,03	26,12	-14,270
500	76,53	149,02	123,38	12,82	-63,84	48,24	-21,085
600	87,37	163,96	128,91	21,03	-66,03	70,86	-25,811
700	96,40	178,12	134,94	30,23	-67,66	93,83	-29,292
800	103,99	191,50	141,18	40,26	-68,83	116,96	-31,951
900	110,45	204,13	147,48	50,99	-69,60	140,25	-34,055
1000	116,12	216,07	153,75	62,33	-69,99	163,60	-35,754

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_b = 406,04^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 8,45$ ккал/моль.

№ 150. 2,5-Диметилгептан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	49,25	116,79	116,79	0,00	-57,48	4,41	-3,230
300	49,48	117,10	116,80	0,10	-57,55	4,79	-3,486
400	63,96	133,36	118,92	5,78	-61,03	26,12	-14,270
500	76,53	149,02	123,38	12,82	-63,84	48,24	-21,085
600	87,37	163,96	128,91	21,03	-66,03	70,86	-25,811
700	96,40	178,12	134,94	30,23	-67,66	93,83	-29,292
800	103,99	191,50	141,18	40,26	-68,83	116,96	-31,951
900	110,45	204,13	147,48	50,99	-69,60	140,25	-34,055
1000	116,12	216,07	153,75	62,33	-69,99	163,60	-35,754

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_b = 409,1^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,51$ ккал/моль.

№ 151. 2,6-Диметилгептан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	50,32	114,03	114,03	0,00	-58,17	4,54	-3,327
300	50,55	114,35	114,04	0,10	-58,24	4,92	-3,587
400	64,55	130,85	116,19	5,87	-61,64	26,52	-14,488
500	76,86	146,60	120,71	12,95	-64,40	48,89	-21,367
600	87,53	161,59	126,29	21,19	-66,57	71,75	-26,133
700	96,48	175,77	132,35	30,40	-68,19	94,95	-29,642
800	104,03	189,16	138,62	40,43	-69,35	118,32	-32,321
900	110,46	201,79	144,95	51,16	-70,11	141,84	-34,441
1000	116,12	213,73	151,23	62,50	-70,50	165,43	-36,153

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 170,2^\circ \text{K}$ и $T_b = 408,36^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,49$ ккал/моль.

№ 152. 3,3-Диметилгептан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	50,94	115,25	115,25	0,00	-57,74	4,61	-3,376
300	51,18	115,57	115,26	0,10	-57,81	4,99	-3,633
400	65,57	132,30	117,44	5,95	-61,12	26,45	-14,450
500	78,33	148,35	122,03	13,16	-63,76	48,66	-21,267
600	89,01	163,60	127,70	21,55	-65,78	71,33	-25,981
700	97,86	178,00	133,87	30,90	-67,25	94,32	-29,446
800	105,32	191,57	140,24	41,07	-68,29	117,45	-32,086
900	111,65	204,35	146,66	51,92	-68,92	140,73	-34,171
1000	117,33	216,41	153,04	63,38	-69,20	164,06	-35,853

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_b = 410,16^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,44$ ккал/моль.

№ 153. 3,4-Диметилгептан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	49,23	117,48	117,48	0,00	-55,63	6,05	-4,435
300	49,46	117,79	117,49	0,10	-55,70	6,43	-4,683
400	63,94	134,05	119,60	5,78	-59,18	27,69	-15,130
500	76,51	149,70	124,07	12,82	-62,00	49,75	-21,744
600	87,34	164,63	129,60	21,03	-64,19	72,30	-26,335
700	96,35	178,79	135,62	30,22	-65,82	95,20	-29,720
800	103,93	192,16	141,86	40,25	-67,00	118,27	-32,307
900	110,40	204,79	148,16	50,97	-67,77	141,49	-34,356
1000	116,09	216,72	154,42	62,30	-68,16	164,78	-36,010

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_b = 413,7^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,69$ ккал/моль.

№ 154. 3,5-Диметилпептан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	48,18	116,10	116,10	0,00	-56,79	5,30	-3,887
300	48,41	116,40	116,11	0,09	-56,87	5,68	-4,140
400	63,37	132,43	118,19	5,70	-60,42	27,10	-14,805
500	76,20	147,98	122,60	12,69	-63,28	49,32	-21,557
600	87,21	162,88	128,08	20,88	-65,50	72,05	-26,243
700	96,32	177,02	134,07	30,07	-67,14	95,12	-29,696
800	103,95	190,40	140,29	40,09	-68,31	118,37	-32,335
900	110,44	203,02	146,56	50,82	-69,08	141,76	-34,424
1000	116,12	214,96	152,81	62,15	-69,47	165,23	-36,109

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцдером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_b = 409,1^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 8,52$ ккал/моль.

№ 155. 4,4-Диметилпептан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	50,94	113,87	113,87	0,00	-57,74	5,02	-3,678
300	51,18	114,19	113,88	0,10	-57,81	5,40	-3,935
400	65,57	130,92	116,06	5,95	-61,12	27,00	-14,752
500	78,33	146,97	120,65	13,16	-63,76	49,35	-21,569
600	89,01	162,22	126,32	21,55	-65,78	72,16	-26,283
700	97,86	176,62	132,49	30,90	-67,25	95,28	-29,747
800	105,32	190,19	138,86	41,07	-68,29	118,56	-32,387
900	111,65	202,97	145,28	51,92	-68,92	141,97	-34,473
1000	117,33	215,03	151,66	63,38	-69,20	165,44	-36,154

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцдером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_b = 408,3^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 8,45$ ккал/моль.

№ 156. 3-Этил-2-метилпексан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	49,23	116,79	116,79	0,00	-55,63	6,26	-4,586
300	49,46	117,10	116,80	0,10	-55,70	6,64	-4,834
400	63,94	133,36	118,91	5,78	-59,18	27,97	-15,281
500	76,51	149,01	123,38	12,82	-62,00	50,09	-21,894
600	87,34	163,94	128,91	21,03	-64,19	72,72	-26,485
700	96,35	178,10	134,93	30,22	-65,82	95,68	-29,871
800	103,93	191,47	141,17	40,25	-67,00	118,82	-32,458
900	110,40	204,10	147,47	50,97	-67,77	142,11	-34,507
1000	116,09	216,03	153,73	62,30	-68,16	165,47	-36,161

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие энтальпии отобраны Россини, Питцдером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_b = 411,1^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 8,60$ ккал/моль.

№ 157. 4-Этил-2-метилпексан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	48,18	115,41	115,41	0,00	-56,79	5,51	-4,037
300	48,41	115,71	115,42	0,09	-56,87	5,89	-4,290
400	63,37	131,74	117,50	5,70	-60,42	27,37	-14,956
500	76,20	147,29	121,91	12,69	-63,28	49,67	-21,708
600	87,21	162,19	127,39	20,88	-65,50	72,46	-26,393
700	96,32	176,33	133,38	30,07	-67,14	95,60	-29,847
800	103,95	189,71	139,60	40,09	-68,31	118,92	-32,485
900	110,44	202,33	145,87	50,82	-69,08	142,38	-34,574
1000	116,12	214,27	152,12	62,15	-69,47	165,92	-36,260

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцдером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_b = 406,9^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 8,52$ ккал/моль.

№ 158. 3-Этил-3-метилгексан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	49,87	115,25	115,25	0,00	-56,48	5,87	-4,300
300	50,11	115,56	115,26	0,10	-56,55	6,25	-4,551
400	64,98	132,06	117,40	5,87	-59,95	27,72	-15,146
500	78,00	148,00	121,94	13,03	-62,63	49,96	-21,837
600	88,85	163,21	127,56	21,39	-64,68	72,67	-26,470
700	97,78	177,59	133,69	30,74	-66,16	95,70	-29,877
800	105,28	191,15	140,04	40,90	-67,20	118,88	-32,474
900	111,64	203,93	146,43	51,75	-67,84	142,19	-34,527
1000	117,33	215,99	152,79	63,20	-68,11	165,56	-36,182

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_b = 413,7^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,54$ ккал/моль.

№ 159. 3-Этил-4-метилгексан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	48,16	116,79	116,79	0,00	-54,94	6,95	-5,092
300	48,39	117,09	116,80	0,09	-55,02	7,33	-5,336
400	63,35	133,11	118,88	5,70	-58,57	28,67	-15,665
500	76,18	148,66	123,29	12,69	-61,44	50,83	-22,245
600	87,18	163,55	128,77	20,87	-63,65	73,49	-26,766
700	96,27	177,69	134,76	30,06	-65,30	96,49	-30,125
800	103,89	191,06	140,97	40,08	-66,48	119,67	-32,691
900	110,39	203,68	147,24	50,80	-67,25	143,00	-34,724
1000	116,09	215,61	153,49	62,13	-67,64	166,40	-36,366

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_b = 413,5^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,70$ ккал/моль.

№ 160. 2,2,3-Триметилгексан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	50,43	111,34	111,34	0,00	-57,65	5,86	-4,296
300	50,66	111,66	111,35	0,10	-57,72	6,25	-4,553
400	65,43	128,30	113,52	5,92	-61,06	28,11	-15,357
500	78,26	144,32	118,09	13,12	-63,72	50,72	-22,168
600	89,04	159,57	123,74	21,50	-65,74	73,80	-26,879
700	97,93	173,98	129,90	30,86	-67,20	97,18	-30,341
800	105,40	187,56	136,26	41,04	-68,23	120,72	-32,979
900	111,75	200,34	142,68	51,90	-68,86	144,40	-35,063
1000	117,38	212,42	149,06	63,36	-69,12	168,13	-36,742

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_b = 406,75^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,31$ ккал/моль.

№ 161. 2,2,4-Триметилгексан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	49,38	111,34	111,34	0,00	-58,13	5,38	-3,945
300	49,61	111,65	111,35	0,10	-58,20	5,77	-4,204
400	64,86	128,06	113,48	5,84	-61,63	27,64	-15,102
500	77,95	143,98	118,00	13,00	-64,32	50,28	-21,977
600	88,91	159,19	123,61	21,36	-66,36	73,39	-26,733
700	97,90	173,59	129,73	30,71	-67,84	96,82	-30,228
800	105,42	187,17	136,07	40,88	-68,86	120,10	-32,890
900	111,79	199,96	142,47	51,75	-69,19	144,11	-34,993
1000	117,41	212,04	148,82	63,22	-69,74	167,88	-36,688

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 153,1^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,8$ ккал/моль и $T_b = 399,69^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,13$ ккал/моль.

№ 162. 2,2,5-Триметилгексан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔHf°	ΔGf°	
298	50,45	109,96	109,96	0,00	-60,71	3,21	-2,355
300	50,68	110,28	109,97	0,10	-60,78	3,60	-2,626
400	65,45	126,93	112,14	5,92	-61,12	25,60	-13,987
500	78,28	142,95	116,71	13,12	-66,77	48,35	-21,132
600	89,07	158,20	122,36	21,51	-68,79	71,56	-26,065
700	97,98	172,62	128,52	30,87	-70,25	95,09	-29,686
800	105,46	186,20	134,89	41,05	-71,27	118,76	-32,443
900	111,80	199,00	141,31	51,92	-71,89	142,57	-34,619
1000	117,41	211,07	147,69	63,39	-72,15	166,43	-36,372

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 167,37^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 1,48$ ккал/моль и $T_b = 397,23^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 8,07$ ккал/моль.

№ 163. 2,3,3-Триметилгексан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔHf°	ΔGf°	
298	50,43	112,14	112,14	0,00	-57,08	6,19	-4,539
300	50,66	112,46	112,15	0,10	-51,15	6,58	-4,794
400	65,43	129,10	114,32	5,92	-60,49	28,36	-15,494
500	78,26	145,12	118,89	13,12	-63,15	50,89	-22,243
600	89,04	160,37	124,54	21,50	-65,17	73,89	-26,911
700	97,93	174,78	130,70	30,86	-66,63	97,19	-30,344
800	105,40	188,36	137,06	41,04	-67,66	120,65	-32,960
900	111,75	201,14	143,48	51,90	-68,29	144,25	-35,026
1000	117,38	213,22	149,86	63,36	-68,55	167,90	-36,692

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 156,35^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 2,17$ ккал/моль и $T_b = 410,83^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 8,36$ ккал/моль.

№ 164. 2,3,4-Триметилгексан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔHf°	ΔGf°	
298	48,72	114,37	114,37	0,00	-56,18	6,43	-4,712
300	48,94	114,68	114,38	0,10	-56,26	6,81	-4,962
400	63,80	130,84	116,48	5,75	-59,76	28,39	-15,512
500	76,44	146,47	120,93	12,78	-62,59	50,77	-22,190
600	87,37	161,40	126,44	20,98	-64,78	73,65	-26,824
700	96,42	175,57	132,45	30,18	-66,41	96,86	-30,241
800	104,01	188,95	138,69	40,22	-67,58	120,26	-32,851
900	110,50	201,58	144,98	50,95	-68,34	143,80	-34,917
1000	116,14	213,53	151,24	62,29	-68,72	167,41	-36,585

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 412,19^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 8,53$ ккал/моль.

№ 165. 2,3,5-Триметилгексан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔHf°	ΔGf°	
298	48,74	112,30	112,30	0,00	-58,03	5,20	-3,808
300	48,96	112,61	112,31	0,10	-58,11	5,58	-4,067
400	63,82	128,78	114,41	5,75	-61,61	27,37	-14,954
500	76,46	144,41	118,86	12,78	-64,43	49,95	-21,833
600	87,40	159,35	124,37	20,99	-66,63	73,04	-26,602
700	96,47	173,52	130,39	30,20	-68,25	96,46	-30,115
800	104,07	186,91	136,63	40,23	-69,41	120,06	-32,796
900	110,55	199,55	142,92	50,97	-70,17	143,80	-34,918
1000	116,17	211,50	149,19	62,31	-70,55	167,61	-36,639

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 145,3^\circ K$ и $T_b = 404,49^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 8,32$ ккал/моль.

№ 166. 2,4,4-Триметилгексан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	49,38	112,14	112,14	0,00	-57,56	5,71	-4,488
300	49,61	112,45	112,15	0,10	-57,63	6,10	-4,444
400	64,86	128,86	114,28	5,84	-61,06	27,89	-15,239
500	77,95	144,78	118,80	13,00	-63,75	50,45	-22,052
600	88,91	159,99	124,41	21,36	-65,79	73,48	-26,765
700	97,90	174,39	130,53	30,71	-67,27	96,83	-30,231
800	105,42	187,97	136,87	40,88	-68,29	120,33	-32,871
900	111,79	200,76	143,27	51,75	-68,92	143,96	-34,957
1000	117,41	212,84	149,62	63,22	-69,17	167,65	-36,638

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Значения температур переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 159,77^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 2,71$ ккал/моль и $T_b = 403,80^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 8,20$ ккал/моль.

№ 167. 3,3,4-Триметилгексан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	49,36	113,52	113,52	0,00	-56,39	6,47	-4,744
300	49,59	113,83	113,53	0,10	-56,46	6,86	-4,995
400	64,84	130,24	115,66	5,84	-59,89	28,51	-15,577
500	77,93	146,15	120,18	12,99	-62,58	50,93	-22,262
600	88,88	161,36	125,78	21,35	-64,63	73,83	-26,891
700	97,85	175,75	131,90	30,70	-66,11	97,04	-30,296
800	105,36	189,32	138,24	40,87	-67,14	120,40	-32,891
900	111,74	202,11	144,63	51,73	-67,77	143,90	-34,942
1000	117,38	214,18	150,99	63,19	-68,03	167,45	-36,595

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 171,95^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 1,94$ ккал/моль и $T_b = 413,61^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 8,40$ ккал/моль.

№ 168. 3,3-Диэтилпентан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	48,80	110,31	110,31	0,00	-55,44	8,38	-6,141
300	49,04	110,62	110,32	0,10	-55,52	8,77	-6,388
400	64,39	126,88	112,43	5,78	-58,99	30,75	-16,802
500	77,67	142,71	116,91	12,91	-61,72	53,52	-23,391
600	88,69	157,88	122,49	21,24	-63,79	76,76	-27,958
700	97,70	172,25	128,58	30,57	-65,28	100,32	-31,319
800	105,24	185,80	134,89	40,73	-66,33	124,03	-33,882
900	111,63	198,57	141,27	51,58	-66,97	147,88	-35,909
1000	117,33	210,63	147,60	63,03	-67,24	171,79	-37,542

Результаты низкотемпературных измерений, выполненных Стейвели, Уарреном, Пейджетом и Доуриком [1408], показали, что $T_t = 208,8^\circ K$, $T_t = 210,1^\circ K$, ΔH_t (комбинированное) = $-0,304$ ккал/моль, $T_{tr} = 240,12^\circ K$ и $\Delta H_{tr} = 2,398$ ккал/моль. Согласно Россини, Питцеру, Арнетту, Брауну и Пиментелу [1248], $T_b = 419,32^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 8,60$ ккал/моль. Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397].

№ 169. 3-Этил-2,2-диметилпентан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	49,49	109,96	109,96	0,00	-56,96	6,96	-5,104
300	49,72	110,27	109,97	0,10	-57,03	7,35	-5,357
400	64,85	126,70	112,10	5,84	-60,45	29,36	-16,042
500	77,80	142,60	116,62	12,99	-63,15	52,14	-22,790
600	88,70	157,78	122,23	21,33	-65,21	75,39	-27,460
700	97,65	172,14	128,34	30,66	-66,71	98,96	-30,896
800	105,15	185,68	134,67	40,81	-67,76	122,69	-33,515
900	111,53	198,44	141,06	51,65	-68,41	146,55	-35,585
1000	117,16	210,49	147,40	63,09	-68,70	170,47	-37,254

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам

Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 173,66^\circ \text{K}$ и $T_b = 406,98^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,32 \text{ ккал/моль}$.

№ 170. 3-Этил-2,3-диметилпентан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	49,36	112,14	112,14	0,00	-55,82	7,45	-5,463
300	49,59	112,45	112,15	0,10	-55,89	7,84	-5,712
400	64,84	128,86	114,28	5,84	-59,32	29,63	-16,190
500	77,93	144,77	118,80	12,99	-62,01	52,19	-22,813
600	88,88	159,98	124,40	21,35	-64,06	75,23	-27,400
700	97,85	174,37	130,52	30,70	-65,54	98,58	-30,775
800	105,36	187,94	136,86	40,87	-66,57	122,08	-33,348
900	111,74	200,73	143,25	51,73	-67,20	145,71	-35,382
1000	117,38	212,80	149,61	63,19	-67,46	169,40	-37,021

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], $T_b = 417,85^\circ \text{K}$, причем $\Delta H_v = 8,44 \text{ ккал/моль}$.

№ 171. 3-Этил-2,4-диметилпентан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	48,72	112,30	112,30	0,00	-56,18	7,05	-5,164
300	48,94	112,61	112,31	0,10	-56,26	7,43	-5,414
400	63,80	128,77	114,41	5,75	-59,76	29,22	-15,965
500	76,44	144,40	118,86	12,78	-62,59	51,80	-22,643
600	87,37	159,33	124,37	20,98	-64,78	74,89	-27,277
700	96,42	173,50	130,38	30,18	-66,41	98,31	-30,693
800	104,01	186,88	136,62	40,22	-67,58	121,91	-33,303
900	110,50	199,51	142,91	50,95	-68,34	145,66	-35,369
1000	116,14	211,46	149,17	62,29	-68,72	169,48	-37,037

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 150,79^\circ \text{K}$ и $T_b = 409,84^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,46 \text{ ккал/моль}$.

№ 172. 2,2,3,3-Тетраметилпентан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	50,69	106,69	106,69	0,00	-56,70	8,20	-6,009
300	50,92	107,01	106,70	0,10	-56,77	8,60	-6,262
400	66,34	123,82	108,88	5,98	-60,05	30,91	-16,888
500	79,55	140,09	113,51	13,29	-62,59	53,96	-23,584
600	90,40	155,58	119,24	21,81	-64,48	77,44	-28,208
700	99,23	170,20	125,49	31,30	-65,81	101,22	-31,601
800	106,62	183,94	131,95	41,60	-66,71	125,13	-34,182
900	112,88	196,87	138,45	52,59	-67,22	149,16	-36,218
1000	118,45	209,06	144,91	64,16	-67,37	173,23	-37,857

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 263,25^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 0,555 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 413,42^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,43 \text{ ккал/моль}$.

№ 173. 2,2,3,4-Тетраметилпентан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	49,92	108,23	108,23	0,00	-56,64	7,80	-5,716
300	50,14	108,54	108,24	0,10	-56,71	8,19	-5,969
400	65,29	125,10	110,39	5,89	-60,09	30,37	-16,592
500	78,19	141,09	114,94	13,08	-62,75	53,30	-23,297
600	89,07	156,34	120,58	21,46	-64,77	76,70	-27,937
700	98,00	170,76	126,73	30,82	-66,23	100,41	-31,348
800	105,48	184,34	133,09	41,01	-67,25	124,27	-33,948
900	111,88	197,14	139,50	51,88	-67,87	148,27	-36,002
1000	117,43	209,23	145,88	63,35	-68,12	172,31	-37,657

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питчером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 152,06^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = -0,124 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 406,17^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,19 \text{ ккал/моль}$.

№ 174. 2,2,4,4-Тетраметилпентан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	50,58	103,13	103,13	0,00	-57,83	8,13	-5,959
300	50,81	103,45	103,14	0,10	-57,90	8,53	-6,216
400	66,35	120,25	105,32	5,98	-61,19	31,21	-17,019
500	79,70	136,53	109,95	13,30	-63,72	54,61	-23,869
600	90,61	152,06	115,68	21,83	-65,59	78,45	-28,574
700	98,48	166,71	121,94	31,35	-66,90	102,58	-32,025
800	106,89	180,49	128,40	41,68	-67,77	126,83	-34,648
900	113,14	193,45	134,92	52,68	-68,25	151,20	-36,716
1000	118,70	205,66	141,39	64,28	-68,38	175,62	-38,379

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питчером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 206,61^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = -2,32 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 395,43^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 7,85 \text{ ккал/моль}$.

№ 175. 2,3,3,4-Тетраметилпентан, C_9H_{20} (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,250

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	49,92	107,65	107,65	0,00	-56,46	8,15	-5,975
300	50,14	107,96	107,66	0,10	-56,53	8,55	-6,227
400	65,29	124,52	109,81	5,89	-59,91	30,78	-16,817
500	78,19	140,51	114,36	13,08	-62,57	53,77	-23,502
600	89,07	155,76	120,00	21,46	-64,59	77,23	-28,129
700	98,00	170,18	126,15	30,82	-66,05	101,00	-31,531
800	105,48	183,76	132,51	41,01	-67,07	124,92	-34,124
900	111,85	196,56	138,92	51,88	-67,69	148,97	-36,173
1000	117,43	208,64	145,30	63,35	-67,94	173,67	-37,824

Энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820], термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. Температуры переходов и соответствующие им энтальпии отобраны Россини, Питчером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 171,03^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = -2,14 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 414,70^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,35 \text{ ккал/моль}$.

№ 176. Декан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	56,07	130,17	130,17	0,00	-59,67	7,94	-5,819
300	56,34	130,52	130,18	0,11	-59,75	8,35	-6,085
400	71,24	148,80	132,57	6,50	-63,46	31,64	-17,287
500	84,81	166,20	137,57	14,32	-66,51	55,78	-24,381
600	96,36	182,70	143,73	23,39	-68,92	80,47	-29,308
700	106,21	198,32	150,42	33,53	-70,73	105,53	-32,945
800	114,63	213,06	157,34	44,58	-72,05	130,78	-35,725
900	121,92	226,99	164,31	56,42	-72,90	156,20	-37,929
1000	128,20	240,17	171,24	68,93	-73,33	181,70	-39,709

Результаты низкотемпературных измерений, выполненных Финком, Гроссом, Уаддингтоном и Хаффманом [420], использовались в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питчером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 243,49^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 6,863 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 447,27^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 9,387 \text{ ккал/моль}$. Согласно измерениям Амброза, Кокса и Тоунсенда [13], $T_c = 617,5^\circ \text{K}$.

№ 177. 2-Метилнонан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	57,86	127,74	127,74	0,00	-61,38	6,95	-5,097
300	58,13	128,10	127,75	0,11	-61,46	7,37	-5,370
400	72,51	146,82	130,20	6,65	-65,02	30,88	-16,870
500	85,69	164,45	135,31	14,58	-67,96	55,20	-24,128
600	97,11	181,11	141,56	23,73	-70,29	80,05	-29,158
700	106,81	196,83	148,35	33,94	-72,03	105,27	-32,864
800	115,06	211,64	155,31	45,05	-73,29	130,67	-35,694
900	122,09	225,61	162,38	56,91	-74,12	156,23	-37,935
1000	128,40	238,80	169,37	69,44	-74,54	181,87	-39,745

Результаты низкотемпературных измерений, выполненных Парком, Уестом и Муром [1120], использовались в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]; термодинамические функции вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. $T_m = 198,50^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 4,180 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 440,15^\circ \text{K}$.

№ 178. 3-Метилнонан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 142,276

T, °K	ккал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	56,79	129,12	129,12	0,00	-60,70	7,22	-5,293
300	57,06	129,48	129,13	0,11	-60,78	7,64	-5,564
400	71,92	147,96	131,55	6,57	-64,42	31,02	-16,948
500	85,36	165,49	136,60	14,45	-67,41	55,24	-24,143
600	96,95	182,10	142,81	23,58	-69,76	79,99	-29,134
700	106,73	197,80	149,55	33,78	-71,52	105,10	-32,813
800	115,02	212,61	156,52	44,88	-72,78	130,40	-35,623
900	122,08	226,57	163,54	56,74	-73,61	155,87	-37,849
1000	128,40	239,77	170,50	69,27	-74,03	181,41	-39,646

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Температуры переходов отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 188,35^\circ \text{K}$ и $T_b = 440,9^\circ \text{K}$.

№ 179. 4-Метилнонан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 142,276

T, °K	ккал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	56,79	129,12	129,12	0,00	-60,70	7,22	-5,293
300	57,06	129,48	129,13	0,11	-60,78	7,64	-5,564
400	71,92	147,96	131,55	6,57	-64,42	31,02	-16,948
500	85,36	165,49	136,60	14,45	-67,41	55,24	-24,143
600	96,95	182,10	142,81	23,58	-69,76	79,99	-29,134
700	106,73	197,80	149,55	33,78	-71,52	105,10	-32,813
800	115,02	212,61	156,52	44,88	-72,78	130,40	-35,623
900	122,08	226,57	163,54	56,74	-73,61	155,87	-37,849
1000	128,40	239,77	170,50	69,27	-74,03	181,41	-39,646

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Температуры переходов отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 174,4^\circ \text{K}$ и $T_b = 438,8^\circ \text{K}$.

№ 180. 5-Метилнонан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 142,276

T, °K	ккал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	56,79	127,74	127,74	0,00	-60,70	7,63	-5,595
300	57,06	128,10	127,75	0,11	-60,78	8,05	-5,865
400	71,92	146,58	130,17	6,57	-64,42	31,57	-17,250
500	85,36	164,11	135,22	14,45	-67,41	55,93	-24,445
600	96,95	180,72	141,43	23,58	-69,76	80,81	-29,435
700	106,73	196,42	148,17	33,78	-71,52	106,07	-33,114
800	115,02	211,23	155,14	44,88	-72,78	131,51	-35,925
900	122,08	225,19	162,16	56,74	-73,61	157,11	-38,150
1000	128,40	238,39	169,12	69,27	-74,03	182,79	-39,947

Результаты низкотемпературных измерений, выполненных Парком, Уестом и Муром [1120], использовались в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], а также с величиной энтальпии образования, рассчитанной Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]. $T_m = 185,45^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 3,977 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 438,2^\circ \text{K}$.

№ 181. 3-Этилоктан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 142,276

T, °K	ккал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,72	127,74	127,74	0,00	-60,01	8,32	-6,101
300	55,99	128,09	127,75	0,11	-60,09	8,74	-6,368
400	71,33	146,34	130,13	6,49	-63,81	32,28	-17,634
500	85,03	163,76	135,13	14,32	-66,85	56,66	-24,766
600	96,79	180,33	141,29	23,43	-69,22	81,59	-29,716
700	106,65	196,01	148,00	33,61	-70,99	106,88	-33,368
800	114,98	210,81	154,94	44,71	-72,26	132,36	-36,157
900	122,07	224,77	161,93	56,56	-73,69	158,01	-38,367
1000	128,40	237,97	168,88	69,69	-73,51	183,73	-40,152

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 439,6^\circ \text{K}$.

№ 182. 4-Этилоктан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 142,276

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,72	129,12	129,12	0,00	-60,01	7,91	-5,799
300	55,99	129,47	129,13	0,11	-60,09	8,33	-6,066
400	71,33	147,72	131,51	6,49	-63,81	31,72	-17,333
500	85,03	165,14	136,51	14,32	-66,85	55,97	-24,464
600	96,79	181,71	142,67	23,43	-69,22	80,76	-29,415
700	106,65	197,39	149,38	33,61	-70,99	105,91	-33,066
800	114,98	212,19	156,32	44,71	-72,26	131,26	-35,856
900	122,07	226,15	163,31	56,56	-73,09	156,76	-38,066
1000	128,40	239,35	170,26	69,09	-73,51	182,35	-39,850

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 436,79^\circ \text{K}$.

№ 183. 2,2-Диметилоктан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 142,276

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	57,99	122,29	122,29	0,00	-63,93	6,03	-4,419
300	58,26	122,65	122,30	0,11	-64,01	6,46	-4,703
400	73,41	141,52	124,77	6,71	-67,51	30,50	-16,665
500	87,11	159,42	129,92	14,75	-70,34	55,34	-24,190
600	98,65	176,35	136,26	24,06	-72,52	80,68	-29,388
700	108,31	192,30	143,14	34,42	-74,11	106,36	-33,206
800	116,49	207,31	150,23	45,67	-75,22	132,20	-36,115
900	123,43	221,44	157,37	57,67	-75,91	158,19	-38,412
1000	129,69	234,77	164,45	70,33	-76,20	184,24	-40,263

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 430,0^\circ \text{K}$.

№ 184. 2,3-Диметилоктан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 142,276

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,23	126,01	126,01	0,00	-62,41	6,44	-4,720
300	55,49	126,36	126,02	0,11	-62,49	6,86	-4,998
400	71,21	144,52	128,39	6,46	-66,24	30,57	-16,704
500	84,98	161,93	133,37	14,28	-69,29	55,14	-24,102
600	96,85	178,50	139,52	23,39	-71,66	80,25	-29,230
700	106,77	194,19	146,22	33,59	-73,42	105,73	-33,008
800	115,12	209,01	153,15	44,69	-74,68	131,39	-35,892
900	122,22	222,99	160,14	56,56	-75,49	157,21	-38,175
1000	128,48	236,19	167,09	69,11	-75,90	183,11	-40,018

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 437,46^\circ \text{K}$.

№ 185. 2,4-Диметилоктан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 142,276

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	56,28	126,01	126,01	0,00	-61,25	7,60	-5,570
300	56,54	126,36	126,02	0,11	-61,33	8,02	-5,843
400	71,78	144,76	128,42	6,54	-65,00	31,72	-17,330
500	85,29	162,26	133,45	14,41	-68,00	56,26	-24,590
600	96,98	178,87	139,65	23,54	-70,35	81,33	-29,623
700	106,80	194,58	146,39	33,74	-72,10	106,77	-33,333
800	115,10	209,40	153,35	44,84	-73,36	132,39	-36,166
900	122,18	223,37	160,36	56,72	-74,18	158,18	-38,409
1000	128,45	236,57	167,33	69,25	-74,59	184,04	-40,220

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 429,0^\circ \text{K}$.

№ 186. 2,5-Диметилоктан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,23	126,01	126,01	0,00	-62,41	6,44	-4,720
300	55,49	126,36	126,02	0,11	-62,49	6,86	-4,998
400	71,21	144,52	128,39	6,46	-66,24	30,57	-16,704
500	84,98	161,93	133,37	14,28	-69,29	55,14	-24,102
600	96,85	178,50	139,52	23,39	-71,66	80,25	-29,230
700	106,77	194,19	146,22	33,59	-73,42	105,73	-33,008
800	115,12	209,01	153,15	44,69	-74,68	131,39	-35,892
900	122,22	222,99	160,14	56,56	-75,49	157,21	-38,175
1000	128,48	236,19	167,09	69,11	-75,90	183,11	-40,018

Термодинамические функции вычислены для газообразного состояния по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 431,6^\circ \text{K}$.

№ 187. 2,6-Диметилоктан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,23	126,01	126,01	0,00	-62,41	6,44	-4,720
300	55,49	126,36	126,02	0,11	-62,49	6,86	-4,998
400	71,21	144,52	128,39	6,46	-66,24	30,57	-16,704
500	84,98	161,93	133,37	14,28	-69,29	55,14	-24,102
600	96,85	178,50	139,52	23,39	-71,66	80,25	-29,230
700	106,77	194,19	146,22	33,59	-73,42	105,73	-33,008
800	115,12	209,01	153,15	44,69	-74,68	131,39	-35,892
900	122,22	222,99	160,14	56,56	-75,49	157,21	-38,175
1000	128,48	236,19	167,09	69,11	-75,90	183,11	-40,018

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 431,69^\circ \text{K}$.

№ 188. 2,7-Диметилоктан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	56,30	123,25	123,25	0,00	-63,10	6,57	-4,817
300	56,56	123,60	123,26	0,11	-63,18	7,00	-5,098
400	71,80	142,00	125,66	6,54	-66,85	30,97	-16,923
500	85,31	159,51	130,70	14,41	-69,85	55,79	-24,384
600	97,01	176,13	136,90	23,54	-72,20	81,13	-29,552
700	106,85	191,84	143,63	33,75	-73,94	106,85	-33,358
800	115,16	206,66	150,59	44,86	-75,20	132,74	-36,262
900	122,23	220,64	157,61	56,74	-76,01	158,80	-38,561
1000	128,48	233,85	164,58	69,28	-76,42	184,94	-40,416

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Температуры переходов отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 219^\circ \text{K}$ и $T_b = 433,02^\circ \text{K}$.

№ 189. 3,3-Диметилоктан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	56,92	124,47	124,47	0,00	-62,67	6,64	-4,866
300	57,19	124,83	124,48	0,11	-62,75	7,06	-5,145
400	72,82	143,46	126,91	6,62	-66,34	30,90	-16,885
500	86,78	161,25	132,01	14,62	-69,21	55,56	-24,284
600	98,49	178,14	138,31	23,90	-71,41	80,72	-29,400
700	108,23	194,07	145,15	34,25	-73,01	106,22	-33,161
800	116,45	209,07	152,21	45,50	-74,13	131,88	-36,027
900	123,42	223,20	159,32	57,50	-74,82	157,69	-38,291
1000	129,69	236,53	166,38	70,16	-75,11	183,57	-40,116

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = -434,3^\circ \text{K}$.

№ 190. 3,4-Диметилпектан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа),
Мол. вес 142,276

T, °K	ккал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,21	126,70	126,70	0,00	-60,56	8,08	-5,925
300	55,47	127,05	126,71	0,11	-60,64	8,50	-6,195
400	71,19	145,20	129,08	6,46	-64,40	32,15	-17,564
500	84,96	162,60	134,05	14,28	-67,44	56,65	-24,760
600	96,82	179,17	140,21	23,39	-69,82	81,69	-29,754
700	106,72	194,86	146,90	33,58	-71,58	107,10	-33,436
800	115,06	209,67	153,83	44,67	-72,84	132,69	-36,249
900	122,17	223,64	160,82	56,54	-73,67	158,45	-38,476
1000	128,45	236,84	167,77	69,08	-74,08	184,29	-40,274

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = -436,5^\circ \text{K}$.

№ 191. 3,5-Диметилпектан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа),
Мол. вес 142,276

T, °K	ккал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,16	126,70	126,70	0,00	-61,72	6,92	-5,075
300	54,42	127,04	126,71	0,11	-61,80	7,34	-5,350
400	70,62	144,97	129,04	6,38	-65,64	31,00	-16,938
500	84,65	162,27	133,97	14,16	-68,73	55,53	-24,272
600	96,69	178,80	140,07	23,24	-71,12	80,61	-29,360
700	106,69	194,47	146,74	33,42	-72,89	106,06	-33,110
800	115,08	209,28	153,64	44,52	-74,16	131,69	-35,974
900	122,21	223,26	160,60	56,39	-74,98	157,49	-38,244
1000	128,48	236,47	167,54	68,93	-75,38	183,36	-40,071

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = -432,5^\circ \text{K}$.

№ 192. 3,6-Диметилпектан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа),
Мол. вес 142,276

T, °K	ккал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,16	125,32	125,32	0,00	-61,72	7,33	-5,376
300	54,42	125,66	125,33	0,11	-61,80	7,76	-5,651
400	70,62	143,59	127,66	6,38	-65,64	31,55	-17,240
500	84,65	160,89	132,59	14,16	-68,73	56,22	-24,573
600	96,69	177,42	138,69	23,24	-71,12	81,44	-29,661
700	106,69	193,09	145,36	33,42	-72,89	107,02	-33,412
800	115,08	207,90	152,26	44,52	-74,16	132,79	-36,276
900	122,21	221,88	159,22	56,39	-74,98	158,73	-38,543
1000	128,48	235,09	166,16	68,93	-75,38	184,74	-40,373

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = -433,9^\circ \text{K}$.

№ 193. 4,4-Диметилпектан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа),
Мол. вес 142,276

T, °K	ккал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	56,92	124,47	124,47	0,00	-62,67	6,64	-4,866
300	57,19	124,83	124,48	0,11	-62,75	7,06	-5,145
400	72,82	143,46	126,91	6,62	-66,34	30,90	-16,885
500	86,78	161,25	132,01	14,62	-69,21	55,56	-24,284
600	98,49	178,14	138,31	23,90	-71,41	80,72	-29,400
700	108,23	194,07	145,15	34,25	-73,01	106,22	-33,161
800	116,45	209,07	152,21	45,50	-74,13	131,88	-36,027
900	123,42	223,20	159,32	57,50	-74,82	157,69	-38,291
1000	129,69	236,53	166,38	70,16	-75,11	183,57	-40,116

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 430,6^\circ \text{K}$.

№ 194. 4,5-Диметилпектан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,21	125,32	125,32	0,00	-60,56	8,49	-6,227
300	55,47	125,67	125,33	0,11	-60,64	8,92	-6,496
400	71,19	143,82	127,70	6,46	-64,40	32,70	-17,866
500	84,96	161,22	132,67	14,28	-67,44	57,34	-25,061
600	96,82	177,79	138,83	23,39	-69,82	82,52	-30,055
700	106,72	193,48	145,52	33,58	-71,58	108,06	-33,737
800	115,06	208,29	152,45	44,67	-72,84	133,80	-36,550
900	122,17	222,26	159,44	56,54	-73,67	159,70	-38,777
1000	128,45	235,46	166,39	69,08	-74,08	185,67	-40,576

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 435,28^\circ \text{K}$.

№ 195. 4-Пронилпектан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,72	125,56	125,56	0,00	-60,01	8,97	-6,577
300	55,99	125,91	125,57	0,11	-60,09	9,40	-6,844
400	71,33	144,16	127,95	6,49	-63,81	33,15	-18,111
500	85,03	161,58	132,95	14,32	-66,85	57,75	-25,242
600	96,79	178,15	139,11	23,43	-69,22	82,89	-30,193
700	106,65	193,83	145,82	33,61	-70,99	108,41	-33,844
800	114,98	208,63	152,76	44,71	-72,26	134,10	-36,634
900	122,07	222,59	159,75	56,56	-73,09	159,97	-38,844
1000	128,40	235,79	166,70	69,09	-73,51	185,91	-40,628

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 430,6^\circ \text{K}$.

№ 196. 4-Изопропилпектан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,21	124,63	124,63	0,00	-60,02	9,24	-6,773
300	55,47	124,98	124,64	0,11	-60,10	9,66	-7,040
400	71,19	143,13	127,01	6,46	-63,86	33,52	-18,312
500	84,96	160,53	131,98	14,28	-66,90	58,22	-25,448
600	96,82	177,10	138,14	23,39	-69,28	83,47	-30,403
700	106,72	192,79	144,83	33,58	-71,04	109,09	-34,057
800	115,06	207,60	151,76	44,67	-72,30	134,89	-36,848
900	122,17	221,57	158,75	56,54	-73,13	160,86	-39,059
1000	128,45	234,77	165,70	69,08	-73,54	186,90	-40,844

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 432,0^\circ \text{K}$.

№ 197. 3-Этил-2-метилпектан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,21	126,01	126,01	0,00	-60,56	8,29	-6,076
300	55,47	126,36	126,02	0,11	-60,64	8,71	-6,345
400	71,19	144,51	128,39	6,46	-64,40	32,42	-17,715
500	84,96	161,81	133,36	14,28	-67,44	56,99	-24,911
600	96,82	178,48	139,52	23,39	-69,82	82,10	-29,904
700	106,72	194,17	146,21	33,58	-71,58	107,58	-33,587
800	115,06	208,98	153,14	44,67	-72,84	133,25	-36,399
900	122,17	222,95	160,13	56,54	-73,67	159,07	-38,627
1000	128,45	236,15	167,08	69,08	-74,08	184,98	-40,425

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 434,3^\circ \text{K}$.

№ 198. 4-Этил-2-метилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,16	126,01	126,01	0,00	-61,72	7,13	-5,226
300	54,42	126,35	126,02	0,11	-61,80	7,55	-5,500
400	70,62	144,28	128,35	6,38	-65,64	31,28	-17,089
500	84,65	161,58	133,28	14,16	-68,73	55,88	-24,423
600	96,69	178,11	139,38	23,24	-71,12	81,02	-29,511
700	106,69	193,78	146,05	33,42	-72,89	106,54	-33,261
800	115,08	208,59	152,95	44,52	-74,16	132,24	-36,125
900	122,21	222,57	159,91	56,39	-74,98	158,11	-38,392
1000	128,48	235,78	166,85	68,93	-75,38	184,05	-40,222

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 429,3^\circ \text{K}$.

№ 199. 5-Этил-2-метилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,16	124,63	124,63	0,00	-61,72	7,54	-5,527
300	54,42	124,97	124,64	0,11	-61,80	7,96	-5,802
400	70,62	142,90	126,97	6,38	-65,64	31,83	-17,391
500	84,65	160,20	131,90	14,16	-68,73	56,57	-24,724
600	96,69	176,73	138,00	23,24	-71,12	81,85	-29,812
700	106,69	192,40	144,67	33,42	-72,89	107,50	-33,563
800	115,08	207,21	151,57	44,52	-74,16	133,35	-36,427
900	122,21	221,19	158,53	56,39	-74,98	159,35	-38,694
1000	128,48	234,40	165,47	68,93	-75,38	185,13	-40,524

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 432,8^\circ \text{K}$.

№ 200. 3-Этил-3-метилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,85	124,47	124,47	0,00	-61,41	7,90	-5,789
300	56,12	124,82	124,48	0,11	-61,49	8,32	-6,063
400	72,23	143,22	126,88	6,54	-65,16	32,18	-17,581
500	86,45	160,91	131,93	14,50	-68,08	56,86	-24,854
600	98,33	177,75	138,17	23,75	-70,30	82,06	-29,888
700	108,15	193,66	144,97	34,09	-71,91	107,60	-33,592
800	116,41	208,66	152,01	45,33	-73,04	133,31	-36,415
900	123,41	222,78	159,09	57,32	-73,74	159,16	-38,647
1000	129,69	236,12	166,14	69,98	-74,02	185,07	-40,445

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 436,9^\circ \text{K}$.

№ 201. 4-Этил-3-метилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,14	126,70	126,70	0,00	-59,87	8,77	-6,431
300	54,40	127,04	126,71	0,11	-59,95	9,19	-6,697
400	70,60	144,96	129,04	6,37	-63,79	32,85	-17,949
500	84,63	162,26	133,97	14,15	-66,88	57,38	-25,081
600	96,66	178,78	140,07	23,23	-69,28	82,46	-30,035
700	106,64	194,45	146,73	33,41	-71,05	107,91	-33,689
800	115,02	209,25	153,63	44,50	-72,32	133,55	-36,481
900	122,16	223,22	160,59	56,37	-73,15	159,35	-38,693
1000	128,45	236,43	167,52	68,91	-73,56	185,22	-40,479

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 435,3^\circ \text{K}$.

№ 202. 3-Этил-5-метилгептан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол.вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ^o ₂₉₈)/T	H ^o -H ^o ₂₉₈	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	53,09	126,01	126,01	0,00	-61,04	7,81	-5,724
300	53,35	126,34	126,02	0,10	-61,12	8,23	-5,996
400	70,03	144,03	128,32	6,29	-65,04	31,97	-17,468
500	84,32	161,23	133,49	14,03	-68,17	56,60	-24,739
600	96,53	177,72	139,25	23,09	-70,59	81,78	-29,788
700	106,61	193,38	145,87	33,26	-72,37	107,34	-33,511
800	115,04	208,18	152,74	44,35	-73,65	133,08	-36,355
900	122,20	222,45	159,69	56,22	-74,47	158,99	-38,607
1000	128,48	235,36	166,60	68,76	-74,88	184,98	-40,425

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 431,3^\circ \text{K}$.

№ 203. 3-Этил-4-метилгептан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол.вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ^o ₂₉₈)/T	H ^o -H ^o ₂₉₈	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	54,44	126,01	126,01	0,00	-59,87	8,98	-6,582
300	54,40	126,35	126,02	0,11	-59,95	9,40	-6,848
400	70,60	144,27	128,35	6,37	-63,79	33,13	-18,100
500	84,63	161,57	133,28	14,15	-66,88	57,73	-25,232
600	96,66	178,09	139,38	23,23	-69,28	82,87	-30,185
700	106,64	193,76	146,04	33,41	-71,05	108,39	-33,840
800	115,02	208,56	152,94	44,50	-72,32	134,10	-36,632
900	122,16	222,53	159,90	56,37	-73,15	159,97	-38,844
1000	128,45	235,74	166,83	68,91	-73,56	185,91	-40,627

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 436,1^\circ \text{K}$.

№ 204. 4-Этил-4-метилгептан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол.вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ^o ₂₉₈)/T	H ^o -H ^o ₂₉₈	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	55,85	124,47	124,47	0,00	-61,41	7,90	-5,789
300	56,12	124,82	124,48	0,11	-61,49	8,32	-6,063
400	72,23	143,22	126,88	6,54	-65,16	32,18	-17,581
500	86,45	160,91	131,93	14,50	-68,08	56,86	-24,854
600	98,33	177,75	138,17	23,75	-70,30	82,06	-29,888
700	108,15	193,66	144,97	34,09	-71,91	107,60	-33,592
800	116,41	208,66	152,01	45,33	-73,04	133,31	-36,415
900	123,41	222,78	159,09	57,32	-73,74	159,16	-38,647
1000	129,69	236,12	166,14	69,98	-74,02	185,07	-40,445

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 433,9^\circ \text{K}$.

№ 205. 2,2,3-Триметилгептан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол.вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ^o ₂₉₈)/T	H ^o -H ^o ₂₉₈	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	56,41	120,56	120,56	0,00	-62,58	7,89	-5,786
300	56,67	120,91	120,57	0,11	-62,66	8,33	-6,065
400	72,68	139,46	122,99	6,59	-66,28	32,56	-17,792
500	86,71	157,22	128,07	14,58	-69,16	57,62	-25,185
600	98,52	174,11	134,35	23,86	-71,36	83,18	-30,298
700	108,30	190,05	141,18	34,21	-72,96	109,08	-34,056
800	116,53	205,06	148,24	45,47	-74,07	135,15	-36,920
900	123,52	219,20	155,34	57,47	-74,75	161,36	-39,182
1000	129,74	232,54	162,40	70,14	-75,03	187,64	-41,066

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 430,7^\circ \text{K}$.

№ 206. 2,2,4-Триметилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,36	120,56	120,56	0,00	-63,06	7,41	-5,434
300	55,62	120,91	120,57	0,11	-63,14	7,85	-5,715
400	72,11	139,22	122,95	6,51	-66,84	32,10	-17,537
500	86,40	156,89	127,98	14,46	-69,76	57,18	-24,994
600	98,39	173,73	134,22	23,71	-71,99	82,78	-30,152
700	108,27	189,66	141,01	34,06	-73,59	108,72	-33,943
800	116,55	204,67	148,04	45,31	-74,71	134,83	-36,831
900	123,56	218,81	155,13	57,32	-75,38	161,08	-39,113
1000	129,77	232,16	162,17	70,00	-75,66	187,39	-40,952

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 421,4^\circ \text{K}$.

№ 207. 2,2,5-Триметилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,36	120,56	120,56	0,00	-64,95	5,52	-4,049
300	55,62	120,91	120,57	0,11	-65,03	5,96	-4,338
400	72,11	139,22	122,95	6,51	-68,73	30,21	-16,504
500	86,40	156,89	127,98	14,46	-71,65	55,29	-24,168
600	98,39	173,73	134,22	23,71	-73,88	80,89	-29,463
700	108,27	189,66	141,01	34,06	-75,48	106,83	-33,353
800	116,55	204,67	148,04	45,31	-76,60	132,94	-36,315
900	123,56	218,81	155,13	57,32	-77,27	159,19	-38,654
1000	129,77	232,16	162,17	70,00	-77,55	185,50	-40,538

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 423,9^\circ \text{K}$.

№ 208. 2,2,6-Триметилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	56,43	119,18	119,18	0,00	-65,64	5,25	-3,845
300	56,69	119,53	119,19	0,11	-65,72	5,68	-4,137
400	72,70	138,08	121,61	6,60	-69,34	30,06	-16,421
500	86,73	155,85	126,69	14,59	-72,22	55,25	-24,148
600	98,55	172,74	132,97	23,87	-74,41	80,95	-29,484
700	108,35	188,69	139,81	34,22	-76,01	106,99	-33,401
800	116,59	203,71	146,86	45,48	-77,12	133,19	-36,384
900	123,57	217,85	153,97	57,50	-77,79	159,54	-38,739
1000	129,77	231,20	161,04	70,17	-78,07	185,94	-40,635

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 422,08^\circ \text{K}$.

№ 209. 2,3,3-Триметилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	56,41	121,36	121,36	0,00	-62,01	8,23	-6,029
300	56,67	121,71	121,37	0,11	-62,09	8,66	-6,305
400	72,68	140,26	123,79	6,59	-65,71	32,81	-17,928
500	86,71	158,02	128,87	14,58	-68,59	57,79	-25,259
600	98,52	174,91	135,15	23,86	-70,79	83,27	-30,330
700	108,30	190,85	141,98	34,21	-72,39	109,09	-34,059
800	116,53	205,86	149,04	45,47	-73,50	135,08	-36,901
900	123,52	220,00	156,14	57,47	-74,18	161,21	-39,146
1000	129,74	233,34	163,20	70,14	-74,46	187,41	-40,955

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 433,3^\circ \text{K}$.

№ 210. 2,3,4-Триметилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,70	123,59	123,59	0,00	-61,11	8,46	-6,201
300	54,95	123,93	123,60	0,11	-61,19	8,89	-6,474
400	71,05	142,00	125,95	6,43	-64,98	32,85	-17,947
500	84,89	159,38	130,91	14,24	-68,03	57,67	-25,206
600	96,85	175,94	137,05	23,34	-70,41	83,03	-30,243
700	106,79	191,64	143,74	33,54	-72,17	108,77	-33,956
800	115,14	206,46	150,66	44,64	-73,43	134,68	-36,792
900	122,27	220,44	157,64	56,52	-74,24	160,76	-39,037
1000	128,50	233,65	164,59	69,07	-74,64	186,92	-40,849

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 433,0^\circ \text{K}$.

№ 211. 2,3,5-Триметилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	53,65	123,59	123,59	0,00	-62,27	7,30	-5,351
300	53,90	123,93	123,60	0,10	-62,35	7,73	-5,629
400	70,48	141,76	125,92	6,34	-66,22	31,70	-17,321
500	84,58	159,04	130,82	14,11	-69,32	56,55	-24,718
600	96,72	175,57	136,92	23,20	-71,72	81,95	-29,850
700	106,76	191,25	143,57	33,38	-73,48	107,72	-33,631
800	115,16	206,07	150,46	44,49	-74,74	133,68	-36,518
900	122,31	220,06	157,43	56,37	-75,55	159,80	-38,802
1000	128,53	233,27	164,36	68,92	-75,95	185,99	-40,616

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 433,8^\circ \text{K}$.

№ 212. 2,3,6-Триметилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,72	122,90	122,90	0,00	-62,96	6,82	-4,996
300	54,97	123,24	122,91	0,11	-63,04	7,24	-5,277
400	71,07	141,32	125,26	6,43	-66,82	31,27	-17,087
500	84,91	158,70	130,22	14,24	-69,88	56,16	-24,548
600	96,88	175,27	136,36	23,35	-72,25	81,59	-29,749
700	106,84	190,97	143,05	33,55	-74,01	107,39	-33,528
800	115,20	205,80	149,98	44,66	-75,26	133,38	-36,436
900	122,32	219,78	156,96	56,54	-76,07	159,52	-38,736
1000	128,53	233,00	163,91	69,09	-76,46	185,74	-40,592

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 429,1^\circ \text{K}$.

№ 213. 2,4,4-Триметилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,36	121,36	121,36	0,00	-62,49	7,75	-5,677
300	55,62	121,71	121,37	0,11	-62,57	8,18	-5,956
400	72,11	140,02	123,75	6,51	-66,27	32,35	-17,673
500	86,40	157,69	128,78	14,46	-69,19	57,35	-25,068
600	98,39	174,53	135,02	23,71	-71,42	82,87	-30,184
700	108,27	190,46	141,81	34,06	-73,02	108,73	-33,946
800	116,55	205,47	148,84	45,31	-74,14	134,76	-36,812
900	123,56	219,61	155,93	57,32	-74,81	160,93	-39,077
1000	129,77	232,96	162,97	70,00	-75,09	187,16	-40,901

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 424,1^\circ \text{K}$.

№ 214. 2,4,5-Триметилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	53,65	123,59	123,59	0,00	-62,27	7,30	-5,351
300	53,90	123,93	123,60	0,10	-62,35	7,73	-5,629
400	70,48	141,76	125,92	6,34	-66,22	31,70	-17,321
500	84,58	159,04	130,82	14,11	-69,32	56,55	-24,718
600	96,72	175,57	136,92	23,20	-71,72	81,95	-29,850
700	106,76	191,25	143,57	33,38	-73,48	107,72	-33,631
800	115,16	206,07	150,46	44,49	-74,74	133,68	-36,518
900	122,31	220,06	157,43	56,37	-75,55	159,80	-38,802
1000	128,53	233,27	164,36	68,92	-75,95	185,99	-40,646

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 429,6^\circ \text{K}$.

№ 215. 2,4,6-Триметилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	53,67	121,52	121,52	0,00	-60,52	9,67	-7,086
300	53,92	121,86	121,53	0,10	-60,60	10,10	-7,356
400	70,50	139,70	123,85	6,35	-64,47	34,28	-18,729
500	84,60	156,98	128,76	14,12	-67,56	59,34	-25,935
600	96,75	173,51	134,85	23,20	-69,96	84,94	-30,939
700	106,81	189,20	141,50	33,39	-71,72	110,92	-34,628
800	115,22	204,03	148,40	44,51	-72,97	137,08	-37,446
900	122,36	218,02	155,37	56,39	-73,78	163,40	-39,677
1000	128,56	231,24	162,30	68,95	-74,17	189,80	-41,478

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 420,7^\circ \text{K}$.

№ 216. 2,5,5-Триметилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

°K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,36	121,36	121,36	0,00	-64,38	5,86	-4,292
300	55,62	121,71	121,37	0,11	-64,46	6,29	-4,579
400	72,11	140,02	123,75	6,51	-68,16	30,46	-16,641
500	86,40	157,69	128,78	14,46	-71,08	55,46	-24,242
600	98,39	174,53	135,02	23,71	-73,31	80,98	-29,496
700	108,27	190,46	141,81	34,06	-74,91	106,84	-33,356
800	116,55	205,47	148,84	45,31	-76,03	132,87	-36,296
900	123,56	219,61	155,93	57,32	-76,70	159,04	-38,618
1000	129,77	232,96	162,97	70,00	-76,98	185,27	-40,488

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 425,95^\circ \text{K}$.

№ 217. 3,3,4-Триметилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

°K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,34	122,74	122,74	0,00	-61,32	8,50	-6,233
300	55,60	123,09	122,75	0,11	-61,40	8,93	-6,506
400	72,09	141,39	125,13	6,51	-65,10	32,97	-18,011
500	86,38	159,06	130,16	14,45	-68,03	57,83	-25,278
600	98,36	175,90	136,39	23,71	-70,25	83,22	-30,310
700	108,22	191,82	143,19	34,05	-71,86	108,94	-34,011
800	116,49	206,83	150,21	45,30	-72,98	134,83	-36,832
900	123,51	220,96	157,30	57,30	-73,67	160,87	-39,062
1000	129,74	234,30	164,34	69,97	-73,95	186,96	-40,858

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 435,0^\circ \text{K}$.

№ 218. 3,3,5-Триметилгептан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,29	122,74	122,74	0,00	-61,80	8,02	-5,881
300	54,55	123,08	122,75	0,11	-61,88	8,45	-6,157
400	71,52	141,16	125,10	6,43	-65,66	32,50	-17,757
500	86,07	158,72	130,08	14,33	-68,63	57,40	-25,087
600	98,23	175,52	136,26	23,56	-70,88	82,81	-30,164
700	108,19	191,44	143,02	33,90	-72,50	108,58	-33,898
800	116,51	206,44	150,02	45,14	-73,62	134,51	-36,744
900	123,55	220,58	157,08	57,15	-74,30	160,58	-38,992
1000	129,74	233,92	164,10	69,82	-74,57	186,71	-40,804

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 428,83^\circ \text{K}$.

№ 219. 3,4,4-Триметилгептан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,34	122,74	122,74	0,00	-61,32	8,50	-6,233
300	55,60	123,09	122,75	0,11	-61,40	8,93	-6,506
400	72,09	141,39	125,13	6,51	-65,10	32,97	-18,011
500	86,38	159,06	130,16	14,45	-68,03	57,83	-25,278
600	98,36	175,90	136,39	23,71	-70,25	83,22	-30,310
700	108,22	191,82	143,19	34,05	-71,86	108,94	-34,011
800	116,49	206,83	150,21	45,30	-72,98	134,83	-36,832
900	123,51	220,96	157,30	57,30	-73,67	160,87	-39,062
1000	129,74	234,30	164,34	69,97	-73,95	186,96	-40,858

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 434,3^\circ \text{K}$.

№ 220. 3,4,5-Триметилгептан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	53,63	123,59	123,59	0,00	-60,43	9,14	-6,700
300	53,88	123,93	123,60	0,10	-60,51	9,57	-6,969
400	70,46	141,76	125,92	6,34	-64,38	33,54	-18,326
500	84,56	159,03	130,82	14,11	-67,48	58,39	-25,523
600	96,69	175,55	136,91	23,19	-69,88	83,79	-30,521
700	106,71	191,23	143,56	33,37	-71,65	109,57	-34,207
800	115,10	206,04	150,46	44,47	-72,92	135,53	-37,022
900	122,26	220,02	157,42	56,35	-73,73	161,65	-39,251
1000	128,50	233,23	164,34	68,90	-74,13	187,84	-41,051

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 435,6^\circ \text{K}$.

№ 221. 3-Изопропил-2-метилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,70	121,52	121,52	0,00	-61,11	9,08	-6,654
300	54,95	121,86	121,53	0,11	-61,19	9,51	-6,926
400	71,05	139,93	123,88	6,43	-64,98	33,68	-18,399
500	84,89	157,31	128,84	14,24	-68,03	58,71	-25,659
600	96,85	173,87	134,98	23,34	-70,41	84,28	-30,696
700	106,79	189,57	141,67	33,54	-72,17	110,21	-34,409
800	115,14	204,39	148,59	44,64	-73,43	136,34	-37,244
900	122,27	218,37	155,57	56,52	-74,24	162,63	-39,489
1000	128,50	231,58	162,52	69,07	-74,64	188,99	-41,301

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 439,8^\circ \text{K}$.

№ 222. 3,3-Диэтилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,78	122,29	122,29	0,00	-60,15	9,81	-7,189
300	55,05	122,63	122,30	0,11	-60,23	10,24	-7,457
400	71,64	140,79	124,66	6,46	-63,98	34,33	-18,753
500	86,12	158,38	129,66	14,37	-66,94	59,26	-25,900
600	98,17	175,18	135,86	23,60	-69,19	84,71	-30,853
700	108,07	191,08	142,62	33,92	-70,82	110,51	-34,500
800	116,37	206,06	149,62	45,16	-71,95	136,47	-37,280
900	123,40	220,18	156,69	57,15	-72,65	162,58	-39,479
1000	129,69	233,52	163,71	69,81	-72,93	188,76	-41,251

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 439,4^\circ \text{K}$.

№ 223. 3,4-Диэтилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	53,07	123,25	123,25	0,00	-59,17	10,50	-7,698
300	53,33	123,58	123,26	0,10	-59,25	10,93	-7,961
400	70,01	141,27	125,55	6,29	-63,17	34,95	-19,093
500	84,30	158,46	130,43	14,02	-66,31	59,85	-26,160
600	96,50	174,94	136,48	23,08	-68,73	85,31	-31,073
700	106,56	190,60	143,11	33,25	-70,52	111,15	-34,699
800	114,98	205,39	149,98	44,34	-71,79	137,17	-37,471
900	122,15	219,35	156,92	56,20	-72,62	163,36	-39,666
1000	128,45	232,56	163,83	68,74	-73,03	189,62	-41,439

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 437,0^\circ \text{K}$.

№ 224. 3-Этил-2,2-диметилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,34	120,56	120,56	0,00	-61,89	8,58	-6,292
300	55,60	120,91	120,57	0,11	-61,97	9,02	-6,568
400	72,09	139,21	122,95	6,51	-65,67	33,27	-18,176
500	86,38	156,88	127,98	14,45	-68,60	58,35	-25,506
600	98,36	173,72	134,21	23,71	-70,82	83,95	-30,579
700	108,22	189,64	141,01	34,05	-72,43	109,90	-34,309
800	116,49	204,65	148,03	45,30	-73,55	136,00	-37,153
900	123,51	218,78	155,12	57,30	-74,24	162,26	-39,400
1000	129,74	232,12	162,16	69,97	-74,52	188,57	-41,210

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 429,2^\circ \text{K}$.

№ 225. 4-Этил-2,2-диметилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,29	119,18	119,18	0,00	-62,37	8,52	-6,242
300	54,55	119,52	119,19	0,11	-62,45	8,95	-6,519
400	71,52	137,60	121,54	6,43	-66,23	33,35	-18,223
500	86,07	155,16	126,52	14,33	-69,20	58,61	-25,616
600	98,23	171,96	132,70	23,56	-71,45	84,38	-30,734
700	108,19	187,88	139,46	33,90	-73,07	110,50	-34,498
800	116,51	202,88	146,46	45,14	-74,19	136,78	-37,366
900	123,55	217,02	153,52	57,15	-74,87	163,21	-39,632
1000	129,77	230,36	160,54	69,83	-75,14	189,70	-41,458

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 420^\circ \text{K}$.

№ 226. 3-Этил-2,3-диметилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,34	122,74	122,74	0,00	-60,75	9,07	-6,651
300	55,60	123,09	122,75	0,11	-60,83	9,50	-6,922
400	72,09	141,39	125,13	6,51	-64,53	33,54	-18,323
500	86,38	159,06	130,16	14,45	-67,46	58,40	-25,527
600	98,36	175,90	136,39	23,71	-69,68	83,79	-30,517
700	108,22	191,82	143,19	34,05	-71,29	109,51	-34,189
800	116,49	206,83	150,21	45,30	-72,41	135,40	-36,988
900	123,51	220,96	157,30	57,30	-73,10	161,44	-39,200
1000	129,74	234,30	164,34	69,97	-73,38	187,53	-40,983

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 436,8^\circ \text{K}$.

№ 227. 4-Этил-2,3-диметилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	53,63	122,90	122,90	0,00	-60,43	9,35	-6,851
300	53,88	123,24	122,91	0,10	-60,51	9,77	-7,120
400	70,46	141,07	125,23	6,34	-64,38	33,82	-18,477
500	84,56	158,34	130,13	14,11	-67,48	58,74	-25,674
600	96,69	174,86	136,22	23,19	-69,88	84,21	-30,671
700	106,71	190,54	142,87	33,37	-71,65	110,05	-34,357
800	115,10	205,35	149,77	44,47	-72,92	136,08	-37,173
900	122,26	219,33	156,73	56,35	-73,73	162,27	-39,402
1000	128,50	232,54	163,65	68,90	-74,13	188,53	-41,202

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 434,0^\circ \text{K}$.

№ 228. 3-Этил-2,4-диметилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	53,63	123,59	123,59	0,00	-60,43	9,14	-6,700
300	53,88	123,93	123,60	0,10	-60,51	9,57	-6,969
400	70,46	141,76	125,92	6,34	-64,38	33,54	-18,326
500	84,56	159,03	130,82	14,11	-67,48	58,39	-25,523
600	96,69	175,55	136,91	23,19	-69,88	83,79	-30,521
700	106,71	191,23	143,56	33,37	-71,65	109,57	-34,207
800	115,19	206,04	150,46	44,47	-72,92	135,53	-37,022
900	122,26	220,02	157,42	56,35	-73,73	161,65	-39,251
1000	128,50	233,23	164,34	68,90	-74,13	187,84	-41,051

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 433,2^\circ \text{K}$.

№ 229. 4-Этил-2,4-диметилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,29	121,36	121,36	0,00	-61,23	9,01	-6,601
300	54,55	121,70	121,37	0,11	-61,31	9,44	-6,873
400	71,52	139,78	123,72	6,43	-65,09	33,62	-18,370
500	86,07	157,34	128,70	14,33	-68,06	58,66	-25,638
600	98,23	174,14	134,88	23,56	-70,31	84,21	-30,673
700	108,19	190,06	141,64	33,90	-71,93	110,11	-34,377
800	116,51	205,06	148,64	45,14	-73,05	136,18	-37,201
900	123,55	219,20	155,70	57,15	-73,73	162,39	-39,432
1000	129,77	232,54	162,72	69,83	-74,00	188,66	-41,230

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 434,2^\circ \text{K}$.

№ 230. 3-Этил-2,5-диметилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	53,65	122,90	122,90	0,00	-62,27	7,51	-5,502
300	53,90	123,24	122,91	0,10	-62,35	7,93	-5,779
400	70,48	141,07	125,23	6,34	-66,22	31,98	-17,471
500	84,58	158,35	130,13	14,11	-69,32	56,90	-24,869
600	96,72	174,88	136,23	23,20	-71,72	82,37	-30,000
700	106,76	190,56	142,88	33,38	-73,48	108,21	-33,782
800	115,16	205,38	149,77	44,49	-74,74	134,23	-36,668
900	122,31	219,37	156,74	56,37	-75,55	160,42	-38,953
1000	128,53	232,58	163,67	68,92	-75,95	186,68	-40,797

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 427,2^\circ \text{K}$.

№ 231. 4-Этил-3,3-диметилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,27	121,36	121,36	0,00	-60,63	9,61	-7,041
300	54,53	121,70	121,37	0,11	-60,71	10,04	-7,311
400	71,50	139,77	123,72	6,43	-64,49	34,22	-18,698
500	86,05	157,33	128,69	14,32	-67,47	59,26	-25,901
600	98,20	174,13	134,88	23,56	-69,72	84,82	-30,892
700	108,14	190,03	141,63	33,89	-71,34	110,72	-34,566
800	116,45	205,03	148,63	45,13	-72,46	136,79	-37,367
900	123,50	219,16	155,69	57,13	-73,15	163,00	-39,580
1000	129,74	232,50	162,71	69,80	-73,43	189,28	-41,364

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 436,0^\circ \text{K}$.

№ 232. 3-Этил-3,4-диметилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,27	122,74	122,74	0,00	-60,06	9,76	-7,157
300	54,53	123,08	122,75	0,11	-60,14	10,19	-7,424
400	71,50	141,15	125,10	6,43	-63,92	34,24	-18,707
500	86,05	158,71	130,07	14,32	-66,90	59,14	-25,848
600	98,20	175,51	136,26	23,56	-69,15	84,56	-30,798
700	108,14	191,41	143,01	33,89	-70,77	110,32	-34,442
800	116,45	206,41	150,01	45,13	-71,89	136,25	-37,221
900	123,50	220,54	157,07	57,13	-72,58	162,33	-39,417
1000	129,74	233,88	164,09	69,80	-72,86	188,47	-41,187

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 435,2^\circ \text{K}$.

№ 233. 2,2,3,3-Тетрамтилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	56,67	115,91	115,91	0,00	-61,63	10,23	-7,499
300	56,93	116,27	115,92	0,11	-61,71	10,67	-7,773
400	73,59	134,98	118,35	6,65	-65,27	35,37	-19,323
500	88,00	153,00	123,49	14,76	-68,04	60,86	-26,600
600	99,88	170,12	129,85	24,17	-70,10	86,83	-31,626
700	109,60	186,27	136,77	34,65	-71,57	113,12	-35,316
800	117,75	201,45	143,92	46,03	-72,56	139,56	-38,123
900	124,65	215,73	151,11	58,16	-73,12	166,12	-40,338
1000	130,81	229,18	158,25	70,94	-73,29	192,74	-42,120

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюзю и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]. Температуры переходов отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 219,15^\circ \text{K}$ и $T_b = 433,46^\circ \text{K}$.

№ 234. 2,2,3,4-Тетраметилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,83	118,14	118,14	0,00	-60,55	10,65	-7,803
300	55,08	118,48	118,15	0,11	-60,63	11,08	-8,073
400	71,95	136,70	120,52	6,48	-64,36	35,58	-19,441
500	86,31	154,34	125,53	14,41	-67,30	60,92	-26,627
600	98,39	171,18	131,75	23,66	-69,53	86,77	-31,606
700	108,29	187,11	138,53	34,01	-71,13	112,97	-35,269
800	116,57	202,12	145,55	45,27	-72,24	139,33	-38,062
900	123,61	216,27	152,63	57,28	-72,92	165,84	-40,269
1000	129,79	229,62	159,67	69,96	-73,19	192,40	-42,047

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюзю и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 431,9^\circ \text{K}$.

№ 235. 2,2,3,5-Тетраметилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,85	117,45	117,55	0,00	-64,29	7,11	-5,212
300	55,10	117,80	117,46	0,11	-64,37	7,55	-5,499
400	71,97	136,02	119,83	6,48	-68,10	32,12	-17,548
500	86,33	153,66	124,84	14,42	-71,04	57,53	-25,143
600	98,42	170,50	131,06	23,67	-73,26	83,45	-30,394
700	108,34	186,44	137,84	34,02	-74,86	109,71	-34,251
800	116,63	201,46	144,87	45,28	-75,97	136,14	-37,189
900	123,66	215,61	151,95	57,30	-76,64	162,71	-39,509
1000	129,82	228,97	158,99	69,98	-76,90	189,34	-41,378

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюзю и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 421,5^\circ \text{K}$.

№ 236. 2,2,4,4-Тетраметилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,49	115,91	115,91	0,00	-61,50	10,36	-7,594
300	55,75	116,26	115,92	0,11	-61,58	10,80	-7,868
400	73,01	134,72	118,32	6,57	-65,23	35,51	-19,402
500	87,82	152,65	123,40	14,63	-68,03	61,04	-26,677
600	99,93	169,77	129,72	24,04	-70,10	87,04	-31,704
700	109,77	185,93	136,60	34,54	-71,56	113,37	-35,393
800	117,98	201,14	143,73	45,93	-72,53	139,84	-38,200
900	124,90	215,44	150,91	58,08	-73,07	166,43	-40,413
1000	131,06	228,93	158,05	70,89	-73,21	193,07	-42,194

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюзю и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 426,9^\circ \text{K}$.

№ 237. 2,2,4,5-Тетраметилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,85	117,45	117,45	0,00	-63,61	7,79	-5,711
300	55,10	117,80	117,46	0,11	-63,69	8,23	-5,994
400	71,97	136,02	119,83	6,48	-67,42	32,30	-17,919
500	86,33	153,66	124,84	14,42	-70,36	58,21	-25,440
600	98,42	170,50	131,06	23,67	-72,58	84,13	-30,641
700	108,34	186,44	137,84	34,02	-74,18	110,39	-34,463
800	116,63	201,46	144,87	45,28	-75,29	136,82	-37,375
900	123,66	215,61	151,95	57,30	-75,96	163,39	-39,674
1000	129,82	228,97	158,99	69,98	-76,22	190,02	-41,526

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 421,03^\circ \text{K}$.

№ 238. 2,2,5-Тетраметилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	56,56	112,35	112,35	0,00	-68,18	4,74	-3,476
300	56,82	112,71	112,36	0,11	-68,26	5,19	-3,780
400	73,60	131,40	114,79	6,65	-71,82	30,24	-16,523
500	88,15	149,44	119,93	14,76	-74,58	56,09	-24,516
600	100,09	166,60	126,29	24,19	-76,63	86,42	-30,019
700	109,85	182,78	133,22	34,70	-78,07	109,06	-34,048
800	118,02	198,00	140,37	46,10	-79,04	135,84	-37,108
900	124,91	212,30	147,58	58,26	-79,57	162,75	-39,519
1000	131,06	225,79	154,73	71,06	-79,72	189,70	-41,458

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Температуры переходов отображены Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 260,55^\circ \text{K}$ и $T_b = 410,61^\circ \text{K}$.

№ 239. 2,3,3,4-Тетраметилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,83	119,63	119,63	0,00	-60,66	10,09	-7,397
300	55,08	119,97	119,64	0,11	-60,74	10,52	-7,667
400	71,95	138,19	122,01	6,48	-64,47	34,88	-19,055
500	86,31	155,83	127,02	14,41	-67,41	60,07	-26,254
600	98,39	172,67	133,24	23,66	-69,64	85,77	-31,240
700	108,29	188,60	140,02	34,01	-71,24	111,82	-34,909
800	116,57	203,61	147,04	45,27	-72,35	138,03	-37,706
900	123,61	217,76	154,12	57,28	-73,03	164,39	-39,916
1000	129,79	231,11	161,16	69,96	-73,30	190,80	-41,697

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 437,74^\circ \text{K}$.

№ 240. 2,3,3,5-Тетраметилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,85	118,25	118,25	0,00	-61,83	9,33	-6,841
300	55,10	118,60	118,26	0,11	-61,91	9,77	-7,116
400	71,97	136,82	120,63	6,48	-65,64	34,26	-18,717
500	86,33	154,46	125,64	14,42	-68,58	59,59	-26,043
600	98,42	171,30	131,86	23,67	-70,80	85,43	-31,115
700	108,34	187,24	138,64	34,02	-72,40	111,61	-34,844
800	116,63	202,26	145,67	45,28	-73,51	137,96	-37,686
900	123,66	216,41	152,75	57,30	-74,18	164,45	-39,931
1000	129,82	229,77	159,79	69,98	-74,44	191,00	-41,740

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 426,3^\circ \text{K}$.

№ 241. 2,3,4,4-Тетраметилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,83	119,63	119,63	0,00	-59,98	10,77	-7,895
300	55,08	119,97	119,64	0,11	-60,06	11,20	-8,162
400	71,95	138,19	122,01	6,48	-63,79	35,56	-19,426
500	86,31	155,83	127,02	14,41	-66,73	60,75	-26,551
600	98,39	172,67	133,24	23,66	-68,96	86,45	-31,488
700	108,29	188,60	140,02	34,01	-70,56	112,50	-35,122
800	116,57	203,61	147,04	45,27	-71,67	138,71	-37,892
900	123,61	217,76	154,12	57,28	-72,35	165,07	-40,081
1000	129,79	231,11	161,16	69,96	-72,62	191,48	-41,846

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 434,7^\circ \text{K}$.

№ 242. 2,3,4,5-Тетраметилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,19	119,10	119,10	0,00	-61,67	9,24	-6,772
300	54,43	119,44	119,11	0,11	-61,75	9,67	-7,047
400	70,91	137,42	121,45	6,39	-65,57	34,09	-18,625
500	84,82	154,77	126,39	14,20	-68,64	59,37	-25,950
600	96,88	171,33	132,51	23,30	-71,01	85,20	-31,031
700	106,86	187,04	139,19	33,50	-72,76	111,39	-34,775
800	115,22	201,86	146,10	44,61	-74,02	137,77	-37,634
900	122,37	215,86	153,09	56,50	-74,82	164,31	-39,897
1000	128,55	229,08	160,03	69,05	-75,21	190,92	-41,723

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 429,3^\circ \text{K}$.

№ 243. 3,3,4,4-Тетраметилгексан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,60	116,71	116,71	0,00	-60,37	11,25	-8,247
300	55,86	117,06	116,72	0,11	-60,45	11,69	-8,516
400	73,00	135,54	119,12	6,57	-64,09	36,32	-19,844
500	87,67	153,45	124,21	14,63	-66,90	61,76	-26,995
600	99,72	170,53	130,52	24,02	-69,00	87,69	-31,940
700	109,52	186,66	137,40	34,49	-70,47	113,94	-35,573
800	117,71	201,84	144,51	45,86	-71,47	140,34	-38,337
900	124,64	216,11	151,68	57,99	-72,03	166,87	-40,519
1000	130,81	229,57	158,80	70,77	-72,20	193,44	-42,275

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 443,1^\circ \text{K}$.

№ 244. 2,4-Диметил-3-изопропилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,83	116,23	116,23	0,00	-61,67	10,40	-7,399
300	55,08	116,57	116,24	0,11	-61,75	10,53	-7,674
400	71,95	134,79	118,61	6,48	-65,48	35,23	-19,246
500	86,31	152,43	123,62	14,41	-68,42	60,76	-26,555
600	98,39	169,27	129,84	23,66	-70,65	86,80	-31,615
700	108,29	185,20	136,62	34,01	-72,25	113,19	-35,337
800	116,57	200,21	143,64	45,27	-73,36	139,74	-38,173
900	123,61	214,36	150,72	57,28	-74,04	166,44	-40,414
1000	129,79	227,71	157,76	69,96	-74,31	193,19	-42,220

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]. Температуры переходов отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 191,45^\circ \text{K}$ и $T_b = 430,19^\circ \text{K}$.

№ 245. 3,3-Диэтил-2-метилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,27	119,18	119,18	0,00	-59,49	11,40	-8,353
300	54,53	119,52	119,19	0,11	-59,57	11,83	-8,617
400	71,50	137,59	121,54	6,43	-63,35	36,23	-19,797
500	86,05	155,15	126,51	14,32	-66,33	61,49	-26,876
600	98,20	171,95	132,70	23,56	-68,58	87,26	-31,784
700	108,14	187,85	139,45	33,89	-70,20	113,38	-35,398
800	116,45	202,85	146,45	45,13	-71,32	139,67	-38,154
900	123,50	216,98	153,51	57,13	-72,01	166,10	-40,333
1000	129,74	230,32	160,53	69,80	-72,29	192,60	-42,090

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 442,8^\circ \text{K}$.

№ 246. 3-Этил-2,2,3-триметилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа)
Мол. вес. 142,276

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	55,60	117,29	117,29	0,00	-60,37	11,08	-8,121
300	55,86	117,64	117,30	0,11	-60,45	11,52	-8,389
400	73,00	136,12	119,70	6,57	-64,09	36,09	-19,717
500	87,67	154,03	124,79	14,63	-66,90	61,47	-26,868
600	99,72	171,11	131,10	24,02	-69,90	87,34	-31,843
700	109,52	187,24	137,98	34,49	-70,47	113,54	-35,446
800	117,71	202,42	145,09	45,86	-71,47	139,88	-38,210
900	124,64	216,69	152,26	57,99	-72,03	166,35	-40,392
1000	130,81	230,15	159,38	70,77	-72,20	192,86	-42,148

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 442,6^\circ \text{K}$.

№ 247. 3-Этил-2,2,4-триметилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа)
Мол. вес. 142,276

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	54,83	115,91	115,91	0,00	-60,55	11,31	-8,290
300	55,08	116,25	115,92	0,11	-60,63	11,75	-8,560
400	71,95	134,47	118,29	6,48	-64,36	36,47	-19,928
500	86,31	152,11	123,30	14,41	-67,30	62,04	-27,115
600	98,39	168,95	129,52	23,66	-69,53	88,11	-32,093
700	108,29	184,88	136,30	34,01	-71,13	114,53	-35,757
800	116,57	199,89	143,32	45,27	-72,24	141,12	-38,549
900	123,61	214,04	150,40	57,28	-72,92	167,84	-40,756
1000	129,79	227,39	157,44	69,96	-73,19	194,63	-42,534

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 428,4^\circ \text{K}$.

№ 248. 3-Этил-2,3,4-триметилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа)
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	54,83	118,25	118,25	0,00	-60,09	11,07	-8,116
300	55,08	118,59	118,26	0,11	-60,17	11,51	-8,384
400	71,95	136,81	120,63	6,48	-63,90	36,00	-19,668
500	86,31	154,45	125,64	14,41	-66,84	61,33	-26,804
600	98,39	171,29	131,86	23,66	-69,07	87,17	-31,749
700	108,29	187,22	138,64	34,01	-70,67	113,35	-35,389
800	116,57	202,23	145,66	45,27	-71,78	139,70	-38,163
900	123,61	216,38	152,74	57,28	-72,46	166,20	-40,356
1000	129,79	229,73	159,78	69,96	-72,73	192,75	-42,124

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдом и Россини [820]. Точка кипения при нормальных условиях принята согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 442,59^\circ \text{K}$.

№ 249. 2,2,3,3,4-Пентаметилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа)
Мол. вес 142,276

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	56,42	112,80	112,80	0,00	-59,08	13,71	-10,047
300	56,67	113,15	112,81	0,11	-59,16	14,15	-10,310
400	73,47	131,82	115,24	6,64	-62,73	39,16	-21,397
500	87,67	149,78	120,36	14,71	-65,53	64,97	-28,399
600	99,55	166,85	126,70	24,09	-67,63	91,27	-33,243
700	109,27	182,95	133,60	34,55	-69,13	117,89	-36,805
800	117,41	198,08	140,72	45,89	-70,15	144,66	-39,518
900	124,33	212,32	147,90	57,99	-70,74	171,57	-41,660
1000	130,42	225,74	155,02	70,73	-70,95	198,52	-43,385

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Температуры переходов отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 236,70^\circ \text{K}$ и $T_b = 439,20^\circ \text{K}$.

№ 250. 2,2,3,4,4-Пентаметилпентан, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 142,276

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	56,03	110,62	110,62	0,00	-59,04	14,40	-10,553
300	56,28	110,97	110,63	0,11	-59,12	14,85	-10,816
400	73,44	129,57	113,05	6,62	-62,72	40,08	-21,898
500	88,06	147,58	118,16	14,71	-65,49	66,11	-28,897
600	100,09	164,73	124,51	24,14	-67,54	92,63	-33,737
700	109,87	180,92	131,42	34,65	-68,98	119,45	-37,293
800	118,04	196,14	138,57	46,06	-69,94	146,42	-39,999
900	124,96	210,45	145,77	58,21	-70,48	173,52	-42,134
1000	131,08	223,94	152,92	71,02	-70,62	200,66	-43,852

Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены по методам Соудерса, Маттюза и Харда [1396, 1397]; энтальпия образования рассчитана Лаббауфом, Гриншилдсом и Россини [820]. Температуры переходов отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 234,40^\circ \text{K}$ и $T_b = 432,44^\circ \text{K}$.

№ 251. Ундекан, $\text{C}_{11}\text{H}_{24}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 156,302

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	61,53	139,48	139,48	0,00	-64,60	9,94	-7,289
300	61,84	139,87	139,49	0,12	-64,69	10,40	-7,576
400	78,18	159,93	142,11	7,13	-68,72	36,07	-19,706
500	93,05	179,01	147,60	15,71	-72,02	62,66	-27,387
600	105,70	197,13	154,36	25,67	-74,63	89,84	-32,722
700	116,48	214,25	161,70	36,79	-76,58	117,43	-36,660
800	125,69	230,42	169,29	48,91	-78,00	145,22	-39,671
900	133,66	245,69	176,94	61,83	-78,91	173,20	-42,056
1000	140,60	260,14	184,54	75,60	-79,36	201,26	-43,983

Результаты низкотемпературных измерений, полученные Финком, Гроссом, Уаддингтоном и Хаффманом [420], использовались в соче-

гании со значениями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_t = 236,6^\circ \text{K}$, $\Delta H_t^\circ = 1,639 \text{ ккал/моль}$, $T_m = 247,56^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 5,301 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 470,04^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 9,92 \text{ ккал/моль}$. Согласно измерениям Амброза, Кокса и Тоунсенда [13], $T_c = 638,7^\circ \text{K}$.

№ 252. Додекан, $\text{C}_{12}\text{H}_{26}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 170,328

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	67,00	148,78	148,78	0,00	-69,52	11,96	-8,769
300	67,33	149,20	148,79	0,13	-69,61	12,46	-9,078
400	85,13	171,05	151,64	7,77	-73,96	40,51	-22,132
500	101,30	191,83	157,62	17,11	-77,52	69,55	-30,400
600	115,04	211,54	164,98	27,94	-80,33	99,23	-36,142
700	126,76	230,18	172,97	41,05	-82,42	129,34	-40,381
800	136,76	247,77	181,23	53,23	-83,93	159,68	-43,621
900	145,41	264,39	189,56	67,35	-84,90	190,21	-46,188
1000	152,90	280,11	197,84	82,28	-85,37	220,83	-48,260

Результаты низкотемпературных измерений, полученные Финком, Гроссом, Уаддингтоном и Хаффманом [420], использовались в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 263,56^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 8,803 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 489,43^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 10,43 \text{ ккал/моль}$. Согласно измерениям Амброза, Кокса и Тоунсенда [13], $T_c = 658,2^\circ \text{K}$.

№ 253. Тридекан, $\text{C}_{13}\text{H}_{28}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 184,354

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	72,47	158,09	158,09	0,00	-74,45	13,97	-10,239
300	72,82	158,54	158,10	0,14	-74,55	14,51	-10,570
400	92,07	182,17	161,19	8,40	-79,22	44,94	-24,551
500	109,55	204,64	167,65	18,50	-83,03	76,43	-33,406
600	124,38	225,96	175,61	30,22	-86,03	108,60	-39,557
700	137,03	246,11	184,25	43,30	-88,27	141,25	-44,097
800	147,82	265,13	193,19	57,56	-89,88	174,12	-47,566
900	157,16	283,09	202,19	72,82	-90,91	207,21	-50,315
1000	165,20	300,08	211,13	88,95	-91,40	240,39	-52,534

Результаты низкотемпературных измерений, полученные Финком, Гроссом, Уаддингтоном и Хаффманом [420], использовались в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $Tt = 255,0^\circ \text{K}$, $\Delta Ht^\circ = 1,831 \text{ ккал/моль}$, $Tm = 267,78^\circ \text{K}$, $\Delta Hm^\circ = 6,812 \text{ ккал/моль}$ и $Tb = 508,58^\circ \text{K}$, при этом $\Delta Hv = 10,91 \text{ ккал/моль}$.

№ 254. Тетрадекан, $\text{C}_{14}\text{H}_{30}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 198,380

T, °K	ккал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔHf°	ΔGf°	
298	77,93	167,40	167,40	0,00	-79,38	15,97	-11,709
300	78,32	167,89	167,41	0,15	-79,49	16,56	-12,062
400	99,01	193,30	170,73	9,03	-84,47	49,36	-26,970
500	117,79	217,46	177,68	19,90	-88,55	83,31	-36,413
600	133,72	240,38	186,24	32,49	-91,74	117,98	-42,971
700	147,31	262,04	195,54	46,56	-94,13	153,15	-47,812
800	158,89	282,49	205,14	61,88	-95,83	188,57	-51,512
900	168,90	301,79	214,82	78,28	-96,91	224,21	-54,442
1000	177,60	320,05	224,43	95,62	-97,42	259,94	-56,808

Результаты низкотемпературных измерений, полученные Финком, Гроссом, Уаддингтоном и Хаффманом [420], использовались в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $Tm = 279,02^\circ \text{K}$, $\Delta Hm^\circ = 10,772 \text{ ккал/моль}$ и $Tb = 526,66^\circ \text{K}$, при этом $\Delta Hv = 11,38 \text{ ккал/моль}$.

№ 255. Пентадекан, $\text{C}_{15}\text{H}_{32}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 212,406

T, °K	ккал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔHf°	ΔGf°	
298	83,40	176,61	176,71	0,00	-84,31	17,98	-13,179
300	83,81	177,23	176,72	0,16	-84,42	18,61	-13,554
400	105,95	204,42	180,27	9,66	-89,73	53,79	-29,389
500	126,04	230,28	187,71	21,29	-94,06	90,19	-39,419
600	143,07	254,80	196,87	34,77	-97,45	127,35	-46,386
700	157,59	277,98	206,82	49,82	-99,98	165,05	-51,528
800	169,95	299,85	217,09	66,21	-101,78	203,01	-55,457
900	180,65	320,49	227,44	83,75	-102,92	241,20	-58,569
1000	189,90	340,02	237,73	102,29	-103,44	279,50	-61,081

Результаты низкотемпературных измерений, полученные Финком, Гроссом, Уаддингтоном и Хаффманом [420], использовались в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $Tt = 270,9^\circ \text{K}$, $\Delta Ht^\circ = 2,191 \text{ ккал/моль}$, $Tm = 283,10^\circ \text{K}$, $\Delta Hm^\circ = 8,268 \text{ ккал/моль}$ и $Tb = 543,76^\circ \text{K}$, при этом $\Delta Hv = 11,82 \text{ ккал/моль}$.

№ 256. Гексадекан, $\text{C}_{16}\text{H}_{34}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 226,432

T, °K	ккал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔHf°	ΔGf°	
298	88,86	186,02	186,02	0,00	-89,23	20,00	-14,656
300	89,31	186,58	186,03	0,17	-89,35	20,66	-15,053
400	112,89	215,55	189,82	10,30	-94,97	58,23	-31,813
500	134,28	243,10	197,74	22,68	-99,56	97,08	-42,430
600	152,41	269,23	207,50	37,04	-103,15	136,74	-49,804
700	167,86	293,91	218,10	53,07	-105,82	176,96	-55,246
800	181,02	317,20	229,04	70,53	-107,72	217,46	-59,405
900	192,39	339,20	240,07	89,22	-108,92	258,21	-62,699
1000	202,20	359,99	251,03	108,96	-109,46	299,06	-65,357

Результаты низкотемпературных измерений, полученные Финком, Гроссом, Уаддингтоном и Хаффманом [420], использовались в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $Tm = 291,33^\circ \text{K}$, $\Delta Hm^\circ = 12,753 \text{ ккал/моль}$ и $Tb = 559,94^\circ \text{K}$, при этом $\Delta Hv = 12,24 \text{ ккал/моль}$.

№ 257. Гептадекан, $\text{C}_{17}\text{H}_{36}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 240,458

T, °K	ккал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔHf°	ΔGf°	
298	94,33	195,33	195,33	0,00	-94,15	22,01	-16,133
300	94,80	195,92	195,34	0,18	-94,28	22,72	-16,552
400	119,83	226,68	199,36	10,93	-100,22	62,67	-34,237
500	142,53	255,92	207,77	24,08	-105,06	103,96	-45,440
600	161,75	283,65	218,13	39,32	-108,85	146,12	-53,222
700	178,14	309,84	229,38	56,33	-111,66	188,87	-58,965
800	192,08	334,56	241,00	74,86	-113,66	231,91	-63,353
900	204,14	357,90	252,70	94,68	-114,91	275,22	-66,828
1000	214,60	379,96	264,33	115,63	-115,47	318,63	-69,633

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 295,14^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 9,676 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 575,30^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 12,64 \text{ ккал/моль}$.

№ 258. Октадекан, $\text{C}_{18}\text{H}_{38}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 254,484

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	99,80	204,64	204,64	0,00	-99,08	24,02	-17,604
300	100,29	205,26	204,65	0,19	-99,21	24,77	-18,044
400	126,77	237,80	208,90	11,56	-105,47	67,09	-36,656
500	150,78	268,74	217,80	25,47	-110,57	110,84	-48,447
600	171,09	298,07	228,76	41,59	-114,55	155,50	-56,636
700	188,42	325,78	240,66	59,59	-117,51	200,77	-62,681
800	203,15	351,92	252,95	79,18	-119,61	246,36	-67,298
900	215,89	376,60	265,33	100,45	-120,92	292,21	-70,955
1000	226,90	399,93	277,63	122,30	-121,49	338,18	-73,906

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 301,33^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 14,815 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 589,86^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 13,02 \text{ ккал/моль}$.

№ 259. Нонадекан, $\text{C}_{19}\text{H}_{40}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 268,510

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	105,26	213,95	213,95	0,00	-104,00	26,03	-19,081
300	105,79	214,61	213,96	0,20	-104,14	26,83	-19,543
400	133,71	248,93	218,45	12,20	-110,72	71,53	-39,080
500	159,02	281,56	227,83	26,87	-116,07	117,73	-51,457
600	180,43	312,49	239,39	43,83	-120,25	164,88	-60,055
700	198,69	341,71	251,94	62,84	-123,35	212,68	-66,399
800	214,21	369,28	264,90	83,51	-125,55	260,81	-71,246
900	227,63	395,30	277,96	105,61	-126,91	309,22	-75,085
1000	239,20	419,90	290,93	128,97	-127,51	357,75	-78,182

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 305,05^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 12,0 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 603,75^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 13,39 \text{ ккал/моль}$.

№ 260. Эйкозан, $\text{C}_{20}\text{H}_{42}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 282,536

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	110,73	223,26	223,26	0,00	-108,93	28,04	-20,551
300	111,28	223,95	223,27	0,21	-109,08	28,88	-21,035
400	140,65	260,05	227,99	12,83	-115,97	75,96	-41,499
500	167,27	294,37	237,86	28,26	-121,58	124,61	-54,464
600	189,78	326,91	250,02	46,14	-125,96	171,25	-63,469
700	208,97	357,64	263,22	66,10	-129,20	224,58	-70,115
800	225,28	386,64	276,85	87,83	-131,50	275,25	-75,192
900	239,38	414,00	290,59	111,08	-132,92	326,21	-79,212
1000	251,60	439,87	304,23	135,65	-133,53	377,30	-82,156

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 309,59^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 16,8 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 616,95^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 13,74 \text{ ккал/моль}$.

Алкены. Таблицы для состояния идеального газа

№ 261. Этилен, C_2H_4 (состояние идеального газа). Мол. вес 28,052

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	10,41	52,45	52,45	0,00	12,50	16,28	-11,936
300	10,45	52,52	52,46	0,02	12,49	16,31	-11,879
400	12,90	55,87	52,89	1,19	11,77	17,69	-9,666
500	15,16	58,99	53,81	2,60	11,14	19,25	-8,412
600	17,10	61,93	54,92	4,21	10,60	20,92	-7,619
700	18,76	64,70	56,12	6,01	10,15	22,68	-7,079
800	20,20	67,30	57,36	7,95	9,77	24,49	-6,690
900	21,46	69,75	58,60	10,04	9,45	26,35	-6,399
1000	22,57	72,07	59,83	12,25	9,21	28,25	-6,173

Согласно низкотемпературным данным, полученным Эганом и Кемпом [372], $T_{tr} = 103,95^\circ \text{K}$ и $\Delta H_m^\circ = 0,800 \text{ ккал/моль}$. Значения термодинамических функций и энтальпии образования отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]; согласно этому источнику, $T_b = 169,44^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 3,237 \text{ ккал/моль}$. По данным Кобе и Линна [780], $T_c = 282,6^\circ \text{K}$, $P_c = 50,5 \text{ атм}$ и $d_c = 0,227 \text{ г/см}^3$.

№ 262. Пропен, C_3H_6 (состояние идеального газа). Мол. вес 42,078

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	15,27	63,80	63,80	0,00	4,88	14,99	-10,989
300	15,34	63,90	63,81	0,03	4,86	15,05	-10,966
400	19,10	68,83	64,45	1,76	3,76	18,62	-10,175
500	22,62	73,48	65,80	3,85	2,80	22,45	-9,814
600	25,70	77,88	67,45	6,27	1,98	26,46	-9,638
700	28,37	82,05	69,24	8,97	1,31	30,60	-9,553
800	30,68	85,99	71,09	11,93	0,77	34,82	-9,511
900	32,70	89,73	72,96	15,10	0,35	39,10	-9,495
1000	34,46	93,26	74,81	18,46	0,04	43,43	-9,491

Приняты термодинамические функции и энтальпии образования, отобранные Россини, Питчером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]; согласно этому источнику, $T_m = 87,91^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 0,718$ ккал/моль и $T_b = 225,45^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 4,402$ ккал/моль. Нанджиа и Бенсон [1046] определили константы равновесия для процесса дегидрирования пропана и установили хорошее согласие со значениями, рассчитанными из термических данных. По данным Кобе и Линна [780], $T_c = 364,9^\circ K$, $P_c = 45,6$ атм и $dc = 0,233$ г/см³.

№ 263. Бутен-1, C_4H_8 (состояние идеального газа). Мол. вес 56,104

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	20,47	73,04	73,04	0,00	-0,03	17,04	-12,489
300	20,57	73,17	73,05	0,04	-0,06	17,14	-12,488
400	26,04	79,85	73,92	2,38	-1,49	23,10	-12,622
500	30,93	86,20	75,75	5,23	-2,70	29,39	-12,847
600	35,14	92,22	78,00	8,54	-3,71	35,91	-13,078
700	38,71	97,91	80,44	12,24	-4,51	42,58	-13,293
800	41,80	103,29	82,96	16,27	-5,14	49,34	-13,479
900	44,49	108,37	85,50	20,58	-5,62	56,19	-13,644
1000	46,82	113,18	88,03	25,15	-5,94	63,08	-13,786

Приняты термодинамические функции, отобранные Россини, Питчером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]; согласно этому источнику, $T_m = 87,80^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 0,920$ ккал/моль и $T_b = 266,89^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 5,240$ ккал/моль. Выбор этих значений частично

основан на низкотемпературных термических данных Астона, Финка, Бестала, Пейса и Жажя [33]. Тщательные работы по определению констант равновесия для процесса дегидрирования бутана и по изучению изомерии положения и геометрической изомерии бутенов выполнены Голденом, Этгером и Бенсоном [503]. Получено хорошее согласие со значениями, рассчитанными из термических данных; исключение составляет слишком низкая величина энтропии 1-бутена, которая по термическим данным равна около 1 кал/(моль·°K). По данным Кобе и Линна [780], $T_c = 419,5^\circ K$, $P_c = 39,7$ атм и $dc = 0,234$ г/см³.

№ 264. Бутен-2, цис, C_4H_8 (состояние идеального газа). Мол. вес 56,104

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	18,86	71,90	71,90	0,00	-1,67	15,74	-11,536
300	18,96	72,02	71,91	0,04	-1,70	15,84	-11,542
400	24,33	78,22	72,71	2,21	-3,30	21,94	-11,989
500	29,39	84,20	74,42	4,90	-4,68	28,42	-12,421
600	33,80	89,96	76,53	8,06	-5,82	35,14	-12,800
700	37,60	95,46	78,85	11,64	-6,75	42,05	-13,129
800	40,87	100,70	81,25	15,56	-7,49	49,07	-13,404
900	43,70	105,68	83,69	19,80	-8,05	56,13	-13,641
1000	46,15	110,42	86,13	24,29	-8,44	63,34	-13,843

Приняты значения, отобранные Россини, Питчером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], а также результаты измерений, выполненных Скоттом, Фергюсоном и Брикуеддом [1326]. $T_m = 134,24^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 1,747$ ккал/моль и $T_b = 276,87^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 5,553$ ккал/моль. Согласно измерениям Амброза, Кокса и Тоупсенда [13], $T_c = 435,55^\circ K$. По данным Кобе и Линна [780], $P_c = 41$ атм и $dc = 0,238$ г/см³ для смеси цис- и транс-изомеров бутена-2.

№ 265. Бутен-2, транс, C_4H_8 (состояние идеального газа). Мол. вес. 56,104

Приняты результаты измерений Гуттмана и Питчера [553] и значения, отобранные Россини, Питчером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 167,60^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 2,332$ ккал/моль и $T_b = 274,03^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 5,439$ ккал/моль. Согласно измерениям Амброза, Кокса и Тоупсенда [13], $T_c = 428,6^\circ K$, а по данным Кобе и Линна [780], $P_c = 41$ атм и $dc = 0,238$ г/см³ для смеси цис- и транс-изомеров бутена-2.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	20,99	70,86	70,86	0,00	-2,67	15,05	-11,030
300	21,08	71,00	70,87	0,04	-2,70	15,16	-11,041
400	26,02	77,74	71,75	2,40	-4,41	21,33	-11,653
500	32,68	84,66	73,59	5,24	-5,33	27,83	-12,165
600	39,80	90,63	75,84	8,52	-6,37	34,56	-12,588
700	46,38	95,66	78,27	12,18	-7,20	41,46	-12,945
800	51,50	101,60	80,78	16,18	-7,87	48,45	-13,235
900	56,26	106,65	83,31	20,47	-8,38	55,52	-13,482
1000	60,58	110,83	85,82	25,01	-8,73	62,65	-13,692

№ 266. 2-Метилпропен, C₃H₆ (состояние идеального газа). Мол. вес 56,104

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	21,30	70,17	70,17	0,00	-4,04	13,88	-10,177
300	21,39	70,31	70,18	0,04	-4,07	13,99	-10,194
400	26,57	77,18	71,08	2,45	-5,43	20,23	-11,052
500	31,24	83,62	72,95	5,34	-6,60	26,78	-11,706
600	35,30	89,69	75,24	8,67	-7,58	33,55	-12,220
700	38,81	95,40	77,71	12,38	-8,37	40,47	-12,636
800	41,86	100,78	80,27	16,42	-9,00	47,49	-12,973
900	44,53	105,87	82,83	20,74	-9,47	54,59	-13,254
1000	46,85	110,69	85,38	25,31	-9,79	61,73	-13,490

Приняты результаты измерений Тодда и Паркса [1512] и значения, отобранные Россини, Питчером, Ариеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 132,80^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,415 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 266,25^\circ \text{K}$, при этом, по нашим расчетам, $\Delta H_v = 5,210 \text{ ккал/моль}$. Кобе и Липпа [780] отобрали следующие значения: $T_c = 417,8^\circ \text{K}$, $P_c = 39,5 \text{ атм}$ и $d_4 = 0,235 \text{ г/см}^3$. Тераниси и Бенсон [1478] определили константы равновесия для процесса дегидрирования изобутана в широком диапазоне температур и установили хорошее согласие со значениями, рассчитанными из термических данных.

№ 267. Пентен-1, C₅H₁₀ (состояние идеального газа). Мол. вес 70,130

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	26,19	82,65	82,65	0,00	-5,00	18,91	-13,854
300	26,31	82,82	82,66	0,05	-5,01	19,06	-13,885
400	33,19	91,33	83,77	3,03	-6,77	27,37	-14,951
500	39,23	99,39	86,19	6,65	-8,23	36,97	-15,766
600	44,56	107,03	88,95	10,85	-9,42	45,94	-16,406
700	49,06	114,24	92,06	15,54	-10,36	54,29	-16,922
800	52,95	121,05	95,26	20,64	-11,08	61,47	-17,338
900	56,22	127,49	98,49	26,11	-11,61	72,80	-17,684
1000	59,21	133,58	101,69	31,89	-11,94	82,24	-17,972

Приняты результаты измерений Тодда, Оливера и Хаффмана [1511] и значения, отобранные Россини, Питчером, Ариеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 107,94^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,388 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 303,12^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 6,022 \text{ ккал/моль}$. Согласно измерениям Амброза, Кокса и Тоунсенда [13], $T_c = 464,7^\circ \text{K}$. По данным Кобе и Липпа [780], $P_c = 40 \text{ атм}$.

№ 268. Пентен-2, цис, C₅H₁₀ (состояние идеального газа). Мол. вес 70,130

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	24,32	82,76	82,76	0,00	-6,71	17,17	-12,587
300	24,45	82,92	82,77	0,05	-6,75	17,32	-12,615
400	31,57	90,94	83,81	2,86	-8,65	25,64	-14,008
500	38,05	98,70	86,82	6,35	-10,24	34,46	-15,036
600	43,62	106,14	88,76	10,44	-11,54	43,45	-15,826
700	48,25	113,22	91,75	15,03	-12,37	52,71	-16,455
800	52,29	119,93	94,86	20,07	-13,37	62,68	-16,959
900	55,76	126,30	98,00	25,47	-13,95	74,55	-17,375
1000	58,78	132,33	101,13	31,20	-14,34	81,15	-17,720

Приняты значения, отобранные Россини, Питчером, Ариеттом, Брауном и Пиментелом [1248], а также результаты измерений, полученные Тоддом, Оливером и Хаффманом [1511]. $T_m = 121,77^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,700 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 310,08^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 6,240 \text{ ккал/моль}$. По данным Кобе и Липпа [780], $T_c = 475,5^\circ \text{K}$ и $P_c = 40,4 \text{ атм}$, однако соотношение между цис- и транс-изомерами не указано.

№ 269. Пентен-2, *транс*, C₅H₁₀ (состояние идеального газа). Мол. вес 70,130

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	25,92	81,36	81,36	0,00	-7,59	16,71	-12,248
300	26,04	81,53	81,37	0,05	-7,63	16,86	-12,280
400	32,67	89,94	82,47	2,99	-9,39	25,30	-13,824
500	38,75	97,90	84,76	6,57	-10,90	34,15	-14,925
600	44,02	105,44	87,59	10,72	-12,44	43,27	-15,761
700	48,54	112,57	90,65	15,35	-13,44	52,60	-16,420
800	52,45	119,31	93,82	20,40	-13,91	62,03	-16,946
900	55,85	125,69	97,01	25,82	-14,48	71,57	-17,378
1000	58,81	131,73	100,18	31,56	-14,86	81,16	-17,736

Приняты результаты измерений Годда, Оливера и Хаффмана [1511], а также значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 132,91^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,995 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 309,50^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 6,230 \text{ ккал/моль}$. По данным Кобе и Линна [780], $T_c = 475,5^\circ \text{K}$ и $P_c = 40,4 \text{ атм}$, однако соотношение между *цис*- и *транс*-изомерами не указано.

№ 270. 2-Метилбутен-1, C₅H₁₀ (состояние идеального газа). Мол. вес 70,130

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	26,28	81,15	81,15	0,00	-8,68	15,68	-11,195
300	26,41	81,32	81,16	0,05	-8,72	15,83	-11,532
400	33,20	89,86	82,27	3,01	-10,44	24,28	-13,268
500	39,40	97,95	84,61	6,68	-11,88	33,14	-14,483
600	44,72	105,62	87,48	10,89	-13,06	42,25	-15,389
700	49,26	112,86	90,59	15,59	-13,98	51,55	-16,094
800	53,15	119,70	93,80	20,72	-14,69	60,95	-16,651
900	56,52	126,16	97,04	26,21	-15,19	70,45	-17,106
1000	59,43	132,27	100,26	32,01	-15,50	79,99	-17,480

Приняты результаты измерений Скотта, Уаддингтона, Смита и Хаффмана [1324], статистические расчеты Мак-Каллоха и Скотта [1960], а также значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 135,60^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,891 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 304,31^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 6,094 \text{ ккал/моль}$.

№ 271. 3-Метилбутен-1, C₅H₁₀ (состояние идеального газа). Мол. вес 70,130

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	28,35	79,70	79,70	0,00	-6,92	17,87	-13,101
300	28,47	79,88	79,71	0,06	-6,95	18,03	-13,131
400	35,26	89,03	80,91	3,25	-8,46	26,59	-14,528
500	40,97	97,52	83,39	7,07	-9,73	35,50	-15,518
600	45,90	105,44	86,41	11,42	-10,77	44,65	-16,262
700	50,15	112,84	89,67	16,23	-11,59	53,96	-16,845
800	53,85	119,78	93,00	21,43	-12,21	63,36	-17,307
900	57,03	126,31	96,34	26,98	-12,66	72,84	-17,686
1000	59,83	132,47	99,65	32,82	-12,93	82,36	-17,999

Приняты результаты измерений Годда, Оливера и Хаффмана [1511], а также значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 104,67^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,281 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 293,21^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 1,750 \text{ ккал/моль}$. По данным Кобе и Линна [780], $T_c = 464,7^\circ \text{K}$ и $P_c = 33,9 \text{ атм}$.

№ 272. 2-Метилбутен-2, C₅H₁₀ (состояние идеального газа). Мол. вес 70,130

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	25,10	80,92	80,92	0,00	-10,17	14,26	-10,453
300	25,22	81,08	80,93	0,05	-10,21	14,41	-10,497
400	31,93	89,27	82,00	2,91	-12,05	22,91	-12,514
500	38,07	97,07	84,24	6,42	-13,63	31,83	-13,913
600	43,42	104,49	87,00	10,50	-14,94	41,05	-14,950
700	48,04	111,54	90,01	15,08	-15,99	50,47	-15,756
800	52,05	118,22	93,12	20,09	-16,81	60,01	-16,393
900	55,52	124,56	96,26	25,47	-17,41	69,66	-16,914
1000	58,55	130,57	99,40	31,18	-17,82	79,36	-17,344

Приняты результаты измерений Скотта, Уаддингтона, Смита и Хаффмана [1324], Годда, Оливера и Хаффмана [1511], а также значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном

и Пиментелом [1248]. $T_m = 139,38^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,816 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 311,72^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 6,287 \text{ ккал/моль}$. По данным Кобе и Лица [780], $T_c = 470^\circ \text{K}$ и $P_c = 34 \text{ атм}$.

№ 273. Гексен-1, C_6H_{12} (состояние идеального газа). Мол. вес 84,156

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	31,63	91,93	91,93	0,00	-9,96	20,90	-15,319
300	31,78	92,13	91,94	0,06	-10,00	21,09	-15,361
400	40,03	102,42	93,28	3,66	-12,05	31,78	-17,360
500	47,47	112,17	96,09	8,04	-13,77	42,94	-18,706
600	53,90	121,41	99,55	13,12	-15,16	54,41	-19,817
700	59,34	130,14	103,30	18,79	-16,24	66,10	-20,636
800	64,02	138,37	107,18	24,96	-17,07	77,91	-21,282
900	68,06	146,15	111,08	31,57	-17,65	89,82	-21,811
1000	71,54	153,51	114,96	38,56	-18,00	101,80	-22,246

Значения, отобранные Россици, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], использовались в сочетании с результатами измерений теплот сгорания, полученными Прозейом и Россици [1204], и данными низкотемпературных измерений, выполненных Мак-Каллохом, Финке, Гроссом, Мессерли и Уалдвингтоном [950]. $T_m = 133,39^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,234 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 336,63^\circ \text{K}$.

№ 274. Гексен-2, *цис*, C_6H_{12} (состояние идеального газа). Мол. вес 84,156

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	30,04	92,37	92,37	0,00	-12,51	18,22	-13,353
300	30,19	92,56	92,38	0,06	-12,56	18,41	-13,498
400	38,60	102,41	93,66	3,51	-14,76	29,07	-15,884
500	46,40	111,89	96,37	7,77	-16,60	40,25	-17,593
600	53,00	120,94	99,71	12,74	-18,09	51,76	-18,852
700	58,60	129,55	103,37	18,33	-19,25	63,50	-19,826
800	63,40	137,69	107,15	24,44	-20,14	75,38	-20,591
900	67,60	145,41	110,98	30,99	-20,78	87,37	-21,214
1000	71,20	152,72	114,79	37,94	-21,17	99,42	-21,726

Приняты результаты измерений энтальпии сгорания, полученные Бартоло и Россици [80], и значения, отобранные Россици, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 132,03^\circ \text{K}$ и $T_b = 342,04^\circ \text{K}$.

№ 275. Гексен-2, *транс*, C_6H_{12} (состояние идеального газа). Мол. вес 84,156

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	31,64	90,97	90,97	0,00	-12,88	18,27	-13,388
300	31,78	91,17	90,98	0,06	-12,92	18,46	-13,441
400	39,70	101,41	92,32	3,64	-14,99	29,24	-15,976
500	47,10	111,08	95,11	7,99	-16,74	40,51	-17,705
600	53,40	120,24	98,54	13,02	-18,18	52,09	-18,973
700	58,90	128,90	102,27	18,64	-19,31	63,90	-19,950
800	63,60	137,08	106,11	24,78	-20,17	75,84	-20,717
900	67,60	144,80	109,99	31,34	-20,80	87,89	-21,341
1000	71,20	152,11	113,84	38,28	-21,19	100,00	-21,853

Приняты значения, отобранные Россици, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], и величина энтальпии сгорания, измеренная Бартоло и Россици [80]. $T_m = 140,18^\circ \text{K}$ и $T_b = 341,63^\circ \text{K}$.

№ 276. Гексен-3, *цис*, C_6H_{12} (состояние идеального газа). Мол. вес 84,156

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	29,55	90,73	90,73	0,00	-11,38	19,84	-14,540
300	29,71	90,92	90,74	0,06	-11,43	20,03	-14,589
400	38,50	100,69	92,01	3,48	-13,66	30,86	-16,823
500	46,40	110,15	94,70	7,73	-15,50	42,22	-18,451
600	53,20	119,23	98,03	12,72	-16,98	53,09	-19,631
700	58,70	127,85	101,68	18,32	-18,13	65,81	-20,540
800	63,50	136,01	105,47	24,44	-19,01	77,85	-21,268
900	67,60	143,73	109,30	31,00	-19,64	90,01	-21,856
1000	71,20	151,05	113,11	37,94	-20,03	102,23	-22,340

Приняты результаты измерений энтальпии сгорания, полученные Бартоло и Россици [80], и значения, отобранные Россици, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 135,33^\circ \text{K}$ и $T_b = 339,60^\circ \text{K}$.

№ 277. Гексен-3, транс, C_6H_{12} (состояние идеального газа).
Мол. вес 84,156

T, °K	кал/(моль °K)			кал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	31,75	89,59	89,59	0,00	-13,01	18,55	-13,594
300	31,90	89,79	89,60	0,06	-13,05	18,74	-13,651
400	40,20	100,13	90,95	3,68	-15,69	29,66	-16,204
500	47,60	109,91	93,77	8,08	-16,79	41,05	-17,941
600	53,90	119,16	97,24	13,16	-18,17	52,74	-19,211
700	59,20	127,88	101,00	18,82	-19,26	64,66	-20,187
800	63,90	136,10	104,88	24,98	-20,10	76,70	-20,952
900	67,80	143,85	108,78	31,57	-20,70	88,84	-21,573
1000	71,40	151,19	112,66	38,53	-21,07	101,05	-22,082

Значения, отобранные Россипи, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], использовались в сочетании с результатами измерений энтальпии сгорания, полученными Бартоло и Россипи [80]. $T_m = 159,72^\circ \text{K}$ и $T_b = 340,24^\circ \text{K}$.

№ 278. 2-Метилпентен-1, C_6H_{12} (состояние идеального газа).
Мол. вес 84,156

T, °K	кал/(моль °K)			кал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	32,41	91,34	91,34	0,00	-12,49	18,55	-13,593
300	32,56	91,55	91,35	0,07	-12,53	18,73	-13,647
400	40,80	102,66	92,72	3,74	-14,50	29,47	-16,100
500	48,10	111,97	95,59	8,19	-16,15	40,66	-17,770
600	54,40	121,31	99,11	13,33	-17,49	52,11	-18,992
700	59,80	130,11	102,91	19,04	-18,52	63,84	-19,931
800	64,40	138,40	106,84	25,26	-19,30	75,65	-20,666
900	68,40	146,23	110,78	31,91	-19,84	87,56	-21,262
1000	71,80	153,61	114,70	38,92	-20,17	99,52	-21,750

Значения, отобранные Россипи, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], использовались в сочетании с результатами измерений энтальпии сгорания, полученными Бартоло и Россипи [80]. $T_m = 137,43^\circ \text{K}$ и $T_b = 335,26^\circ \text{K}$.

№ 279. 3-Метилпентен-1, C_6H_{12} (состояние идеального газа).
Мол. вес 84,156

T, °K	кал/(моль °K)			кал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	34,04	90,66	90,66	0,00	-10,76	20,66	-15,141
300	34,19	90,28	90,07	0,07	-10,80	20,85	-15,187
400	42,50	101,28	91,51	3,91	-12,60	31,68	-17,311
500	49,60	111,55	94,50	8,53	-14,09	42,93	-18,765
600	55,60	121,13	98,15	13,79	-15,29	54,45	-19,831
700	60,70	130,69	102,05	19,61	-16,22	66,15	-20,653
800	65,20	138,50	106,11	25,92	-16,91	77,96	-21,297
900	69,00	146,40	110,16	32,63	-17,39	89,86	-21,819
1000	72,30	153,85	114,16	39,70	-17,66	100,80	-22,247

Результаты измерений энтальпии сгорания, полученные Бартоло и Россипи [80], использовались в сочетании со значениями, отобранными Россипи, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 120,1^\circ \text{K}$ и $T_b = 327,33^\circ \text{K}$.

№ 280. 4-Метилпентен-1, C_6H_{12} (состояние идеального газа).
Мол. вес 84,156

T, °K	кал/(моль °K)			кал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	30,23	87,89	87,89	0,00	-10,54	21,52	-15,776
300	30,44	88,08	87,90	0,06	-10,59	21,72	-15,822
400	38,90	98,02	89,19	3,54	-12,76	32,83	-17,937
500	46,40	107,53	91,92	7,81	-14,59	44,45	-19,426
600	52,90	116,58	95,28	12,78	-16,08	56,39	-20,539
700	58,40	125,15	98,94	18,35	-17,26	68,57	-21,408
800	63,10	133,27	102,73	24,44	-18,17	80,89	-22,096
900	67,10	140,93	106,55	30,95	-18,85	93,32	-22,660
1000	70,70	148,19	110,36	37,84	-19,29	105,82	-23,126

Результаты измерений энтальпии сгорания, полученные Бартоло и Россипи [80], использовались в сочетании со значениями, отобранными Россипи, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 119,52^\circ \text{K}$ и $T_b = 327,01^\circ \text{K}$.

№ 281. 2-Метилпентен-2, C_6H_{12} (состояние идеального газа).
Мол. вес 84,156

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	30,26	90,45	90,45	0,00	-14,28	17,02	-12,476
300	30,42	90,64	90,46	0,06	-14,33	17,21	-12,538
400	39,00	100,59	91,75	3,54	-16,49	28,07	-15,334
500	46,60	110,13	94,48	7,83	-18,31	39,42	-17,231
600	53,20	119,23	97,86	12,83	-19,77	51,10	-18,614
700	58,60	127,84	101,53	18,42	-20,93	63,02	-19,675
800	63,40	135,99	105,33	24,53	-21,82	75,06	-20,506
900	67,50	143,70	109,17	31,08	-22,46	87,22	-21,180
1000	71,10	151,00	112,99	38,01	-22,86	99,44	-21,732

Значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], использовались в сочетании с результатами измерений энтальпии сгорания, полученными Бартоло и Россини [80]. $T_m = 138,08^\circ K$ и $T_b = 340,46^\circ K$.

№ 282. 3-Метилпентен-2, *цис*, C_6H_{12} (состояние идеального газа).
Мол. вес 84,156

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	30,26	90,45	90,45	0,00	-13,80	17,50	-12,827
300	30,42	90,64	90,46	0,06	-13,85	17,69	-12,888
400	39,00	100,59	91,75	3,54	-16,01	28,55	-15,596
500	46,60	110,13	94,48	7,83	-17,83	39,90	-17,440
600	53,20	119,23	97,86	12,83	-19,29	51,58	-18,789
700	58,60	127,84	101,53	18,42	-20,45	63,50	-19,824
800	63,40	135,99	105,33	24,53	-21,34	75,54	-20,637
900	67,50	143,70	109,17	31,08	-21,98	87,70	-21,296
1000	71,10	151,00	112,99	38,01	-22,38	99,92	-21,837

Результаты измерений энтальпии сгорания, полученные Бартоло и Россини [80], использовались в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 134,72^\circ K$ и $T_b = 343,59^\circ K$.

№ 283. 3-Метилпентен-2, *транс*, C_6H_{12} (состояние идеального газа).
Мол. вес 84,156

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	30,26	91,26	91,26	0,00	-14,02	17,04	-12,489
300	30,42	91,45	91,27	0,06	-14,07	17,23	-12,550
400	39,00	101,40	92,56	3,54	-16,23	28,00	-15,299
500	46,60	110,94	95,29	7,83	-18,05	39,28	-17,167
600	53,20	120,04	98,67	12,83	-19,51	50,88	-18,531
700	58,60	128,65	102,34	18,42	-20,67	62,71	-19,579
800	63,40	136,80	106,14	24,53	-21,56	74,68	-20,400
900	67,50	144,51	109,98	31,08	-22,20	86,75	-21,066
1000	71,10	151,81	113,80	38,01	-22,60	98,89	-21,612

Значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], использовались в сочетании с результатами измерений энтальпии сгорания, полученными Бартоло и Россини [80]. $T_m = 138,31^\circ K$ и $T_b = 340,85^\circ K$.

№ 284. 4-Метилпентен-2, *цис*, C_6H_{12} (состояние идеального газа).
Мол. вес 84,156

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	31,92	89,23	89,23	0,00	-12,03	19,63	-14,391
300	32,07	89,43	89,24	0,06	-12,07	19,83	-14,444
400	40,05	99,76	90,59	3,67	-14,11	30,78	-16,818
500	47,80	109,55	93,41	8,08	-15,81	42,21	-18,448
600	54,10	118,84	96,88	13,18	-17,17	53,94	-19,646
700	59,40	127,59	100,65	18,86	-18,24	65,89	-20,569
800	64,00	135,83	104,54	25,04	-19,06	77,95	-21,294
900	68,00	143,60	108,45	31,64	-19,65	90,12	-21,883
1000	71,50	150,95	112,34	38,62	-20,01	102,35	-22,367

Результаты измерений энтальпии сгорания, полученные Бартоло и Россини [80], использовались в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 138,72^\circ K$ и $T_b = 329,53^\circ K$.

№ 285. 4-Метилпентен-2, *транс*, C₆H₁₂ (состояние идеального газа).
Мол. вес 84,156

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	33,80	88,02	88,02	0,00	-12,99	19,03	-13,952
300	33,94	88,23	88,03	0,07	-13,03	19,23	-14,009
400	41,90	99,11	89,46	3,87	-14,87	30,28	-16,541
500	48,80	109,22	92,41	8,41	-16,43	41,75	-18,247
600	54,80	118,66	96,01	13,60	-17,72	53,50	-19,488
700	60,00	127,51	99,88	19,34	-18,72	65,46	-20,437
800	64,50	135,82	103,86	25,57	-19,49	77,53	-21,180
900	68,40	143,65	107,85	32,22	-20,02	89,70	-21,781
1000	71,80	151,03	111,80	39,24	-20,35	101,92	-22,274

Значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], использовались в сочетании с результатами измерений энтальпии сгорания, полученными Бартоло и Россини [80]. $T_m = 132,35^\circ \text{K}$ и $T_b = 331,76^\circ \text{K}$.

№ 286. 2-Этилбутен-1, C₆H₁₂ (состояние идеального газа). Мол. вес 84,156

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	31,92	90,01	90,01	0,00	-12,32	19,11	-14,008
300	32,08	90,21	90,02	0,06	-12,36	19,30	-14,062
400	40,70	100,65	91,38	3,71	-14,36	30,18	-16,487
500	48,20	110,56	94,23	8,17	-16,01	41,51	-18,142
600	54,50	119,92	97,74	13,31	-17,33	53,13	-19,352
700	59,80	128,73	101,55	19,03	-18,36	64,97	-20,283
800	64,40	137,02	105,47	25,25	-19,14	76,92	-21,012
900	68,40	144,84	109,41	31,89	-19,69	88,97	-21,603
1000	71,90	152,23	113,33	38,91	-20,00	101,07	-22,087

Приняты результаты измерений энтальпии сгорания, полученные Бартоло и Россини [80], и значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 141,62^\circ \text{K}$ и $T_b = 337,83^\circ \text{K}$.

№ 287. 2,3-Диметилбутен-1, C₆H₁₂ (состояние идеального газа).
Мол. вес 84,156

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	34,29	87,39	87,39	0,00	-13,32	18,89	-13,848
300	34,44	87,61	87,40	0,07	-13,36	19,09	-13,906
400	42,60	98,66	88,85	3,93	-15,14	30,19	-16,494
500	49,50	108,93	91,85	8,54	-16,63	41,70	-18,226
600	55,40	118,49	95,50	13,80	-17,85	53,48	-19,478
700	60,50	127,42	99,43	19,60	-18,80	65,45	-20,433
800	65,00	135,80	103,46	25,88	-19,51	77,52	-21,177
900	68,80	143,68	107,49	32,57	-20,01	89,69	-21,779
1000	72,20	151,11	111,49	39,62	-20,29	101,91	-22,271

Значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], использовались в сочетании с результатами измерений энтальпии сгорания, полученными Бартоло и Россини [80]. $T_m = 115,89^\circ \text{K}$ и $T_b = 328,77^\circ \text{K}$.

№ 288. 3,3-Диметилбутен-1, C₆H₁₂ (состояние идеального газа).
Мол. вес 84,156

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	30,23	82,16	82,16	0,00	-10,31	23,46	-17,197
300	30,39	82,35	82,17	0,06	-10,36	23,67	-17,242
400	38,90	92,28	83,46	3,53	-12,53	35,35	-19,315
500	46,70	101,82	86,18	7,82	-14,34	47,54	-20,779
600	53,40	110,94	89,56	12,84	-15,80	60,05	-21,873
700	58,90	119,60	93,24	18,46	-16,93	72,80	-22,727
800	63,60	127,78	97,05	24,59	-17,79	85,66	-23,401
900	67,30	135,48	100,89	31,14	-18,43	98,64	-23,932
1000	71,00	142,77	104,72	38,05	-18,85	111,68	-24,407

Результаты измерений, полученные Кеннеди, Шомейтом и Парком [741] и Бартоло и Россини [80], использовались в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 124,9^\circ \text{K}$, $\Delta H_f^\circ = 1,037$ ккал/моль. $T_m = 157,95^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 0,261$ ккал/моль и $T_b = 314,40^\circ \text{K}$.

№ 289. 2,3-Диметилбутен-2, C_6H_{12} (состояние идеального газа).
Мол. вес 84,156

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	29,54	87,15	87,15	0,00	-14,45	18,13	-13,292
300	29,68	87,34	87,16	0,06	-14,20	18,33	-13,354
400	37,48	96,95	88,41	3,42	-16,48	29,53	-16,135
500	45,04	106,14	91,05	7,55	-18,45	41,27	-18,038
600	51,78	114,96	94,30	12,40	-20,07	53,37	-19,438
700	57,67	123,40	97,86	17,88	-21,34	65,72	-20,517
800	62,78	131,44	101,56	23,91	-22,31	78,21	-21,366
900	67,25	139,10	105,31	30,41	-22,99	90,83	-22,055
1000	71,14	146,39	109,05	37,34	-23,41	103,51	-22,621

Приняты результаты низкотемпературных измерений Скотта, Финке, Мак-Каллоха, Гросса, Мессерли, Пеннингтона и Уаддингтона [1306], а также значение энтальпии сгорания, экспериментально установленное Бартоло и Россини [80]. $T_t = 196,81^\circ K$, $\Delta H_t^\circ = 0,844$ ккал/моль, $T_m = 198,88^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 1,542$ ккал/моль и $T_b = 346,35^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 7,083$ ккал/моль.

№ 290. Гептен-1, C_7H_{14} (состояние идеального газа). Мол. вес 98,182

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	37,10	101,24	101,24	0,00	-14,89	22,90	-16,789
300	37,27	101,48	101,25	0,07	-14,94	23,14	-16,853
400	46,97	113,55	102,83	4,29	-17,31	36,20	-19,779
500	55,72	124,99	106,13	9,44	-19,28	49,81	-21,773
600	63,24	135,83	110,18	15,40	-20,87	63,78	-23,231
700	69,62	146,07	114,58	22,05	-22,09	78,00	-24,351
800	75,08	155,73	119,13	29,29	-23,02	92,35	-25,228
900	79,81	164,86	123,71	37,04	-23,65	106,82	-24,938
1000	83,90	173,48	128,26	45,23	-24,02	121,35	-26,520

Результаты измерений, полученные Мак-Каллохом, Финке, Гроссом, Мессерли и Уаддингтоном [950], использовали для пересмотра значений, отобранных Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. Авторы работы [950] обнаружили две формы

кристаллов гептена-1 и изучили каждую кристаллическую форму при температурах от $11^\circ K$ до их тройной точки. Первоначальная кристаллизация всегда приводит к образованию низкоплавкой формы (он обозначается как кристалл II; $T_{tp} = 153,88^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = -3,021$ ккал/моль), которая после расплавления более чем наполовину и нагревания до точки плавления высокоплавкой формы (обозначаемой как кристалл I; $T_{tp} = 154,29^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 2,964$ ккал/моль) превращается в более высокоплавкую модификацию и затем может перекристаллизоваться в высокоплавкую форму. Таким образом, энтальпия плавления кристалла I на $0,057$ ккал/моль меньше, чем кристалла II; эта величина соответствует изменению энтальпии процесса кристалл II \rightarrow кристалл I при температуре плавления. $T_b = 366,79^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 7,440$ ккал/моль. По данным измерений Амброза, Кокса и Тоунсенда [13], $T_c = 537,2^\circ K$.

№ 291. Октеп-1, C_8H_{16} (состояние идеального газа). Мол. вес 112,208

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	42,56	110,55	110,55	0,00	-19,82	24,91	-18,259
300	42,77	110,82	110,56	0,08	-19,88	25,18	-18,345
400	53,91	124,67	112,37	4,93	-22,56	40,63	-22,198
500	63,96	137,81	116,16	10,83	-24,79	56,69	-24,779
600	72,58	150,25	120,81	17,67	-26,58	73,16	-26,645
700	79,89	162,00	125,87	25,30	-27,95	89,90	-28,067
800	86,15	173,09	131,08	33,61	-28,97	106,79	-29,173
900	91,55	183,56	136,34	42,50	-29,66	123,82	-30,065
1000	96,20	193,45	141,56	51,90	-30,05	140,91	-30,794

Приняты результаты измерений Мак-Каллоха, Финке, Гросса, Мессерли и Уаддингтона [950], а также значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_{tp} = 171,45^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 3,660$ ккал/моль и $T_b = 394,43^\circ K$; по сообщению Роккеффеллера и Россини [1236], $\Delta H_{v_{298}} = 9,70$ ккал/моль. По данным Амброза, Кокса и Тоунсенда [13], $T_c = 566,5^\circ K$.

№ 292. Нонен-1, C_9H_{18} (состояние идеального газа). Мол. вес 126,234

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 191,78^\circ K$ и $T_b = 420,02^\circ K$.

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	48,03	119,86	119,86	0,00	-24,74	26,93	-19,736
300	48,26	120,16	119,87	0,09	-24,80	27,24	-19,845
400	60,85	135,80	124,91	5,56	-27,81	45,07	-24,622
500	72,21	150,63	126,19	12,23	-30,29	63,58	-27,790
600	81,93	164,68	131,44	19,95	-32,28	82,54	-30,064
700	90,17	177,94	137,15	28,56	-33,79	101,81	-31,785
800	97,22	190,45	143,03	37,94	-34,90	121,25	-33,124
900	103,30	202,26	148,97	47,97	-35,65	140,82	-34,195
1000	108,50	213,42	154,86	58,57	-36,06	160,47	-35,069

№ 293. Децен-1, $C_{10}H_{20}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 140,260

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	53,49	129,17	129,17	0,00	-29,67	28,93	-21,206
300	53,76	129,51	129,18	0,10	-29,74	29,29	-21,336
400	67,79	146,93	131,46	6,19	-33,06	49,49	-27,041
500	80,45	163,45	136,22	13,62	-35,80	70,46	-30,796
600	91,27	179,10	142,07	22,22	-37,98	91,91	-33,478
700	100,44	193,87	148,43	31,82	-39,64	113,71	-35,501
800	108,28	207,81	154,99	42,26	-40,85	135,69	-37,067
900	115,04	220,96	161,59	53,44	-41,66	157,82	-38,322
1000	120,90	233,39	168,16	65,21	-42,09	180,03	-39,343

Результаты низкотемпературных измерений, полученные Мак-Каллохом, Финке, Гроссом, Мессерли и Уаддингтоном [950], использовались в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $Tl = 198,3^\circ K$, $\Delta H_f^\circ = 1,900$ ккал/моль, $Tm = 206,84^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 3,300$ ккал/моль и $Tb = 443,72^\circ K$.

№ 294. Ундецен-1, $C_{11}H_{22}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 154,286

Результаты низкотемпературных измерений, полученные Мак-Каллохом, Финке, Гроссом, Мессерли и Уаддингтоном [950], использовались в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питце-

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	58,96	138,48	138,48	0,00	-34,60	30,94	-22,676
300	59,25	138,85	138,49	0,11	-34,68	31,34	-22,826
400	74,74	158,05	141,00	6,83	-38,32	53,92	-29,459
500	88,70	176,27	146,25	15,02	-41,31	77,34	-33,802
600	100,61	193,52	152,70	24,50	-43,60	101,29	-36,892
700	110,72	209,81	159,71	35,08	-45,49	125,61	-39,216
800	119,34	225,17	166,94	46,59	-46,80	150,13	-41,412
900	126,79	239,67	174,22	58,90	-47,66	174,82	-42,449
1000	133,20	253,37	181,46	71,91	-48,11	199,58	-43,616

ром, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $Tl = 217,3^\circ K$, $\Delta H_f^\circ = 2,202$ ккал/моль, $Tm = 223,96^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 4,061$ ккал/моль и $Tb = 465,82^\circ K$.

№ 295. Додецен-1, $C_{12}H_{24}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 168,312

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	64,43	147,78	147,78	0,00	-39,52	32,96	-24,156
300	64,74	148,18	147,79	0,12	-39,60	33,40	-24,330
400	81,68	169,17	150,53	7,46	-43,56	58,36	-31,886
500	96,95	189,08	156,27	16,41	-46,82	84,23	-36,815
600	109,95	207,93	163,32	26,77	-49,39	110,68	-40,313
700	121,00	225,73	170,98	38,33	-51,33	137,53	-42,937
800	130,41	242,52	178,88	50,91	-52,74	164,59	-44,962
900	138,54	258,36	186,84	64,37	-53,66	191,83	-46,581
1000	145,50	273,33	194,75	78,58	-54,12	219,16	-47,894

Результаты низкотемпературных измерений, полученные Мак-Каллохом, Финке, Гроссом, Мессерли и Уаддингтоном [950], использовались в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $Tl = 212,9^\circ K$, $\Delta H_f^\circ = 1,088$ ккал/моль, $Tm = 237,92^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 4,758$ ккал/моль и $Tb = 486,51^\circ K$.

№ 296. Тридецен-1, $C_{13}H_{26}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 182,338

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $Tm = 250,08^\circ K$ и $Tb = 505,93^\circ K$.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH ^o	ΔG ^o	
298	69,89	157,09	157,09	0,00	-44,45	34,96	-25,626
300	70,24	157,53	157,10	0,13	-44,54	35,45	-25,822
400	88,62	180,30	160,08	8,09	-48,82	62,79	-33,304
500	105,19	201,90	166,30	17,80	-52,33	91,11	-39,822
600	119,29	222,35	173,95	20,05	-55,10	120,05	-43,727
700	131,27	241,66	182,26	41,59	-57,18	149,43	-46,653
800	141,48	259,83	190,83	55,24	-58,69	179,03	-48,907
900	150,28	277,06	199,47	69,84	-59,66	208,83	-50,708
1000	157,80	293,29	208,05	85,25	-60,15	238,71	-52,168

№ 297. Тетрадецен-1, C₁₄H₂₈ (состояние идеального газа). Мол. вес 196,364

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH ^o	ΔG ^o	
298	75,36	168,40	166,40	0,00	-49,36	36,99	-27,111
300	75,73	168,87	166,41	0,14	-49,46	37,51	-27,328
400	95,56	191,42	169,62	8,73	-54,05	67,24	-36,734
500	113,44	214,72	176,33	19,20	-57,82	98,01	-42,837
600	128,64	236,78	184,58	31,32	-60,79	129,45	-47,149
700	141,55	257,60	193,54	44,85	-63,01	161,35	-50,375
800	152,54	277,24	202,79	59,56	-64,62	193,50	-52,858
900	162,63	295,76	212,10	75,30	-65,65	225,84	-54,840
1000	170,20	313,27	221,35	91,93	-66,15	258,29	-56,446

Приняты значения России, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. T_m = 260,30° K и T_b = 524,25° K.

№ 298. Пентадецен-1, C₁₅H₃₀ (состояние идеального газа). Мол. вес 210,390

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH ^o	ΔG ^o	
298	80,82	175,71	175,71	0,00	-54,31	38,97	-28,566
300	81,23	176,22	175,72	0,15	-54,42	39,54	-28,806
400	102,50	202,55	179,16	9,36	-59,33	71,64	-39,142
500	121,68	227,53	186,36	20,59	-63,35	104,86	-45,834
600	137,98	251,20	195,21	33,60	-66,51	138,80	-50,556
700	151,82	273,53	204,82	48,10	-68,88	173,24	-54,084
800	163,60	294,59	214,74	63,89	-70,59	207,92	-56,798
900	173,77	314,46	224,73	80,77	-71,68	242,82	-58,962
1000	182,50	333,24	234,65	98,59	-72,20	277,82	-60,715

Приняты значения, отобранные России, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 269,42° K и T_b = 541,54° K.

№ 299. Гексадецен-1, C₁₆H₃₂ (состояние идеального газа). Мол. вес 224,416

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH ^o	ΔG ^o	
298	86,29	185,02	185,02	0,00	-59,23	40,99	-30,043
300	86,72	185,56	185,03	0,17	-59,34	41,60	-30,305
400	109,44	213,67	188,71	9,99	-64,57	76,08	-41,566
500	129,93	240,35	196,39	21,99	-68,85	111,75	-48,845
600	147,32	265,62	205,84	35,87	-72,21	148,19	-53,974
700	162,10	289,47	216,10	51,36	-74,72	185,15	-57,803
800	174,67	311,95	226,69	68,21	-76,53	222,37	-60,746
900	185,52	333,17	237,35	86,24	-77,67	259,83	-63,091
1000	194,80	353,21	247,95	105,26	-78,21	297,39	-64,991

Приняты значения, отобранные России, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 277,27° K и T_b = 558,02° K.

№ 300. Гептадецен-1, C₁₇H₃₄ (состояние идеального газа). Мол. вес 238,442

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH ^o	ΔG ^o	
298	91,76	194,33	194,33	0,00	-64,15	43,00	-31,521
300	92,21	194,90	194,34	0,18	-64,27	43,66	-31,804
400	116,38	224,80	198,25	10,62	-69,82	80,52	-43,990
500	138,18	253,17	206,42	23,38	-74,35	118,64	-51,856
600	156,66	280,04	216,47	38,15	-77,91	157,57	-57,392
700	172,38	305,40	227,38	54,62	-80,56	197,06	-61,521
800	185,74	329,31	238,64	72,54	-82,46	236,82	-64,694
900	197,27	351,87	249,98	91,70	-83,67	276,83	-67,221
1000	207,20	373,18	261,25	111,94	-84,22	316,95	-69,266

Приняты значения, отобранные России, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 284,4° K и T_b = 573,48° K.

№ 301. Октадецен-1, C₁₈H₃₆ (состояние идеального газа). Мол. вес 252,468

Приняты значения, отобранные России, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 290,8° K и T_b = 587,97° K.

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	97,22	203,64	203,64	0,00	-69,08	45,01	-32,991
300	97,71	204,25	203,65	0,19	-69,21	45,71	-33,296
400	132,32	235,92	207,79	11,26	-75,07	84,94	-46,409
500	146,42	265,99	216,45	24,77	-79,86	125,52	-54,862
600	166,00	294,46	227,10	40,42	-83,62	166,94	-60,806
700	182,65	321,33	238,66	57,87	-86,42	208,96	-65,237
800	196,80	345,67	250,60	76,86	-88,42	251,27	-68,639
900	209,01	370,57	262,61	97,17	-89,67	293,83	-71,348
1000	219,50	393,15	274,55	118,61	-90,25	336,51	-73,540

№ 302. Нопаден-1, C₁₀H₁₈ (состояние идеального газа). Мол. вес 266,494

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	102,69	212,95	212,95	0,00	-74,00	47,02	-34,468
300	103,20	213,59	212,96	0,20	-74,13	47,77	-34,795
400	130,26	247,05	217,34	11,89	-80,32	89,38	-48,833
500	154,67	278,81	226,48	26,17	-85,36	132,41	-57,873
600	175,35	308,88	237,73	42,69	-89,32	176,33	-64,225
700	192,93	337,27	249,94	61,13	-92,26	220,87	-68,955
800	207,86	364,03	262,55	81,19	-94,35	265,72	-72,587
900	220,76	389,27	275,24	102,63	-95,67	310,84	-75,478
1000	231,50	413,12	287,85	125,28	-96,26	356,07	-77,816

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 296,6° K и T_b = 602,3° K.

№ 303. Эйкозен-1, C₂₀H₄₀ (состояние идеального газа). Мол. вес 280,520

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	108,15	222,26	222,26	0,00	-78,93	49,03	-35,938
300	108,70	222,91	222,27	0,21	-79,07	49,81	-36,287
400	137,20	258,18	226,88	12,52	-85,57	93,81	-51,252
500	162,91	291,63	236,51	27,56	-90,87	139,29	-60,879
600	184,69	323,30	248,36	44,97	-95,03	185,70	-67,639
700	203,20	353,20	261,23	64,39	-98,11	232,77	-72,671
800	218,93	381,38	274,50	85,51	-100,30	280,16	-76,533
900	232,50	407,97	287,87	108,10	-101,68	327,83	-79,605
1000	244,20	433,09	301,15	131,95	-102,29	375,63	-82,090

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 301,8° K и T_b = 615,6° K.

Алкадиены. Таблицы для состояния идеального газа

№ 304. Аллен (пропадиен), C₃H₄ (состояние идеального газа). Мол. вес 40,062

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	14,10	58,30	58,30	0,00	45,92	48,37	-35,452
300	14,16	58,39	58,31	0,03	45,91	48,38	-35,243
400	17,21	62,89	58,90	1,60	45,35	49,29	-26,931
500	19,82	67,02	60,12	3,46	44,85	50,34	-22,001
600	22,00	70,83	61,59	5,55	44,41	51,47	-18,748
700	23,84	74,37	63,17	7,85	44,04	52,68	-16,447
800	25,42	77,66	64,77	10,31	43,71	53,94	-14,734
900	26,80	80,73	66,38	12,92	43,44	55,23	-13,412
1000	28,00	83,62	67,96	15,67	43,23	56,56	-12,360

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 136,85° K и T_b = 238,6° K. По данным Кубе и Линна [780], T_c = 393° K.

№ 305. Бутадиен-1,2, C₄H₆ (состояние идеального газа). Мол. вес 54,088

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	19,15	70,03	70,03	0,00	38,77	47,43	-34,766
300	19,23	70,15	70,04	0,04	38,75	47,48	-34,589
400	23,54	76,29	70,84	2,18	37,82	50,54	-27,612
500	27,39	81,96	72,51	4,73	37,00	53,82	-23,521
600	30,72	87,26	74,53	7,64	36,30	57,24	-20,849
700	33,54	92,21	76,70	10,86	35,72	60,78	-18,976
800	36,01	96,85	78,94	14,34	35,24	64,39	-17,590
900	38,16	101,22	81,17	18,05	34,87	68,06	-16,526
1000	40,02	105,34	83,39	21,96	34,61	71,77	-15,684

Приняты результаты измерений Астона и Жажа [44] и значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 136,96° K, ΔH_m = 1,664 ккал/моль и T_b = 284,00° K, при этом ΔH_v = 5,77 ккал/моль.

№ 306. Бутадиен-1,3, C_4H_6 (состояние идеального газа). Мол. вес 54,088

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	19,01	66,62	66,62	0,00	26,33	36,01	-26,393
300	19,11	66,74	66,63	0,04	26,31	36,07	-26,272
400	24,29	72,97	67,44	2,22	25,42	39,46	-21,559
500	28,52	78,86	69,14	4,87	24,70	43,06	-18,819
600	31,84	84,37	71,23	7,89	24,11	46,78	-17,039
700	34,55	89,48	73,47	11,21	23,63	50,60	-15,799
800	36,84	94,25	75,78	14,78	23,25	54,48	-14,882
900	38,81	98,71	78,08	18,57	22,95	58,40	-14,182
1000	40,52	102,89	80,35	22,54	22,74	62,36	-13,628

Приняты результаты измерений Скотта, Мейерса, Рэндса, Брикуедда и Беккедала [1327] и значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 164,24^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 1,908$ ккал/моль и $T_b = 268,74^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 5,572$ ккал/моль. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 425^\circ K$, $P_c = 42,7$ атм и $dc = 0,245$ г/см³.

№ 307. Пентадиен-1,2, C_5H_8 (состояние идеального газа). Мол. вес 68,114

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	25,20	79,70	79,70	0,00	34,80	50,29	-36,861
300	25,30	79,86	79,71	0,05	34,77	50,38	-36,702
400	31,40	88,00	80,77	2,90	33,61	55,77	-30,471
500	36,50	95,57	82,98	6,30	32,62	61,43	-26,849
600	40,80	102,61	85,68	10,17	31,80	67,26	-24,500
700	44,50	109,19	88,57	14,44	31,15	73,23	-22,864
800	47,70	115,34	91,54	19,05	30,64	79,27	-21,656
900	50,40	121,12	94,51	23,96	30,27	85,38	-20,733
1000	52,80	126,56	97,44	29,12	30,03	91,53	-20,002

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 135,89^\circ K$ и $T_b = 318,01^\circ K$.

№ 308. Пентадиен-1,3, *цис*, C_5H_8 (состояние идеального газа)
Мол. вес 68,114

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 132,33^\circ K$ и $T_b = 317,22^\circ K$.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	22,60	77,50	77,50	0,00	18,70	34,84	-25,540
300	22,70	77,65	77,51	0,05	18,67	34,94	-25,454
400	29,50	85,13	78,48	2,67	17,28	40,59	-22,176
500	35,30	92,36	80,54	5,92	16,14	46,55	-20,347
600	39,90	99,21	83,09	9,68	15,22	52,72	-19,202
700	43,80	105,66	85,85	13,87	14,48	59,04	-18,431
800	47,00	111,73	88,71	18,42	13,90	65,43	-17,874
900	49,80	117,43	91,59	23,26	13,47	71,91	-17,460
1000	52,20	122,80	94,45	28,36	13,17	78,42	-17,138

№ 309. Пентадиен-1,3, *транс*, C_5H_8 (состояние идеального газа).
Мол. вес 68,114

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	24,70	76,40	76,40	0,00	18,60	35,07	-25,708
300	24,90	76,56	76,41	0,05	18,57	35,17	-25,622
400	31,20	84,61	77,46	2,86	17,38	40,90	-22,344
500	36,60	92,17	79,65	6,26	16,39	46,89	-20,497
600	40,90	99,23	82,33	10,14	15,58	53,07	-19,329
700	44,60	105,82	85,22	14,42	14,94	59,38	-18,537
800	47,70	111,98	88,19	19,04	14,43	65,75	-17,962
900	50,30	117,76	91,16	23,94	14,05	72,20	-17,531
1000	52,60	123,18	94,09	29,09	13,80	78,68	-17,194

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 185,68^\circ K$ и $T_b = 315,18^\circ K$.

№ 310. Пентадиен-1,4, C_5H_8 (состояние идеального газа). Мол. вес 68,114

Приняты результаты измерений Паркса, Тодда и Шомейта [1119], а также значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 124,88^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 1,468$ ккал/моль и $T_b = 299,12^\circ K$.

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	25,40	79,70	79,70	0,00	25,20	40,69	-29,824
300	25,20	79,86	79,71	0,05	25,17	40,78	-29,709
400	31,30	87,97	80,77	2,88	24,00	46,17	-25,227
500	36,50	95,53	82,97	6,28	23,01	51,83	-22,656
600	40,80	102,57	85,66	10,15	22,19	57,67	-21,007
700	44,40	109,14	88,55	14,42	21,53	63,65	-19,871
800	47,60	115,28	91,51	19,02	21,01	69,69	-19,039
900	50,30	121,05	94,48	23,92	20,63	75,81	-18,408
1000	52,70	126,47	97,44	29,07	20,38	81,96	-17,912

№ 311. Пентадиен-2,3, C₅H₈ (состояние идеального газа). Мол. вес 68,114

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	24,20	77,60	77,60	0,00	33,10	49,21	-36,074
300	24,30	77,76	77,61	0,05	33,07	49,31	-35,922
400	29,90	85,52	78,63	2,76	31,78	54,93	-30,011
500	35,00	92,76	80,74	6,01	30,64	60,85	-26,597
600	39,40	99,54	83,31	9,74	29,68	66,98	-24,397
700	43,20	105,90	86,09	13,87	28,89	73,27	-22,875
800	46,60	111,90	88,94	18,37	28,26	79,65	-21,758
900	49,50	117,56	91,81	23,18	27,78	86,11	-20,908
1000	52,00	122,91	94,66	28,25	27,47	92,61	-20,239

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 147,50° K и T_b = 321,41° K.

№ 312. 3-Метилбутadiен-1,2, C₅H₈ (состояние идеального газа). Мол. вес 68,114

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	27,20	76,40	76,40	0,00	31,00	47,47	-34,797
300	27,33	76,56	76,41	0,05	30,97	47,57	-34,655
400	31,00	84,64	77,47	2,87	29,78	53,29	-29,117
500	36,00	92,10	79,66	6,23	28,75	59,29	-25,915
600	40,30	99,03	82,32	10,03	27,88	65,48	-23,850
700	44,00	105,55	85,18	14,27	27,18	71,81	-22,418
800	47,20	111,64	88,11	18,83	26,62	78,22	-21,366
900	50,00	117,37	91,05	23,59	26,20	84,70	-20,566
1000	52,40	122,77	94,00	28,70	25,93	91,22	-19,935

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 159,53° K и T_b = 314,00° K.

№ 313. 2-Метилбутadiен-1,3 (изопрен), C₅H₈ (состояние идеального газа). Мол. вес 68,114

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	25,00	75,44	75,44	0,00	18,10	34,86	-25,551
300	25,20	75,60	75,45	0,05	18,07	34,96	-25,467
400	31,80	83,78	76,52	2,91	16,92	40,77	-22,277
500	37,10	91,47	78,75	6,37	15,99	46,85	-20,476
600	41,40	98,62	81,47	10,30	15,23	53,09	-19,336
700	45,00	105,28	84,40	14,62	14,63	59,45	-18,561
800	48,00	111,49	87,41	19,27	14,16	65,88	-17,996
900	50,60	117,30	90,41	24,21	13,82	72,37	-17,573
1000	52,90	122,75	93,37	29,38	13,60	78,90	-17,242

Приняты результаты измерений Беккедала, Вуда и Войцеховского [99, 100] и значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 127,20° K, ΔH_m^o = 1,155 ккал/моль и T_b = 307,22° K, при этом ΔH_v = 6,191 ккал/моль

Алкены. Таблицы для состояния идеального газа

№ 314. Ацетилен (этин), C₂H₂ (состояние идеального газа). Мол. вес 26,036

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	10,50	48,00	48,00	0,00	54,19	50,00	-36,646
300	10,53	48,07	48,01	0,02	54,19	49,97	-36,401
400	11,97	51,31	48,44	1,15	54,13	48,57	-26,538
500	12,97	54,09	49,30	2,40	54,04	47,19	-20,627
600	13,73	56,52	50,30	3,74	53,92	45,83	-16,693
700	14,37	58,69	51,35	5,14	53,78	44,50	-13,892
800	14,93	60,65	52,39	6,61	53,62	43,18	-11,795
900	15,45	62,43	53,41	8,13	53,45	41,88	-10,170
1000	15,92	64,09	54,39	9,70	53,29	40,61	-8,375

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248] и Россини, Вагманом, Эвансом, Левингом и Джаффе [1249]. Согласно этим источникам, T_m = 191,7° K

при 1,18 атм, $\Delta H_m^\circ = 0,900$ ккал/моль и $T_s = 189,2^\circ$ К, при этом $\Delta H_s = 5,1$ ккал/моль. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 309^\circ$ К, $P_c = 61,6$ атм и $d_c = 0,231$ г/см³.

№ 315. Метилацетилен (пропин), C_3H_4 (состояние идеального газа).
Мол. вес 40,062

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	14,50	59,30	59,30	0,00	44,32	46,47	-34,060
300	14,55	59,39	59,31	0,03	44,31	46,48	-33,859
400	17,33	63,97	59,91	1,63	43,78	47,29	-25,836
500	19,74	68,10	61,14	3,49	43,28	48,22	-21,077
600	21,80	71,89	62,62	5,56	42,83	49,25	-17,939
700	23,58	75,39	64,20	7,84	42,42	50,36	-15,722
800	25,14	78,64	65,80	10,27	42,07	51,51	-14,072
900	26,51	81,68	67,40	12,86	41,77	52,71	-12,800
1000	27,71	84,54	68,97	15,57	41,53	53,95	-11,789

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 170,4^\circ$ К и $T_b = 249,93^\circ$ К. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 401^\circ$ К и $P_c = 52,8$ атм.

№ 316. Бутадин (диацетилен), C_4H_2 (состояние идеального газа).
Мол. вес 50,056

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	17,60	59,76	59,76	0,00	113,00	106,11	-77,778
300	17,65	59,87	59,77	0,04	113,00	106,07	-77,266
400	20,17	65,32	60,49	1,94	113,22	103,72	-56,670
500	21,86	70,01	61,94	4,04	113,35	101,33	-44,290
600	23,14	74,11	63,63	6,29	113,39	98,92	-36,030
700	24,20	77,76	65,39	8,66	113,37	96,51	-30,131
800	25,11	81,05	67,15	11,13	113,29	94,11	-25,708
900	25,90	84,05	68,86	13,68	113,18	91,72	-22,270
1000	26,61	86,82	70,52	16,30	113,07	89,34	-19,524

Приведены термодинамические функции, полученные Фериглом и Вебером [417] на основании отнесения колебаний согласно Джонсу [698]. По данным Крауса [810], энтальпия диссоциации диацетилена (предположительно до элементов при 298° К) составляет -113 ккал/моль.

№ 317. Винацетилен (бутен-1-ин-3), C_4H_4 (состояние идеального газа).
Мол. вес 52,072

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	17,49	66,77	66,77	0,00	72,80	73,13	-53,601
300	17,57	66,88	66,78	0,04	72,79	73,13	-53,271
400	21,26	72,46	67,51	1,98	72,36	73,31	-40,052
500	24,25	77,54	69,02	4,27	71,97	73,59	-32,165
600	26,67	82,18	70,83	6,81	71,61	73,95	-26,933
700	28,68	86,44	72,76	9,58	71,28	74,37	-23,217
800	30,40	90,39	74,72	12,54	70,99	74,82	-20,439
900	31,87	94,06	76,67	15,66	70,73	75,32	-18,239
1000	33,16	97,48	78,58	18,91	70,53	75,84	-16,575

Стамм, Халверсон и Уоллен [1404] изучали реакцию образования винацетилена из 2 молей ацетилена и нашли, что $\Delta H_r^\circ = -35,6$ ккал/моль при 291° К; из этого значения мы рассчитали $\Delta H_f^\circ(g) = 72,8$ ккал/моль. Указанные авторы произвели также отнесение частот и рассчитали значения теплоемкости и энтропии, которые здесь использованы.

№ 318. Бутин-1 (этилацетилен), C_4H_6 (состояние идеального газа).
Мол. вес 54,088

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	19,46	69,51	69,51	0,00	39,48	48,30	-35,400
300	19,54	69,64	69,52	0,04	39,46	48,35	-35,220
400	23,87	75,86	70,34	2,22	38,57	51,45	-28,111
500	27,63	81,60	72,02	4,80	37,78	54,77	-23,937
600	30,83	86,93	74,07	7,72	37,09	58,23	-21,208
700	33,57	91,89	76,26	10,95	36,52	61,80	-19,294
800	35,95	96,54	78,51	14,42	36,04	65,44	-17,876
900	38,02	100,89	80,76	18,12	35,66	69,14	-16,789
1000	39,84	104,99	82,98	22,02	35,38	72,88	-15,928

Приняты результаты измерений Астона, Манстранджело и Мёссена [39] и значения, отобранные Россини, Вагманом, Эвансом, Левином и Джаффе [1249]. $T_m = 147,43^\circ$ К, $\Delta H_m^\circ = 1,441$ ккал/моль и $T_b = 281,22^\circ$ К, при этом $\Delta H_v = 5,861$ ккал/моль.

№ 319. Бутин-2 (диметилацетилен), C_4H_6 (состояние идеального газа).
Мол. вес 54,088

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	18,63	67,71	67,71	0,00	34,97	44,32	-32,487
300	18,70	67,83	67,72	0,04	34,95	44,38	-32,328
400	22,62	73,75	68,50	2,11	33,95	47,68	-26,049
500	26,36	79,21	70,10	4,56	33,03	51,22	-22,386
600	29,68	84,31	72,05	7,36	32,22	54,93	-20,007
700	32,59	89,11	74,15	10,48	31,54	58,77	-18,349
800	35,14	93,63	76,30	13,87	30,97	62,70	-17,127
900	37,36	97,90	78,47	17,50	30,52	66,69	-16,195
1000	39,29	101,94	80,61	21,33	30,18	70,74	-15,459

Приняты результаты измерений Иоста, Осборна и Гарнера [1638] и значения, отобранные Россини, Вагманом, Эвансом, Левином и Джаффе [1249]. $T_m = 240,89^\circ K$, $\Delta H_m^\circ = 2,207$ ккал/моль и $T_b = 300,14^\circ K$, при этом $\Delta Hv = 6,340$ ккал/моль.

№ 320. Пентин-1, C_5H_8 (состояние идеального газа). Мол. вес 68,114

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	25,50	78,82	78,82	0,00	34,50	50,25	-36,833
300	25,65	78,98	78,83	0,05	34,48	50,35	-36,676
400	31,10	87,12	79,90	2,89	33,31	55,82	-30,498
500	36,10	94,61	82,10	6,26	32,29	61,57	-26,911
600	40,40	101,58	84,77	10,09	31,43	67,51	-24,588
700	44,00	108,09	87,64	14,31	30,73	73,58	-22,972
800	47,10	114,17	90,58	18,87	30,16	79,74	-21,782
900	49,80	119,87	93,52	23,72	29,73	85,96	-20,874
1000	52,20	125,25	96,43	28,82	29,43	92,24	-20,157

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Ариеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 167,45^\circ K$ и $T_b = 313,33^\circ K$.

№ 321. Пентин-2, C_5H_8 (состояние идеального газа). Мол. вес 68,114

Использованы значения, отобранные Россини, Питцером, Ариеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 163,85^\circ K$ и $T_b = 329,22^\circ K$.

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	23,59	79,30	79,30	0,00	30,80	46,41	-34,016
300	23,69	79,45	79,31	0,05	30,77	46,50	-33,875
400	29,20	87,03	80,30	2,70	29,41	51,96	-28,388
500	34,30	94,11	82,36	5,88	28,20	57,74	-25,237
600	38,70	100,76	84,88	9,53	27,17	63,74	-23,217
700	42,60	107,02	87,60	13,60	26,31	69,91	-21,827
800	45,90	112,93	90,40	18,03	25,62	76,18	-20,811
900	48,90	118,52	93,22	22,77	25,08	82,54	-20,043
1000	51,40	123,80	96,01	27,79	24,70	88,95	-19,440

№ 322. 3-Метилбутин-1, C_5H_8 (состояние идеального газа). Мол. вес 68,114

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	25,02	76,23	76,23	0,00	32,60	49,12	-36,006
300	25,13	76,39	76,24	0,05	32,57	49,22	-35,857
400	31,10	84,46	77,30	2,87	31,38	54,96	-30,029
500	36,20	91,96	79,49	6,24	30,37	60,98	-26,652
600	40,60	98,96	82,16	10,09	29,52	67,18	-24,468
700	44,20	105,49	85,03	14,33	28,84	73,51	-22,951
800	47,40	111,61	87,97	18,92	28,30	79,93	-21,834
900	50,10	117,35	90,92	23,79	27,90	86,41	-20,982
1000	52,40	122,75	93,84	28,92	27,63	92,93	-20,309

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Ариеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 183,4^\circ K$ и $T_b = 299,50^\circ K$.

№ 323. Гексин-1, C_6H_{10} (состояние идеального газа). Мол. вес 82,140

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	30,65	88,13	88,13	0,00	29,55	52,24	-38,288
300	30,77	88,32	88,14	0,06	29,52	52,37	-38,153
400	37,87	98,17	89,43	3,50	28,00	60,23	-32,908
500	44,18	107,31	92,10	7,61	26,71	68,44	-29,915
600	49,59	115,86	95,36	12,31	25,64	76,89	-28,005
700	54,20	123,86	98,86	17,50	24,79	85,51	-26,695
800	58,16	131,36	102,46	23,12	24,12	94,22	-25,738
900	61,60	138,41	106,07	29,11	23,63	103,02	-25,015
1000	64,56	145,06	109,64	35,43	23,32	111,86	-24,447

Приняты значения, отобранные Россини, Питчером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 141,3^\circ \text{K}$ и $T_b = 344,48^\circ \text{K}$.

№324. Гептин-1, C_7H_{12} (состояние идеального газа). Мол. вес 96,166

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	36,11	97,44	97,44	0,00	24,62	54,24	-39,759
300	36,27	97,67	97,45	0,07	24,58	54,42	-39,645
400	44,81	109,29	98,97	4,13	22,75	64,66	-35,327
500	52,42	120,13	102,13	9,00	21,20	75,32	-32,922
600	58,93	130,28	105,99	14,58	19,93	86,26	-31,419
700	64,47	139,79	110,14	20,76	18,93	97,41	-30,411
800	69,23	148,72	114,41	27,45	18,17	108,66	-29,683
900	73,34	157,11	118,70	34,58	17,62	120,01	-29,142
1000	76,90	165,03	122,94	42,10	17,30	131,42	-28,720

Приняты значения, отобранные Россини, Питчером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 192,3^\circ \text{K}$ и $T_b = 372,89^\circ \text{K}$.

№ 325. Октин-1, C_8H_{14} (состояние идеального газа). Мол. вес 110,192

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	41,58	106,75	106,75	0,00	19,70	56,26	-41,236
300	41,76	107,01	106,76	0,08	19,65	56,48	-41,144
400	51,75	120,42	108,52	4,77	17,50	69,10	-37,751
500	60,67	132,95	112,16	10,40	15,70	82,21	-35,932
600	68,28	144,70	116,62	16,86	14,23	95,65	-34,837
700	74,75	155,72	121,43	24,01	13,09	109,32	-34,129
800	80,30	166,08	126,37	31,77	12,23	123,11	-33,631
900	85,09	175,82	131,33	40,05	11,63	137,02	-33,271
1000	89,20	185,00	136,24	48,77	11,29	150,98	-32,996

Приняты значения, отобранные Россини, Питчером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 193,9^\circ \text{K}$ и $T_b = 399,35^\circ \text{K}$.

№ 326. Нонин-1, C_9H_{16} (состояние идеального газа). Мол. вес 124,218

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	47,04	116,06	116,06	0,00	14,77	58,26	-42,706
300	47,26	116,36	116,07	0,09	14,72	58,53	-42,636
400	58,69	131,55	118,06	5,40	12,25	73,52	-40,170
500	68,91	145,77	122,19	11,79	10,19	89,09	-38,939
600	77,62	159,12	127,25	19,13	8,52	105,02	-38,252
700	85,02	171,66	132,71	27,27	7,24	121,22	-37,845
800	91,36	183,43	138,32	36,10	6,28	137,56	-37,577
900	96,83	194,52	143,95	45,51	5,62	154,02	-37,399
1000	101,60	204,97	149,54	55,44	5,26	170,54	-37,270

Приняты значения, отобранные Россини, Питчером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 223,2^\circ \text{K}$ и $T_b = 423,9^\circ \text{K}$.

№ 327. Децин-1, $\text{C}_{10}\text{H}_{18}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 138,244

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	52,51	125,36	125,36	0,00	9,85	60,28	-44,186
300	52,75	125,69	125,37	0,10	9,79	60,59	-44,137
400	65,64	142,66	127,59	6,03	7,01	77,97	-42,596
500	77,16	158,58	132,22	13,19	4,69	95,98	-41,951
600	86,96	173,54	137,87	21,41	2,83	114,41	-41,672
700	95,30	187,58	143,98	30,53	1,40	133,14	-41,565
800	102,42	200,78	150,26	40,42	0,34	152,02	-41,527
900	108,58	213,21	156,57	50,98	-0,37	171,03	-41,530
1000	113,90	224,93	162,83	62,11	-0,75	190,11	-41,547

Приняты значения, отобранные Россини, Питчером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 229,2^\circ \text{K}$ и $T_b = 447^\circ \text{K}$.

№ 328. Ундецин-1, $\text{C}_{11}\text{H}_{20}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 152,270

Приняты значения, отобранные Россини, Питчером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 248,2^\circ \text{K}$ и $T_b = 468^\circ \text{K}$.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	57,98	134,67	134,67	0,00	4,92	62,29	-45,656
300	58,24	135,03	134,68	0,11	4,85	62,64	-45,629
400	72,58	153,79	137,14	6,67	1,75	82,39	-45,015
500	85,41	171,40	142,25	14,58	-0,82	102,86	-44,958
600	96,30	187,96	148,50	23,68	-2,88	123,79	-45,086
700	105,58	203,52	155,26	33,79	-4,45	145,04	-45,281
800	113,49	218,14	162,21	44,75	-5,61	166,46	-45,472
900	120,33	231,92	169,20	56,45	-6,38	188,03	-45,657
1000	126,20	244,91	176,13	68,78	-6,78	209,67	-45,821

№ 329. Додецин-1, C₁₂H₂₂ (состояние идеального газа). Мол. вес 166,296

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	63,44	143,98	143,98	0,00	-0,01	64,29	-47,126
300	63,74	144,38	143,99	0,12	-0,08	64,69	-47,121
400	79,52	164,92	146,68	7,30	-3,50	86,82	-47,434
500	93,65	184,22	152,28	15,98	-6,33	109,74	-47,964
600	105,64	202,38	159,13	25,96	-8,59	133,16	-48,501
700	115,85	219,45	166,54	37,04	-10,30	156,94	-48,997
800	124,56	235,50	174,17	49,07	-11,56	180,90	-49,417
900	132,07	250,62	181,83	61,91	-12,38	205,02	-49,784
1000	138,60	264,88	189,43	75,45	-12,80	229,23	-50,095

Приняты значения, отобранные Россици, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. Tm = 254,2° K и Tb = 488° K.

№ 330. Тридецин-1, C₁₃H₂₄ (состояние идеального газа). Мол. вес 180,322

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	68,91	153,29	153,29	0,00	-4,93	66,31	-48,603
300	69,27	153,72	153,30	0,13	-5,01	66,74	-48,621
400	86,46	176,05	156,22	7,93	-8,75	91,26	-49,858
500	101,90	197,04	162,31	17,37	-11,83	116,63	-50,974
600	114,99	216,81	169,76	28,23	-14,29	142,54	-51,918
700	126,13	235,39	177,82	40,30	-16,14	168,85	-52,715
800	135,62	252,87	186,12	53,40	-17,49	195,35	-53,365
900	143,82	269,32	194,46	67,38	-18,38	222,03	-53,913
1000	150,90	284,85	202,73	82,13	-18,81	248,79	-54,369

Приняты значения, отобранные Россици, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. Tm = 268,2° K и Tb = 507° K.

№ 331. Тетрадецин-1, C₁₄H₂₆ (состояние идеального газа). Мол. вес 194,348

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	74,37	162,60	162,60	0,00	-9,86	68,31	-50,073
300	74,73	163,07	162,61	0,14	-9,95	68,79	-50,112
400	93,40	187,17	165,77	8,57	-14,00	95,68	-52,277
500	110,14	209,85	172,34	18,76	-17,35	123,50	-53,981
600	124,33	231,22	180,39	30,50	-20,00	151,92	-55,333
700	136,40	251,32	189,10	43,56	-21,99	180,75	-56,431
800	146,68	270,22	198,07	57,72	-23,44	209,80	-57,311
900	155,56	288,02	207,09	72,84	-24,38	239,03	-58,041
1000	163,20	304,82	216,03	88,79	-24,84	268,35	-58,644

Приняты значения отобранные Россици, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. Tm = 273,2° K и Tb = 525° K.

№ 332. Пентадецин-1, C₁₅H₂₈ (состояние идеального газа). Мол. вес 208,374

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	79,84	171,91	171,91	0,00	-14,78	70,33	-51,550
300	80,22	172,41	171,92	0,15	-14,87	70,85	-51,612
400	100,34	198,29	175,31	9,20	-19,25	100,12	-54,701
500	118,39	222,67	182,37	20,16	-22,85	130,39	-56,992
600	133,67	245,64	191,02	32,78	-25,69	161,30	-58,751
700	146,68	267,25	200,38	46,81	-27,83	192,66	-60,150
800	157,75	287,58	210,02	62,05	-29,38	224,25	-61,259
900	167,31	306,72	219,71	78,31	-30,38	256,03	-62,170
1000	175,60	324,79	229,33	95,47	-30,85	287,91	-62,920

Приняты значения, отобранные Россици, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. Tm = 283,2° K и Tb = 542° K.

№ 333. Гексадецин-1, C₁₆H₃₀ (состояние идеального газа). Мол. вес 222,400

Приняты значения, отобранные Россици, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. Tm = 288,2° K и Tb = 558° K.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	85,31	181,22	181,22	0,00	-19,71	72,34	-53,020
300	85,71	181,75	181,23	0,16	-19,81	72,90	-53,104
400	107,28	209,42	184,85	9,83	-24,50	104,55	-57,120
500	126,64	235,49	192,40	21,55	-28,36	137,27	-59,998
600	143,01	260,07	201,65	35,05	-31,40	170,68	-62,166
700	156,96	283,18	211,66	50,07	-33,68	204,57	-63,865
800	168,82	304,94	221,98	66,37	-35,33	238,69	-65,204
900	179,06	325,43	232,34	83,78	-36,38	273,03	-66,297
1000	187,90	344,76	242,63	102,14	-36,87	307,47	-67,193

№ 334. Гептадецин-1, C₁₇H₃₂ (состояние идеального газа). Мол. вес 236,426

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	90,77	190,53	190,53	0,00	-24,64	74,34	-54,490
300	91,21	191,10	190,54	0,17	-24,75	74,95	-54,596
400	114,22	220,54	194,40	10,46	-29,76	108,98	-59,538
500	134,88	248,31	202,43	22,95	-33,87	144,15	-63,004
600	152,35	274,49	212,28	37,33	-37,11	180,05	-65,580
700	167,23	299,12	222,94	53,33	-39,54	216,47	-67,581
800	179,88	322,29	233,93	70,70	-41,28	253,13	-69,150
900	190,80	344,12	244,97	89,24	-42,39	290,03	-70,425
1000	200,20	364,73	255,93	108,81	-42,90	327,02	-71,467

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 295,2° K и T_b = 573° K.

№ 335. Октадецин-1, C₁₈H₃₄ (состояние идеального газа). Мол. вес 250,452

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	96,24	199,84	199,84	0,00	-29,56	76,36	-55,968
300	96,70	200,44	199,85	0,18	-29,67	77,00	-56,095
400	121,16	231,67	203,94	11,10	-35,00	113,41	-61,963
500	143,13	261,13	212,46	24,34	-39,37	151,04	-66,015
600	161,70	288,91	222,91	39,60	-42,81	189,44	-68,998
700	177,51	315,05	234,22	56,58	-45,38	228,38	-71,299
800	190,94	339,65	245,88	75,02	-47,22	267,59	-73,098
900	202,55	362,83	257,60	94,71	-48,39	307,03	-74,554
1000	212,60	384,70	269,23	115,48	-48,91	346,59	-75,743

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 300,2° K и T_b = 588° K.

№ 336. Нонадецин-1, C₁₉H₃₆ (состояние идеального газа). Мол. вес 264,478

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	101,70	209,15	209,15	0,00	-34,49	78,36	-57,438
300	102,20	209,79	209,16	0,19	-34,61	79,05	-57,587
400	128,10	242,80	213,48	11,73	-40,26	117,84	-64,381
500	151,37	273,95	222,49	25,73	-44,88	157,92	-69,021
600	171,04	303,33	233,54	41,88	-48,52	198,81	-72,413
700	187,78	330,98	245,50	59,84	-51,23	240,28	-75,015
800	202,01	357,01	257,83	79,35	-53,17	282,03	-77,043
900	214,29	381,53	270,23	100,18	-54,39	324,03	-78,681
1000	224,90	404,67	282,53	122,15	-54,94	366,14	-80,016

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 306,2° K и T_b = 602° K.

№ 337. Эйкозин-1, C₂₀H₃₈ (состояние идеального газа). Мол. вес 278,504

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	107,17	218,46	218,46	0,00	-39,41	80,38	-58,915
300	107,69	219,13	218,47	0,20	-39,54	81,11	-59,086
400	135,04	253,92	223,03	12,36	-45,50	122,28	-66,805
500	159,62	286,77	232,52	27,13	-50,38	164,80	-72,032
600	180,38	317,75	244,17	44,15	-54,22	208,19	-75,831
700	198,06	346,92	256,79	63,10	-57,07	252,19	-78,734
800	213,08	374,37	269,78	83,67	-59,11	296,48	-80,991
900	226,04	400,23	282,86	105,64	-60,39	341,04	-82,811
1000	237,20	424,64	295,83	128,82	-60,95	385,71	-84,292

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 309,2° K и T_b = 615° K.

Циклоалканы. Таблицы для состояния идеального газа

№ 338. Циклопропан, C₃H₆ (состояние идеального газа). Мол. вес 42,078

Руервейн и Пауелл [1266] изучали термодинамические свойства циклопропана при низких температурах. По их сообщениям, T_{tr} = 145,59° K, ΔH_m° = 1,301 ккал/моль и T_b = 240,35° K, при этом

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
289	13,37	56,75	56,75	0,00	12,74	24,95	-18,291
300	13,44	56,84	56,76	0,03	12,71	25,03	-18,232
400	18,31	61,38	57,34	1,62	11,48	29,33	-16,023
500	22,65	65,95	58,61	3,68	10,49	33,91	-14,821
600	26,15	70,40	60,21	6,12	9,70	38,67	-14,084
700	29,02	74,65	61,97	8,88	9,09	43,55	-13,596
800	31,45	78,69	63,81	11,91	8,61	48,50	-13,249
900	33,57	82,52	65,68	15,16	8,27	53,51	-12,994
1000	35,39	86,15	67,54	18,61	8,05	58,56	-12,797

$\Delta H_v = 4,793$ ккал/моль. По данным этих исследователей калориметрически определенная энтропия идеального газа при 298,15° K составляет 56,75 кал/(моль · °K), что находится в хорошем соответствии со спектроскопическим значением 56,84 кал/(моль · °K), установленным Кистяковским и Райсом [757]; последние исследователи приводят также теплоемкости пара, использованные здесь. Песколько позже Бейкер и Лорд [63] повторили спектроскопические измерения и на основании видоизмененных отнесений определили $S_{298}^o(g) = 56,79$ кал/(моль · °K). Значения термодинамических функций для циклопропана указаны также в работе Кубе и Пеннингтона [782] и Линнета [876]. По данным измерения энтальпии сгорания Ноултон и Россини [771] определили $\Delta H_{298}^o(g) = 12,74$ ккал/моль.

№ 339. Циклобутан, C₄H₈ (состояние идеального газа). Мол. вес 56,104

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	17,26	63,43	63,43	0,00	6,37	26,30	-19,280
300	17,37	63,54	63,44	0,04	6,33	26,43	-19,250
400	23,89	69,45	64,20	2,10	4,64	33,39	-18,243
500	29,86	75,44	65,85	4,80	3,27	40,74	-17,808
600	34,76	81,33	67,94	8,04	2,19	48,34	-17,607
700	38,89	87,00	70,26	11,73	1,38	56,10	-17,516
800	42,42	92,43	72,69	15,80	0,78	63,96	-17,471
900	45,41	97,61	75,18	20,19	0,39	71,88	-17,455
1000	47,96	102,53	77,67	24,86	0,17	79,85	-17,450

Приняты значения термодинамических функций, рассчитанные Ратвельсом, Фриганом, Гунином и Питцером [1214], которые на

основании ²⁷ изучения спектра циклобутана произвели отнесение основных частот. По результатам изучения низкотемпературных свойств Ратвельс и Гуинн [1215] установили, что $Tt = 145,74^\circ$ K и $\Delta Ht^\circ = 1,413$ ккал/моль. $Ttp = 182,48^\circ$ K, $\Delta Hm^\circ = 0,260$ ккал/моль и $Tb = 285,72^\circ$ K, при этом $\Delta Hv = 5,781$ ккал/моль; энтропия идеального газа при Tb равна 62,72 кал/(моль · °K). Из калориметрических данных мы рассчитали $S_{298}^o(g) = 63,44$ кал/(моль · °K), тогда как расчеты спектров приводят к значению 63,43 кал/(моль · °K). По данным измерения энтальпии сгорания Купс и Каарсемейкер [267, 707] определили $\Delta H_{298}^o(g) = 6,37$ ккал/моль.

№ 340. Циклопентан, C₅H₁₀ (состояние идеального газа). Мол. вес 70,130

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	19,84	70,00	70,00	0,00	-18,46	9,23	-6,763
300	19,99	70,13	70,01	0,04	-18,51	9,40	-6,844
400	28,38	77,04	70,89	2,47	-20,79	19,06	-10,412
500	36,07	84,23	72,84	5,70	-22,64	29,24	-12,780
600	42,57	91,39	75,34	9,64	-24,09	39,75	-14,480
700	48,01	98,37	78,13	14,18	-25,18	50,49	-15,763
800	52,60	105,09	81,08	19,21	-25,97	61,35	-16,759
900	56,50	111,52	84,11	24,67	-26,50	72,30	-17,557
1000	59,84	117,65	87,16	30,49	-26,80	83,31	-18,206

Приняты результаты измерений Доуслина и Хаффмана [341], а также статистические расчеты Мак-Каллоха, Пеннингтона, Смита, Хоссенлоппа и Уаддингтона [959]. $Tt = 122,39^\circ$ K, $\Delta Ht^\circ = 1,167$ ккал/моль, $Tt = 138,07^\circ$ K, $\Delta Ht^\circ = 0,082$ ккал/моль, $Ttp = 179,28^\circ$ K, $\Delta Hm^\circ = 0,145$ ккал/моль и $Tb = 322,41^\circ$ K, при этом $\Delta Hv = 6,524$ ккал/моль. По данным Кубе и Линна [780], $Tc = 511,7^\circ$ K и $Pc = 44,55$ атм. Значение энтальпии образования отобрано Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248].

№ 341. Циклогексан, C₆H₁₂ (состояние идеального газа). Мол. вес 84,156

Приняты результаты измерений Руеврвейна и Хаффмана [1264], а также значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $Tt = 186,10^\circ$ K, $\Delta Ht^\circ = 1,611$ ккал/моль, $Tm = 279,69^\circ$ K, $\Delta Hm^\circ = 0,640$ ккал/моль и $Tb = 353,88^\circ$ K, при этом $\Delta Hv = 7,190$ ккал/моль. По данным Кубе и Линна [780], $Tc = 553^\circ$ K, $Pc = 40,0$ атм и $dc = 0,273$ г/см³.

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	25,40	71,28	71,28	0,00	-29,43	7,59	-5,560
300	25,58	71,44	71,29	0,05	-29,48	7,81	-5,691
400	35,82	80,22	72,41	3,13	-32,06	20,65	-11,284
500	45,47	89,27	74,88	7,20	-34,08	34,07	-14,893
600	53,83	98,32	78,03	12,18	-35,57	47,85	-17,428
700	60,87	107,16	81,57	17,92	-36,58	61,84	-19,308
800	66,76	115,69	85,30	24,31	-37,19	75,94	-20,745
900	71,68	123,84	89,13	31,24	-37,45	90,11	-21,880
1000	75,80	131,61	93,00	38,62	-37,40	104,29	-22,791

№ 342. Циклопентан, C₅H₁₀ (состояние идеального газа). Мол. вес 98,182

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	29,42	81,82	81,82	0,00	-28,52	15,06	-11,042
300	29,65	82,01	81,83	0,06	-28,58	15,33	-11,168
400	41,82	92,23	83,14	3,64	-31,59	30,45	-16,635
500	52,94	102,79	86,01	8,39	-33,96	46,24	-20,212
600	62,42	113,30	89,68	14,17	-35,72	62,45	-22,746
700	70,36	123,53	93,79	20,82	-36,95	78,92	-24,640
800	77,03	133,38	98,13	28,20	-37,73	95,52	-26,094
900	82,65	142,78	102,57	36,19	-38,13	112,21	-27,248
1000	87,40	151,74	107,05	44,70	-38,18	128,93	-28,177

На основании измерений низкотемпературных свойств Финке, Скотт, Гросс, Мессерли и Уаддингтон [424] установили три модификационных перехода в твердом состоянии. При $Tt = 134,8^\circ \text{K}$ $\Delta Ht^\circ = 1,187 \text{ ккал/моль}$; при $Tt = 198,2^\circ \text{K}$ $\Delta Ht^\circ = 0,069 \text{ ккал/моль}$ и при $Tt = 212,4^\circ \text{K}$ $\Delta Ht^\circ = 0,107 \text{ ккал/моль}$; $Ttp = 265,10^\circ \text{K}$, $\Delta Hm^\circ = 0,576 \text{ ккал/моль}$ и $Tb = 391,94^\circ \text{K}$, при этом $\Delta Hv = 9,21 \text{ ккал/моль}$. Согласно третьему закону из этих измерений следует, что S_{298}° (идеальный газ) = $81,82 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$. По данным измерения энтальпии сгорания Каарсемейкер и Купс [707] определили $\Delta Hf_{298}^\circ(g) = -28,52 \text{ ккал/моль}$.

№ 343. Циклооктан, C₈H₁₆ (состояние идеального газа). Мол. вес 112,208

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	33,45	87,66	87,66	0,00	-30,06	21,49	-15,755
300	33,71	87,87	87,67	0,07	-30,13	21,81	-15,888
400	47,82	99,54	89,16	4,16	-33,57	39,67	-21,675
500	60,41	111,60	92,44	9,58	-36,28	58,31	-25,486
600	71,00	123,58	96,64	16,17	-38,32	77,42	-28,199
700	79,85	135,20	101,32	23,72	-39,77	96,84	-30,234
800	87,30	146,36	106,26	32,09	-40,73	116,41	-31,801
900	93,62	157,02	111,31	41,14	-41,26	136,10	-33,048
1000	99,01	167,17	116,39	50,78	-41,40	155,83	-34,055

Финке, Скотт, Гросс, Мессерли и Уаддингтон [424] провели всесторонние низкотемпературные исследования и сообщили следующие результаты: $Tt = 166,5^\circ \text{K}$, $\Delta Ht^\circ = 1,507 \text{ ккал/моль}$, $Tt = 183,8^\circ \text{K}$, $\Delta Ht^\circ = 0,114 \text{ ккал/моль}$, $Ttp = 287,97^\circ \text{K}$, $\Delta Hm^\circ = -0,576 \text{ ккал/моль}$, $Tb = 423,84^\circ \text{K}$, $\Delta Hv_{298} = 10,360 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}(l) = 62,62 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$ и $S_{298}(g) = 87,66 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$. Эти исследователи на основании энтальпии сгорания, определенной Каарсемейкером и Купсом [707], рассчитали $\Delta Hf_{298}^\circ(l) = -40,42 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta Hf_{298}^\circ(g) = -30,06 \text{ ккал/моль}$. Беллис и Словинский [101] произвели отнесение большинства фундаментальных частот. Для расчета теплоемкости идеального газа отнесения остальных частот приняты согласно оценкам.

Циклоалкены. Таблицы для состояния идеального газа

№ 344. Циклобутен, C₄H₆ (состояние идеального газа). Мол. вес 54,088

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	16,03	62,98	62,98	0,00	31,00	41,76	-30,611
300	16,13	63,08	62,99	0,03	30,97	41,83	-30,470
400	21,59	68,49	63,69	1,93	29,80	45,63	-24,931
500	26,37	73,84	65,18	4,33	28,83	49,71	-21,726
600	30,30	79,00	67,06	7,17	28,06	53,95	-19,651
700	33,55	83,92	69,12	10,37	27,46	58,32	-18,208
800	36,26	88,58	71,26	13,86	26,99	62,76	-17,144
900	38,57	92,99	73,44	17,61	26,66	67,25	-16,330
1000	40,53	97,16	75,60	21,56	26,44	71,78	-15,687

В отличие от других членов ряда циклоалканов и циклоалкенов здесь принято оценочное значение $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 31 \pm 5$ ккал/моль. Термодинамические функции рассчитаны Данти [306] статистическим методом из отнесенных основных частот согласно Лорду и Ри [886].

№ 345. Циклопентен, C_5H_8 (состояние идеального газа). Мол. вес 68,114

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	17,95	69,23	69,23	0,00	7,87	26,48	-19,410
300	18,08	69,35	69,24	0,04	7,83	26,59	-19,372
400	25,08	75,52	70,03	2,20	5,98	33,14	-18,106
500	31,62	81,83	71,76	5,04	4,44	40,11	-17,532
600	37,19	88,11	73,96	8,49	3,20	47,36	-17,251
700	41,86	94,20	76,42	12,45	2,23	54,81	-17,111
800	45,78	100,05	79,01	16,84	1,50	62,36	-17,036
900	49,11	105,64	81,66	21,59	0,96	70,01	-17,000
1000	51,94	110,97	84,33	26,64	0,62	77,71	-16,983

Приняты результаты измерений Хаффмана, Итона и Оливера [645], а также значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $Tt = 87,07^{\circ}K$, $\Delta H_t^{\circ} = 0,115$ ккал/моль, $Tm = 138,07^{\circ}K$, $\Delta H_m^{\circ} = 0,804$ ккал/моль и $Tb = 317,39^{\circ}K$. Согласно расчетам Амброза, Кокса и Тоунсенда [13], $Tc = 506,0^{\circ}K$.

№ 346. Циклогексен, C_6H_{10} (состояние идеального газа). Мол. вес 82,140

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	25,10	74,27	74,27	0,00	-1,28	25,54	-18,720
300	25,28	74,43	74,28	0,05	-1,32	25,70	-18,723
400	34,64	83,01	75,38	3,06	-3,27	35,02	-19,134
500	42,78	91,65	77,77	6,94	-4,79	44,78	-19,571
600	49,45	100,05	80,79	11,56	-5,93	54,80	-19,959
700	54,92	108,10	84,12	16,79	-6,76	65,00	-20,292
800	59,49	115,74	87,60	22,52	-7,32	75,28	-20,564
900	63,34	122,97	91,13	28,66	-7,65	85,63	-20,793
1000	66,62	129,82	94,66	35,16	-7,77	96,01	-20,982

По данным измерения энтальпии сгорания Лаббауф и Россини [821] определили $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -9,28$ ккал/моль. Согласно расчетам

Эпштейна, Питцера и Россини [380], $\Delta H_{v,298} = 8,00$ ккал/моль, откуда следует, что $\Delta H_{f,298}^{\circ}(g) = -1,28$ ккал/моль. Хаффман, Итон и Оливер [645] экспериментально установили, что $Tt = 138,8^{\circ}K$, $\Delta H_t^{\circ} = 1,016$ ккал/моль, $Tm = 169,63^{\circ}K$ и $\Delta H_m^{\circ} = 0,787$ ккал/моль. Согласно работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248], $Tb = 356,12^{\circ}K$, причем по данным Метюса [940], $\Delta H_v = 7,285$ ккал/моль. Расчет термодинамических функций из спектроскопических данных выполнили для состояния идеального газа Бекетт, Фриман и Питцер [92]. Согласно измерениям Амброза, Кокса и Тоунсенда [13], $Tc = 560,4^{\circ}K$.

Алкилциклопентаны. Таблицы для состояния идеального газа

№ 347. Метилциклопентан, C_6H_{12} (состояние идеального газа). Мол. вес 84,156

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	26,24	81,24	81,24	0,00	-25,50	8,55	-6,264
300	26,46	81,41	81,25	0,05	-25,55	8,75	-6,377
400	36,11	90,36	82,40	3,19	-28,06	20,59	-11,248
500	44,94	99,39	84,90	7,25	-30,10	33,00	-14,421
600	52,43	108,27	88,06	12,13	-31,69	45,76	-16,669
700	58,68	116,83	91,56	17,69	-32,88	58,78	-18,351
800	64,00	125,02	95,23	23,84	-33,73	71,92	-19,648
900	68,53	132,83	98,98	30,47	-34,29	85,17	-20,682
1000	72,44	140,26	102,74	37,52	-34,57	98,47	-21,521

Приняты результаты измерений Доуслина и Хаффмана [341], а также значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $Tm = 130,70^{\circ}K$, $\Delta H_m^{\circ} = 1,656$ ккал/моль и $Tb = 344,96^{\circ}K$, при этом $\Delta H_v = 6,916$ ккал/моль. По данным Кобе и Линна [780], $Tc = 532,8^{\circ}K$, $Pc = 37,4$ атм и $dc = 0,264$ г/см³.

№ 348. Этилциклопентан, C_7H_{14} (состояние идеального газа). Мол. вес 98,182

На основании изучения низкотемпературных свойств Гросс, Оливер и Хаффман [544] установили существование двух кристаллических форм. Изучены при температуре от $12^{\circ}K$ до тройной точки обе кристаллические формы: высокоплавкая форма (обозначаемая кристалл I; $Ttp = 134,71^{\circ}K$, $\Delta H_m^{\circ} = 1,642$ ккал/моль) и низкоплавкая форма (обозначаемая кристалл II; $Ttp = 134,02^{\circ}K$, $\Delta H_m^{\circ} = 1,889$ ккал/моль). При желании можно получить любую из этих

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH ^o	ΔG ^o	
298	31,49	90,42	90,42	0,00	-30,37	10,65	-7,807
300	31,75	90,62	90,43	0,06	-30,43	10,90	-7,941
400	43,89	101,49	91,83	3,87	-33,21	25,12	-13,726
500	53,03	112,27	94,84	8,72	-35,48	39,98	-17,473
600	61,70	122,73	98,62	14,47	-37,28	55,24	-20,119
700	69,02	132,80	102,79	21,01	-38,61	70,77	-22,096
800	75,22	142,43	107,15	28,23	-39,55	86,45	-23,617
900	80,54	151,61	111,58	36,03	-40,14	102,25	-24,829
1000	85,16	160,34	116,03	44,32	-40,41	118,10	-25,810

форм, поскольку кристаллизация той или иной формы определяется скоростью охлаждения вблизи точки плавления; при быстром охлаждении образуется кристалл I, а при медленном охлаждении — кристалл II. Энтальпия кристалла II при точке плавления на 247 ккал/моль больше, чем энтальпия кристалла I. Остальные величины отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_b = 376,62° K, при этом ΔH_v = 7,715 ккал/моль.

№ 349. 1,1-Диметилциклопентан, C₇H₁₄ (состояние идеального газа).
Мол. вес 98,182

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH ^o	ΔG ^o	
298	31,86	85,87	85,87	0,00	-33,05	9,33	-6,837
300	32,16	86,07	85,88	0,06	-33,11	9,59	-6,983
400	43,55	96,91	87,28	3,86	-35,90	24,26	-13,256
500	54,01	107,78	90,29	8,75	-38,13	39,57	-17,296
600	62,78	118,42	94,10	14,60	-39,82	55,27	-20,132
700	70,08	128,67	98,31	21,25	-41,05	71,23	-22,238
800	76,18	138,43	102,72	28,57	-41,89	87,32	-23,853
900	81,38	147,71	107,21	36,46	-42,39	103,51	-25,135
1000	85,83	156,52	111,70	44,83	-42,58	119,75	-26,169

В дополнение к значениям, отобранным Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], использованы результаты измерений Гросса, Оливера и Хаффмана [544]. T_t = 146,79° K, ΔH_t^o = 1,551 ккал/моль, T_m = 203,36° K, ΔH_m^o = 0,258 ккал/моль и T_b = 361,00° K, при этом ΔH_v = 7,239 ккал/моль.

№ 350. 1,2-Диметилциклопентан, цис, C₇H₁₄ (состояние идеального газа).
Мол. вес 98,182

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH ^o	ΔG ^o	
298	32,06	87,51	87,51	0,00	-30,96	10,93	-8,010
300	32,34	87,71	87,52	0,06	-31,02	11,18	-8,148
400	43,67	98,59	88,92	3,87	-33,80	25,69	-14,038
500	54,03	109,48	91,95	8,77	-36,02	40,83	-17,847
600	62,72	120,12	95,76	14,62	-37,71	56,36	-20,529
700	69,92	130,35	99,98	21,26	-38,95	72,15	-22,526
800	75,98	140,09	104,39	28,57	-39,81	88,07	-24,060
900	81,14	149,34	108,87	36,43	-40,33	104,10	-25,278
1000	85,57	158,13	113,36	44,77	-40,55	120,18	-26,263

В дополнение к значениям, отобранным Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], использованы результаты измерений Гросса, Оливера и Хаффмана [544]. T_t = 141,49° K, ΔH_t^o = 1,594 ккал/моль, T_m = 219,25° K, ΔH_m^o = 0,396 ккал/моль и T_b = 372,68° K, при этом ΔH_v = 7,576 ккал/моль.

№ 351. 1,2-Диметилциклопентан, транс, C₇H₁₄ (состояние идеального газа).
Мол. вес 98,182

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH ^o	ΔG ^o	
298	32,14	87,67	87,67	0,00	-32,67	9,17	-6,722
300	32,44	87,87	87,68	0,06	-32,73	9,43	-6,867
400	43,71	98,77	89,09	3,88	-35,50	23,92	-13,068
500	54,03	109,67	92,11	8,78	-37,72	39,04	-17,063
600	62,66	120,30	95,93	14,63	-39,42	54,55	-19,869
700	69,88	130,52	100,15	21,26	-40,66	70,32	-21,955
800	75,84	140,25	104,56	28,56	-41,53	86,23	-23,555
900	80,98	149,49	109,04	36,40	-42,06	102,24	-24,826
1000	85,43	158,25	113,53	44,73	-42,30	118,30	-25,854

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 155,57° K, ΔH_m^o = 1,540 ккал/моль и T_b = 365,02° K, при этом ΔH_v = 7,375 ккал/моль.

№ 352. 1,3-Диметилциклопентан, *цис*, C₇H₁₄ (состояние идеального газа).
Мол. вес 98,182

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	32,14	87,67	87,67	0,00	-32,47	9,37	-6,868
300	32,44	87,87	87,68	0,06	-32,53	9,63	-7,013
400	43,71	98,77	89,09	3,88	-35,30	24,12	-13,177
500	54,03	109,67	92,11	8,78	-37,52	39,24	-17,151
600	62,66	120,30	95,93	14,63	-39,22	54,75	-19,942
700	69,88	130,52	100,15	21,26	-40,46	70,52	-22,018
800	75,84	140,25	104,56	28,56	-41,33	86,43	-23,610
900	80,98	149,49	109,04	36,40	-41,86	102,44	-24,875
1000	85,43	158,25	113,53	44,73	-42,10	118,50	-25,897

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 139,45^\circ\text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,768$ ккал/моль и $T_b = 363,92^\circ\text{K}$, при этом $\Delta H_v = 7,265$ ккал/моль, согласно измерениям Мак-Каллоха, Пеннингтона, Смита, Хосселлопа и Уаддингтона [1959].

№ 353. 1,3-Диметилциклопентан, *транс*, C₇H₁₄ (состояние идеального газа).
Мол. вес 98,182

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	32,14	87,67	87,67	0,00	-31,93	9,91	-7,264
300	32,44	87,87	87,68	0,06	-31,99	10,17	-7,406
400	43,71	98,77	89,09	3,88	-34,76	24,66	-13,472
500	54,03	109,67	92,11	8,78	-36,98	39,78	-17,387
600	62,66	120,30	95,93	14,63	-38,68	55,29	-20,139
700	69,88	130,52	100,15	21,26	-39,92	71,06	-22,186
800	75,84	140,25	104,56	28,56	-40,79	86,97	-23,758
900	80,98	149,49	109,04	36,40	-41,32	102,98	-25,006
1000	85,43	158,25	113,53	44,73	-41,56	119,04	-26,015

Значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], дополнены результатами измерений Гросса, Оливера и Хаффмана [544]. $T_m = 139,18^\circ\text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,738$ ккал/моль и $T_b = 364,87^\circ\text{K}$, при этом $\Delta H_v = 7,361$ ккал/моль.

№ 354. Пропилциклопентан, C₈H₁₆ (состояние идеального газа).
Мол. вес 112,208

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	36,96	99,73	99,73	0,00	-35,39	12,57	-9,214
300	37,24	99,96	99,74	0,07	-35,46	12,86	-9,368
400	50,83	112,61	101,37	4,50	-38,56	29,46	-16,095
500	61,28	125,09	104,87	10,11	-41,08	46,76	-20,440
600	71,04	137,15	109,25	16,74	-43,08	64,52	-23,500
700	79,30	148,74	114,07	24,27	-44,55	82,59	-25,783
800	86,28	159,79	119,10	32,56	-45,59	100,81	-27,538
900	92,29	170,31	124,21	41,49	-46,24	119,16	-28,934
1000	97,50	180,31	129,33	50,99	-46,53	137,57	-30,064

Низкотемпературные термические свойства измерены Мессерли, Тоддом и Финке [993]; $T_{tp} = 155,79^\circ\text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,398$ ккал/моль, $S_{298}^\circ(l) = 74,29$ кал/(моль·°K), $S_{298}^\circ(g) = 99,06$ кал/(моль·°K) и $T_b = 404,10^\circ\text{K}$. Для сохранения соответствия приняты корреляционные термодинамические функции и энтальпии образования, указанные в работе Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. Корреляционная энтропия удовлетворительно согласуется с калориметрическими данными.

№ 355. Бутилциклопентан, C₉H₁₈ (состояние идеального газа).
Мол. вес 126,234

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	42,42	109,04	109,04	0,00	-40,22	14,67	-10,754
300	42,74	109,31	109,05	0,08	-40,29	15,01	-10,933
400	57,77	123,74	110,91	5,14	-43,71	33,99	-18,569
500	69,52	137,91	114,90	11,51	-46,49	53,74	-23,490
600	80,38	151,57	119,88	19,02	-48,68	73,99	-26,951
700	89,57	164,67	125,35	27,53	-50,30	94,59	-29,530
800	97,35	177,15	131,05	36,88	-51,44	115,35	-31,514
900	104,03	188,96	136,84	46,92	-52,19	136,26	-33,086
1000	114,80	200,44	142,62	57,82	-52,29	157,23	-34,360

Низкотемпературные термические свойства измерены Мессерли, Тоддом и Финке [993]; $T_{tp} = 165,18^\circ\text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,704$ ккал/моль, $S_{298}^\circ(l) = 82,18$ кал/(моль·°K), $S_{298}^\circ(g) = 108,46$ кал/(моль·°K) и $T_b =$

= 429,75° К. Величина энтропии, определенная калориметрическим методом, удовлетворительно согласуется с коррелированными функциями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]; ради соответствия приняты эти коррелированные функции и энтальпия образования.

№ 356. 1-Циклопентилпентан, $C_{10}H_{20}$ (состояние идеального газа).
Мол.вес 140,260

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	47,89	118,35	118,35	0,00	-45,15	16,68	-12,224
300	48,23	118,65	118,36	0,09	-45,23	17,06	-12,424
400	64,71	134,87	120,45	5,77	-48,97	38,41	-20,987
500	77,77	150,73	124,93	12,90	-52,00	60,62	-26,496
600	89,73	165,99	130,51	21,29	-54,39	83,37	-30,366
700	99,85	180,61	136,63	30,78	-56,15	106,49	-33,245
800	108,42	194,51	143,01	41,21	-57,39	129,79	-35,456
900	115,78	207,72	149,47	52,43	-58,15	153,25	-37,213
1000	122,20	220,25	155,93	64,33	-58,47	176,78	-38,633

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 190^\circ$ К и $T_b = 453,6^\circ$ К.

№ 357. 1-Циклопентилгексан, $C_{11}H_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол.вес 154,286

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	53,35	127,66	127,66	0,00	-50,07	18,69	-13,702
300	53,73	128,00	127,67	0,10	-50,16	19,11	-13,924
400	71,65	145,99	130,00	6,40	-54,21	42,85	-23,412
500	86,01	163,55	134,96	14,30	-57,50	67,51	-29,507
600	99,07	180,41	141,14	23,57	-60,09	92,75	-33,784
700	110,12	196,54	147,91	34,04	-61,99	118,40	-36,964
800	119,48	211,87	154,96	45,53	-63,33	144,25	-39,404
900	127,52	226,41	162,10	57,89	-64,15	170,26	-41,342
1000	134,50	240,22	169,23	71,00	-64,49	196,34	-42,909

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 200^\circ$ К и $T_b = 476,1^\circ$ К.

№ 358. 1-Циклопентилгептан, $C_{12}H_{24}$ (состояние идеального газа).
Мол.вес 168,312

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	58,82	136,96	136,96	0,00	-55,00	20,70	-15,174
300	59,22	137,33	136,97	0,11	-55,09	21,16	-15,418
400	78,60	157,11	139,53	7,04	-59,46	47,28	-25,832
500	94,26	176,36	144,99	15,69	-63,01	74,39	-32,515
600	108,41	194,83	151,76	25,84	-65,80	102,13	-37,200
700	120,40	212,46	159,19	37,30	-67,84	130,31	-40,681
800	130,54	229,22	166,90	49,86	-69,28	158,69	-43,351
900	139,27	245,11	174,72	63,36	-70,15	187,26	-45,471
1000	146,80	260,18	182,52	77,67	-70,51	215,91	-47,184

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 220^\circ$ К и $T_b = 497,1^\circ$ К.

№ 359. 1-Циклопентилоктан, $C_{13}H_{26}$ (состояние идеального газа).
Мол.вес 182,338

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	64,29	146,27	146,27	0,00	-59,92	22,72	-16,651
300	64,71	146,67	146,28	0,12	-60,02	23,22	-16,917
400	85,54	168,23	149,07	7,67	-64,71	51,72	-28,257
500	102,51	189,18	155,02	17,09	-68,51	81,28	-35,526
600	117,75	209,25	162,39	28,12	-71,50	111,52	-40,618
700	130,68	228,40	170,47	40,56	-73,68	142,22	-44,400
800	141,61	246,58	178,85	54,18	-75,21	173,15	-47,299
900	151,02	263,81	187,35	68,83	-76,15	204,27	-49,601
1000	159,20	280,16	195,82	84,35	-76,52	235,47	-51,460

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 229^\circ$ К и $T_b = 516,6^\circ$ К.

№ 360. 1-Циклопентилнонан, $C_{14}H_{28}$ (состояние идеального газа).
Мол.вес 196,364

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 244^\circ$ К и $T_b = 535,2^\circ$ К.

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	69,75	155,58	155,58	0,00	-64,85	24,72	-18,121
300	70,21	156,02	155,59	0,13	-64,96	25,27	-18,409
400	92,48	179,36	158,62	8,30	-69,96	56,15	-30,675
500	110,75	202,00	165,05	18,48	-74,03	88,16	-38,532
600	127,09	223,67	173,02	30,39	-77,20	120,89	-44,033
700	140,95	244,33	181,75	43,81	-79,53	154,12	-48,116
800	152,68	263,94	190,81	58,51	-81,16	187,59	-51,245
900	162,76	282,51	199,97	74,29	-82,15	221,27	-53,728
1000	171,50	300,13	209,12	91,01	-82,55	255,03	-55,734

№ 361. 1-Циклопентилдекан, C₁₅H₃₀ (состояние идеального газа).
Мол.вес 210,390

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	75,22	164,89	164,89	0,00	-69,78	26,73	-19,591
300	75,70	165,36	164,90	0,14	-69,90	27,32	-19,901
400	99,42	190,49	168,16	8,94	-75,22	60,57	-33,094
500	119,00	214,81	175,08	19,87	-79,54	95,04	-41,538
600	136,44	238,09	183,65	32,67	-82,91	130,27	-47,447
700	151,23	260,27	193,03	47,07	-85,38	166,02	-51,831
800	163,74	281,30	202,76	62,83	-87,11	202,03	-55,190
900	174,51	301,22	212,60	79,76	-88,16	238,26	-57,855
1000	183,80	320,10	222,42	97,69	-88,57	274,58	-60,007

Низкотемпературные термические свойства измерены Мессерли, Тоддом и Финке [993]: $T_{tp} = 251,02^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 7,917 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}^\circ(l) = 128,71 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$, $S_{298}^\circ(g) = 164,45 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$ и $T_b = 552,53^\circ \text{K}$. Величина энтропии, определенная калориметрически, хорошо согласуется со значениями Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. Приняты коррелированные термодинамические функции, отобранные Россини и др., поскольку они обеспечивают сопоставимость результатов. По данным измерения энтальпии сгорания Лоффлер и Россини [880] определили $\Delta H_{298}^\circ(l) = -87,52 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{298}^\circ(g) = -69,78 \text{ ккал/моль}$.

№ 362. 1-Циклопентилундекан, C₁₆H₃₂ (состояние идеального газа).
Мол.вес 224,416

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	80,68	174,20	174,20	0,00	-74,70	28,74	-21,069
300	81,20	174,71	174,21	0,15	-74,82	29,38	-21,400
400	106,36	201,61	177,71	9,57	-80,46	65,01	-35,518
500	127,24	227,63	185,11	21,27	-85,04	101,92	-44,549
600	145,78	252,51	194,28	34,94	-88,61	139,65	-50,865
700	161,50	276,20	204,31	50,33	-91,23	177,93	-55,550
800	174,80	298,65	214,71	67,16	-93,05	216,49	-59,138
900	186,25	319,92	225,23	85,22	-94,16	255,27	-61,985
1000	196,20	340,07	235,72	104,36	-94,59	294,15	-64,283

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 263^\circ \text{K}$ и $T_b = 569,0^\circ \text{K}$.

№ 363. 1-Циклопентилдодекан, C₁₇H₃₄ (состояние идеального газа).
Мол.вес 238,442

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	86,15	183,51	183,51	0,00	-80,28	30,10	-22,062
300	86,69	184,05	183,52	0,16	-80,41	30,78	-22,419
400	113,30	212,74	187,25	10,20	-86,37	68,79	-37,582
500	135,49	240,45	195,14	22,66	-91,20	108,15	-47,271
600	155,12	266,94	204,91	37,22	-94,97	148,37	-54,043
700	171,78	292,13	215,59	53,58	-97,73	189,18	-59,063
800	185,87	316,01	226,66	71,48	-99,65	230,28	-62,906
900	198,00	338,62	237,86	90,69	-100,81	271,62	-65,954
1000	208,50	360,04	249,02	111,03	-101,26	313,05	-68,415

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 268^\circ \text{K}$ и $T_b = 584,4^\circ \text{K}$.

№ 364. 1-Циклопентилтридекан, C₁₈H₃₆ (состояние идеального газа).
Мол.вес 252,468

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 278^\circ \text{K}$ и $T_b = 599,1^\circ \text{K}$.

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	91,62	192,89	192,89	0,00	-84,55	32,74	-24,001
300	92,18	193,46	192,90	0,18	-84,69	33,46	-24,376
400	120,24	223,93	196,86	10,83	-90,96	73,85	-40,346
500	143,74	253,34	205,24	24,06	-96,05	115,66	-50,551
600	164,46	281,43	215,61	39,49	-100,02	158,37	-57,682
700	182,06	308,13	226,94	56,84	-102,92	201,70	-62,969
800	196,94	333,44	238,69	75,81	-104,94	245,32	-67,016
900	209,75	357,39	250,56	96,16	-106,45	289,21	-70,226
1000	220,80	380,08	262,39	117,70	-106,63	333,20	-72,817

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	102,55	211,44	211,44	0,00	-94,41	36,78	-26,956
300	103,17	212,08	211,45	0,20	-94,56	37,58	-27,375
400	134,12	246,12	215,88	12,10	-101,47	82,73	-45,199
500	160,23	278,91	225,23	26,84	-107,07	129,45	-56,579
600	183,15	310,20	236,80	44,04	-111,43	177,16	-64,527
700	202,61	339,93	249,43	63,36	-114,62	225,55	-70,415
800	219,06	368,09	262,52	84,46	-116,84	274,27	-74,922
900	233,24	394,73	275,74	107,09	-118,17	323,27	-78,496
1000	245,50	419,95	288,91	131,04	-118,67	372,38	-81,380

№ 365. 1-Циклопентилтетрадекан, C₁₉H₃₈ (состояние идеального газа).
Мол.вес 266,494

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	97,08	202,13	202,13	0,00	-89,48	34,77	-25,486
300	97,68	202,74	202,14	0,19	-89,62	35,53	-25,883
400	127,18	234,99	206,33	11,47	-96,22	78,30	-42,780
500	151,98	266,09	215,20	25,45	-101,56	122,57	-53,572
600	173,80	295,78	226,17	41,77	-105,73	167,78	-61,112
700	192,33	324,00	238,15	60,10	-108,77	213,65	-66,700
800	208,00	350,73	250,57	80,13	-110,89	259,82	-70,977
900	221,49	376,02	263,11	101,62	-112,16	306,27	-74,369
1000	233,20	399,98	275,61	124,37	-112,65	352,83	-77,106

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 282° K и T_b = 614° K.

№ 366. 1-Циклопентилпентадекан, C₂₀H₄₀ (состояние идеального газа).
Мол.вес 280,520

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 290° K и T_b = 627° K.

№ 367. 1-Циклопентилгексадекан, C₂₁H₄₂ (состояние идеального газа).
Мол.вес 294,546

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	108,01	220,75	220,75	0,00	-99,33	38,79	-28,434
300	108,67	221,43	220,76	0,21	-99,49	39,64	-28,874
400	141,06	257,24	225,42	12,73	-106,72	87,17	-47,623
500	168,47	291,73	235,26	28,24	-112,57	136,34	-59,589
600	192,49	324,62	274,43	46,32	-117,13	186,54	-67,945
700	212,88	355,86	260,71	66,61	-120,46	237,46	-74,134
800	230,13	385,44	274,47	88,78	-122,78	288,72	-78,870
900	244,98	413,43	288,37	112,55	-124,16	340,27	-82,625
1000	257,80	439,92	302,21	137,71	-124,69	391,95	-85,655

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 294° K и T_b = 639° K.

Алкилциклопентены. Таблицы для состояния идеального газа

№ 368. 1-Метилциклопентен, C₆H₁₀ (состояние идеального газа).
Мол.вес 82,140

По данным измерения энтальпии сгорания Лаббауф и Россини [821] определили ΔHf°₂₉₈(l) = -9,05 ккал/моль. Приняв ΔHv°₂₉₈ = 7,75 ккал/моль, мы рассчитали ΔHf°₂₉₈(g) = -1,30 ккал/моль.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	24,10	78,00	78,00	0,00	-1,30	24,41	-17,890
300	24,30	78,15	78,01	0,05	-1,34	24,56	-17,894
400	32,50	86,28	79,06	2,89	-3,45	33,53	-18,320
500	40,20	94,38	81,31	6,54	-5,21	42,99	-18,789
600	46,80	102,29	84,15	10,89	-6,63	52,76	-19,217
700	53,30	110,03	87,30	15,92	-7,65	62,75	-19,591
800	57,00	117,39	90,61	21,43	-8,42	72,85	-19,901
900	60,90	124,33	93,97	27,33	-9,00	83,05	-20,167
1000	64,30	130,93	97,34	33,59	-9,36	93,31	-20,392

По данным Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_m = 146^\circ \text{K}$ и $T_b = 348,9^\circ \text{K}$. Хростовский и Пиментел [622] произвели отнесение основных частот колебаний и рассчитали термодинамические функции для состояния идеального газа.

№ 369. 3-Метилциклопентен, C₆H₁₀ (состояние идеального газа).
Мол.вес 82,140

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	23,90	79,00	79,00	0,00	2,07	27,48	-20,141
300	24,10	79,15	79,01	0,05	2,03	27,63	-20,130
400	32,60	87,27	80,05	2,89	-0,09	36,50	-19,944
500	40,50	95,41	82,31	6,56	-1,82	45,86	-20,044
600	47,10	103,40	85,16	10,94	-3,20	55,52	-20,224
700	52,60	111,08	88,32	15,94	-4,26	65,41	-20,420
800	57,20	118,41	91,63	21,43	-5,05	75,41	-20,599
900	61,10	125,38	95,00	27,35	-5,61	85,50	-20,762
1000	64,50	132,00	98,37	33,64	-5,95	95,66	-20,904

По данным измерения энтальпии сгорания Лаббауф и Россини [821] определили $\Delta H_{298}^\circ(l) = -5,68$ ккал/моль. Приняв $\Delta H_{298}^\circ = 7,75$ ккал/моль, мы рассчитали $\Delta H_{298}^\circ(g) = 2,07$ ккал/моль. По данным Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $T_b = 338,1^\circ \text{K}$. Хростовский и Россини [622] произвели отнесение основных частот колебаний и рассчитали термодинамические функции для состояния идеального газа.

№ 370. 4-Метилциклопентен, C₆H₁₀ (состояние идеального газа).
Мол.вес 82,140

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	23,90	78,60	78,60	0,00	3,53	29,06	-21,299
300	24,10	78,75	78,61	0,05	3,49	29,21	-21,281
400	32,60	86,87	79,65	2,89	1,37	38,12	-20,829
500	40,40	95,00	81,91	6,55	-0,37	47,52	-20,770
600	47,00	102,97	84,76	10,93	-1,76	57,23	-20,844
700	52,50	110,64	87,91	15,91	-2,82	67,15	-20,965
800	57,10	117,96	91,22	21,40	-3,63	77,20	-21,088
900	61,10	124,92	94,58	27,31	-4,19	87,31	-21,208
1000	64,40	131,53	97,94	33,59	-4,53	97,54	-21,316

По данным измерения энтальпии сгорания Лаббауф и Россини [821] определили $\Delta H_{298}^\circ(l) = -4,22$ ккал/моль. Приняв $\Delta H_{298}^\circ = 7,75$ ккал/моль, мы рассчитали $\Delta H_{298}^\circ(g) = 3,53$ ккал/моль. По данным Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248], $T_b = 348,3^\circ \text{K}$. Хростовский и Россини [622] произвели отнесение основных частот и рассчитали термодинамические функции для состояния идеального газа.

Алкилциклогексаны. Таблицы для состояния идеального газа

№ 371. Метилциклогексан, C₇H₁₄ (состояние идеального газа).
Мол.вес 98,182

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	32,27	82,06	82,06	0,00	-36,99	6,52	-4,781
300	32,51	82,27	82,07	0,06	-37,05	6,79	-4,946
400	44,35	93,26	83,49	3,92	-39,78	21,84	-11,932
500	55,21	104,36	86,55	8,91	-41,91	37,50	-16,391
600	64,46	115,26	90,43	14,90	-43,46	53,53	-19,498
700	72,23	125,80	94,74	21,75	-44,49	69,79	-21,789
800	78,74	135,88	99,25	29,31	-45,10	86,15	-23,534
900	84,20	145,48	103,86	37,46	-45,33	102,58	-24,909
1000	88,79	154,59	108,48	46,12	-45,23	119,03	-26,012

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 146,56^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,613 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 374,08^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 7,580 \text{ ккал/моль}$. По данным Кобе и Линна [780], $T_c = 572,1^\circ \text{K}$, $P_c = 34,32 \text{ атм}$ и $d_c = 0,285 \text{ г/см}^3$.

№ 372. Этилциклогексан, C_8H_{16} (состояние идеального газа).
Мол.вес 112,208

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	37,96	91,44	91,44	0,00	-41,05	9,38	-6,874
300	38,23	91,68	91,45	0,08	-41,12	9,69	-7,056
400	51,60	104,54	93,11	4,58	-44,14	27,10	-14,808
500	63,80	117,40	96,68	10,36	-46,49	45,20	-19,756
600	74,10	129,96	101,19	17,27	-48,21	63,70	-23,201
700	82,80	142,06	106,17	25,13	-49,35	82,46	-25,743
800	90,10	153,60	111,38	33,78	-50,02	101,32	-27,679
900	96,20	164,58	116,69	43,11	-50,29	120,27	-29,204
1000	101,30	174,99	122,00	52,99	-50,19	139,23	-30,428

Результаты низкотемпературных измерений, выполненных Хаффманом, Тоддом и Оливером [657], использовались в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 161,83^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,992 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 404,93^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,29 \text{ ккал/моль}$.

№ 373. 1,1-Диметилциклогексан, C_8H_{16} (состояние идеального газа).
Мол.вес 112,208

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	36,90	87,24	87,24	0,00	-43,26	8,42	-6,172
300	37,20	87,47	87,25	0,07	-43,33	8,74	-6,364
400	50,70	100,05	88,87	4,48	-46,45	26,59	-14,527
500	63,30	112,75	92,37	10,19	-48,87	45,14	-19,731
600	74,10	125,27	96,82	17,08	-50,61	64,11	-23,351
700	83,20	137,39	101,75	24,95	-51,74	83,34	-26,018
800	90,70	149,01	106,94	33,66	-52,36	102,67	-28,046
900	97,00	160,06	112,23	43,05	-52,55	122,07	-29,641
1000	102,20	170,56	117,55	53,02	-52,36	141,43	-30,919

Значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], использовались в сочетании с результатами измерений Хаффмана, Тодда и Оливера [657]. $T_t = 153,14^\circ \text{K}$, $\Delta H_t^\circ = 1,430 \text{ ккал/моль}$, $T_m = 239,66^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 0,483 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 392,69^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 7,880 \text{ ккал/моль}$.

№ 374. 1,2-Диметилциклогексан, *цис*, C_8H_{16} (состояние идеального газа).
Мол.вес 112,208

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	37,40	89,51	89,51	0,00	-41,15	9,85	-7,222
300	37,70	89,75	89,52	0,07	-41,22	10,17	-7,405
400	51,10	102,45	91,16	4,52	-44,30	27,78	-15,180
500	63,50	115,22	94,69	10,27	-46,69	46,09	-20,146
600	74,00	127,75	99,17	17,16	-48,42	64,81	-23,607
700	82,80	139,84	104,12	25,01	-49,57	83,79	-26,160
800	90,10	151,39	109,31	33,66	-50,24	102,88	-28,104
900	96,30	162,37	114,60	42,99	-50,50	122,05	-29,636
1000	101,40	172,79	119,90	52,89	-50,39	141,23	-30,865

Значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], использовались в сочетании с результатами измерений Хаффмана, Тодда и Оливера [657]. $T_t = 172,49^\circ \text{K}$, $\Delta H_t^\circ = 1,973 \text{ ккал/моль}$, $T_m = 223,27^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 0,393 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 402,88^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,18 \text{ ккал/моль}$.

№ 375. 1,2-Диметилциклогексан, *транс*, C_8H_{16} (состояние идеального газа).
Мол.вес 112,208

T, °K	(кал/моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	38,00	88,65	88,65	0,00	-43,02	8,24	-6,040
300	38,30	88,89	88,66	0,08	-43,09	8,55	-6,231
400	51,90	101,80	90,32	4,60	-46,09	26,25	-14,340
500	64,20	114,74	93,92	10,42	-48,41	44,61	-19,499
600	74,60	127,39	98,45	17,37	-50,08	63,37	-23,083
700	83,30	139,56	103,46	25,28	-51,17	82,39	-25,721
800	90,50	151,17	108,70	33,98	-51,80	101,50	-27,726
900	96,60	162,19	114,04	43,34	-52,02	120,69	-29,305
1000	101,70	172,64	119,38	53,26	-51,88	139,88	-30,570

Результаты измерений Хаффмана, Тодда и Оливера [657] использовались в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_{tp} = 184,99^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,508 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 396,57^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 7,98 \text{ ккал/моль}$.

№ 376. 1,3-Диметилциклогексан, *цис*, C_8H_{16} (состояние идеального газа).
Мол.вес 112,208

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	37,60	88,54	88,54	0,00	-44,16	7,13	-5,228
300	37,90	88,78	88,55	0,07	-44,23	7,45	-5,425
400	51,20	101,52	90,19	4,54	-47,29	25,16	-13,746
500	63,60	114,32	93,74	10,29	-49,67	43,56	-19,039
600	74,20	126,87	98,22	17,20	-51,39	62,37	-22,717
700	83,10	139,00	103,19	25,07	-52,51	81,44	-25,424
800	90,50	150,59	108,39	33,76	-53,15	100,60	-27,483
900	96,70	161,62	113,70	43,13	-53,37	119,85	-29,102
1000	102,00	172,09	119,02	53,07	-53,21	139,11	-30,400

Приняты результаты измерений Хаффмана, Тодда и Оливера [657], а также значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_{tp} = 197,58^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,586 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 393,24^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 7,96 \text{ ккал/моль}$.

№ 377. 1,3-Диметилциклогексан, *транс*, C_8H_{16} (состояние идеального газа).
Мол.вес 112,208

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	37,60	89,92	89,92	0,00	-42,20	8,68	-6,363
300	37,90	90,16	89,93	0,07	-42,27	8,99	-6,551
400	51,10	102,89	91,57	4,53	-45,34	26,57	-14,515
500	63,40	115,65	95,11	10,27	-47,73	44,83	-19,596
600	73,80	128,15	99,58	17,15	-49,48	63,51	-23,133
700	82,50	140,20	104,53	24,97	-50,65	82,45	-25,742
800	89,80	151,71	109,72	33,60	-51,36	101,51	-27,724
900	95,90	162,65	114,99	42,89	-51,65	120,65	-29,295
1000	101,10	173,03	120,28	52,75	-51,58	139,80	-30,552

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], а также результаты измерений

Хаффмана, Тодда и Оливера [657]. $T_{tp} = 183,05^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,358 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 397,60^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,09 \text{ ккал/моль}$

№ 378. 1,4-Диметилциклогексан, *цис*, C_8H_{16} (состояние идеального газа).
Мол.вес 112,208

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	37,60	88,54	88,54	0,00	-42,22	9,07	-6,650
300	37,90	88,78	88,55	0,07	-42,29	9,39	-6,838
400	51,10	101,51	90,19	4,53	-45,36	27,10	-14,806
500	63,40	114,27	93,73	10,27	-47,75	45,50	-19,889
600	73,80	126,77	98,20	17,15	-49,50	64,32	-23,427
700	82,50	138,82	103,15	24,97	-50,67	83,40	-26,037
800	89,80	150,33	108,34	33,60	-51,38	102,59	-28,025
900	95,90	161,27	113,61	42,89	-51,67	121,87	-29,592
1000	101,10	171,65	118,90	52,75	-51,60	141,16	-30,849

Результаты измерений Хаффмана, Тодда и Оливера [657] использовались в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_{tp} = 185,72^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,244 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 397,47^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,07 \text{ ккал/моль}$.

№ 379. 1,4-Диметилциклогексан, *транс*, C_8H_{16} (состояние идеального газа).
Мол.вес 112,208

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	37,70	87,19	87,19	0,00	-44,12	7,58	-5,552
300	38,00	87,43	87,20	0,08	-44,19	7,89	-5,749
400	51,60	100,25	88,85	4,57	-47,22	25,74	-14,061
500	64,00	113,13	92,42	10,36	-49,56	44,26	-19,345
600	74,60	125,77	96,93	17,31	-51,24	63,18	-23,013
700	83,30	137,94	101,93	25,21	-52,34	82,36	-25,712
800	90,60	149,55	107,16	33,92	-52,96	101,63	-27,763
900	96,80	160,59	112,49	43,30	-53,17	120,98	-29,377
1000	101,90	171,06	117,83	53,24	-53,00	140,34	-30,669

Результаты измерений Хаффмана, Тодда и Оливера [657] использовались в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_{tp} = 236,21^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,947 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 392,50^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 7,90 \text{ ккал/моль}$.

№ 380. Пропилциклогексан, C_9H_{18} (состояние идеального газа).
Мол. вес 126,234

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	44,03	100,27	100,27	0,00	-46,20	11,31	-8,288
300	44,32	100,55	100,28	0,09	-46,27	11,66	-8,493
400	59,10	115,35	102,19	5,27	-49,56	31,49	-17,207
500	72,60	130,03	106,30	11,87	-52,11	52,06	-22,756
600	83,80	144,29	111,45	19,71	-53,98	73,07	-26,616
700	93,30	157,94	117,12	28,58	-55,23	94,37	-29,461
800	101,20	170,93	123,04	38,31	-55,99	115,78	-31,628
900	107,80	183,24	129,05	48,77	-56,31	137,28	-33,335
1000	113,40	194,89	135,06	59,84	-56,25	158,81	-34,706

Низкотемпературные термические свойства измерены Финке, Мессерли и Годдом [423]: $T_{tr} = 178,25^\circ \text{K}$, $\Delta H_{tr}^\circ = 2,479 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}^\circ(l) = 74,54 \text{ кал/(моль·°K)}$ и $S_{298}^\circ(g) = 100,35 \text{ кал/(моль·°K)}$. Термодинамические функции и энтальпия образования отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], которые приводят также значение $T_b = 429,87^\circ \text{K}$. Величина энтропии, определенная калориметрическим методом, находится в прекрасном соответствии со значениями, отобранными Россини и др.

№ 381. 1,3,5-Триметилциклогексан, *цис*, *цис*, C_9H_{18}
(состояние идеального газа). Мол. вес 126,234

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	42,93	93,30	93,30	0,00	-51,48	8,10	-5,941
300	43,29	93,57	93,31	0,08	-51,55	8,47	-6,170
400	58,05	108,07	95,18	5,16	-54,95	29,02	-15,854
500	71,99	122,55	99,21	11,68	-57,58	50,33	-21,998
600	83,94	136,77	104,29	19,49	-59,47	72,09	-26,258
700	93,97	150,48	109,92	28,40	-60,69	94,13	-29,388
800	102,26	163,58	115,81	38,22	-61,36	116,28	-31,766
900	109,20	176,04	121,82	48,80	-61,56	138,52	-33,635
1000	115,21	187,86	127,84	60,03	-61,34	160,75	-35,131

Иган и Басс [371] изучали равновесное гидрирование мезитилена (1,3,5-триметилбензола) при температурах от 473 до 573° K и предложили термодинамические функции для *цис*- и *транс*-изомеров 1,3,5-триметилциклогексана.

№ 382. 1,3,5-Триметилциклогексан, *цис*, *транс*, C_9H_{18}
(состояние идеального газа). Мол. вес 126,234

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	42,93	95,60	95,60	0,00	-49,37	9,53	-6,985
300	43,29	95,87	95,61	0,08	-49,44	9,89	-7,204
400	57,85	110,34	97,48	5,15	-52,85	30,21	-16,505
500	71,59	124,76	101,50	11,64	-55,51	51,30	-22,420
600	83,14	138,87	106,56	19,39	-57,46	72,84	-26,531
700	92,77	152,43	112,15	28,20	-58,78	94,68	-29,559
800	100,86	165,36	118,00	37,89	-59,58	116,65	-31,864
900	107,60	177,63	123,95	48,32	-59,93	138,71	-33,682
1000	113,41	189,28	129,90	59,38	-59,88	160,80	-35,140

Иган и Басс [371] изучали равновесное гидрирование мезитилена (1,3,5-триметилбензола) при температурах от 473 до 573° K и предложили термодинамические функции для *цис*- и *транс*-изомеров 1,3,5-триметилциклогексана.

№ 383. Бутилциклогексан, $C_{10}H_{20}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 140,260

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	49,50	109,58	109,58	0,00	-50,95	13,49	-9,890
300	49,81	109,89	109,59	0,10	-51,03	13,89	-10,116
400	66,00	126,47	111,74	5,90	-54,64	36,10	-19,724
500	80,80	142,84	116,33	13,26	-57,45	59,12	-25,842
600	93,10	158,68	122,07	21,97	-59,52	82,63	-30,097
700	103,60	173,85	128,40	31,82	-60,92	106,45	-33,235
800	112,30	188,26	134,99	42,63	-61,77	130,41	-35,624
900	119,60	201,92	141,67	54,23	-62,14	154,47	-37,509
1000	125,70	214,85	148,35	66,51	-62,10	178,56	-39,022

Низкотемпературные термические свойства измерены Финке, Мессерли и Годдом [423]: $T_{tr} = 198,42^\circ \text{K}$, $\Delta H_{tr}^\circ = 3,384 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}^\circ(l) = 82,45 \text{ кал/(моль·°K)}$ и $S_{298}^\circ(g) = 109,89 \text{ кал/(моль·°K)}$. Термодинамические функции и энтальпии образования отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], кото-

рые приводят также значение $T_b = 454,10^\circ \text{K}$. Величина энтропии, определенная калориметрическим методом, находится в хорошем соответствии со значениями, отобранными Россини и др.

№ 384. Амициклогексан, $\text{C}_{11}\text{H}_{22}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 154,286

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,96	118,89	118,89	0,00	-55,88	15,50	-11,360
300	55,31	119,24	118,90	0,11	-55,97	15,93	-11,608
400	73,00	137,61	121,28	6,54	-59,89	40,53	-22,142
500	89,10	155,68	126,36	14,66	-62,95	66,00	-28,847
600	102,50	173,44	132,71	24,26	-65,21	92,00	-33,510
700	113,90	189,82	139,69	35,10	-66,75	118,35	-36,948
800	123,30	205,66	146,95	46,97	-67,70	144,84	-39,566
900	131,30	220,65	154,32	59,71	-68,44	171,45	-41,632
1000	138,40	234,85	161,67	73,19	-68,11	198,09	-43,291

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 215,7^\circ \text{K}$ и $T_b = 476,82^\circ \text{K}$.

№ 385. 1-Циклогексилгексан, $\text{C}_{12}\text{H}_{24}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 168,312

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	60,43	128,20	128,20	0,00	-60,80	17,51	-12,837
300	60,80	128,58	128,21	0,12	-60,89	17,99	-13,107
400	79,90	148,73	130,82	7,17	-65,14	44,97	-24,567
500	97,40	168,49	136,39	16,06	-68,45	72,89	-31,859
600	111,80	187,55	143,34	26,53	-70,91	101,39	-36,929
700	124,40	205,74	150,97	38,35	-72,60	130,26	-40,667
800	134,40	223,00	158,90	51,28	-73,65	159,30	-43,515
900	143,00	239,34	166,94	65,16	-74,14	188,46	-45,763
1000	150,40	254,80	174,96	79,84	-74,14	217,67	-47,568

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 230,2^\circ \text{K}$ и $T_b = 497,85^\circ \text{K}$.

№ 386. 1-Циклогексилгептан, $\text{C}_{13}\text{H}_{26}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 182,338

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	65,89	137,51	137,51	0,00	-65,73	19,52	-14,307
300	66,30	137,92	137,52	0,13	-65,83	20,04	-14,599
400	86,90	159,86	140,37	7,80	-70,39	49,39	-26,985
500	105,60	181,32	146,42	17,45	-73,96	79,77	-34,864
600	121,20	201,99	153,98	28,81	-76,61	110,76	-40,342
700	134,40	221,69	162,25	41,61	-78,44	142,16	-44,381
800	145,40	240,37	170,86	55,62	-79,59	173,73	-47,459
900	154,80	258,06	179,58	70,64	-80,14	205,45	-49,888
1000	162,70	274,79	188,27	86,53	-80,15	237,21	-51,840

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 242,7^\circ \text{K}$ и $T_b = 518,05^\circ \text{K}$.

№ 387. 1-Циклогексилпектан, $\text{C}_{14}\text{H}_{28}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 196,364

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	71,36	146,82	146,82	0,00	-70,65	21,53	-15,784
300	71,79	147,27	146,83	0,14	-70,76	22,10	-16,098
400	93,80	170,98	149,91	8,43	-75,63	53,83	-29,409
500	113,80	194,12	156,45	18,84	-79,46	86,66	-37,875
600	130,50	216,39	164,60	31,08	-82,32	120,15	-43,761
700	144,70	237,60	173,53	44,86	-84,29	154,07	-48,102
800	156,50	257,71	182,80	59,93	-85,54	188,19	-51,409
900	166,60	276,74	192,19	76,10	-86,14	223,47	-54,020
1000	175,00	294,75	201,56	93,19	-86,17	256,79	-56,118

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 253,5^\circ \text{K}$ и $T_b = 536,75^\circ \text{K}$.

№ 388. 1-Циклогексилнонан, $\text{C}_{15}\text{H}_{30}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 210,390

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 263,0^\circ \text{K}$ и $T_b = 554,65^\circ \text{K}$.

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	76,83	156,12	156,12	0,00	-75,58	23,54	-17,257
300	77,28	156,60	156,13	0,15	-75,69	24,15	-17,592
400	100,70	182,09	159,44	9,06	-80,89	58,26	-31,831
500	122,10	206,93	166,47	20,23	-84,98	93,54	-40,884
600	139,80	230,79	175,22	33,35	-88,03	129,53	-47,179
700	155,00	253,52	184,79	48,11	-90,14	165,99	-51,820
800	167,60	275,06	194,74	64,26	-91,49	202,65	-55,358
900	178,30	295,43	204,81	81,57	-92,15	239,48	-58,150
1000	187,40	314,70	214,84	99,86	-92,20	276,36	-60,395

№ 389. 1-Циклогексилдекан, C₁₆H₃₂ (состояние идеального газа).
Мол. вес 224,416

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	82,29	165,43	165,43	0,00	-80,51	25,55	-18,727
300	82,78	165,95	165,44	0,16	-80,63	26,20	-19,084
400	107,70	193,23	168,99	9,70	-86,14	62,69	-34,249
500	130,40	219,77	176,50	21,64	-90,48	100,42	-43,890
600	149,20	245,25	185,85	35,64	-93,72	138,90	-50,591
700	165,30	269,49	196,09	51,39	-95,97	177,88	-55,533
800	178,60	292,45	206,71	68,60	-97,42	217,08	-59,299
900	190,00	314,16	217,45	87,04	-98,14	256,46	-62,273
1000	199,70	334,70	228,16	106,54	-98,21	295,89	-64,664

Низкотемпературные термические свойства измерены Финке, Мессерли и Толдом [423]: $T_{tr} = 271,43^\circ \text{K}$, $\Delta H_{tr} = 9,225 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}^\circ(l) = 129,10 \text{ ккал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$ и $S_{298}^\circ(g) = 165,97 \text{ ккал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$. Термодинамические функции отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], которые приводят также значение $T_b = 570,74^\circ \text{K}$. Величина энтропии, определенная калориметрическим методом, хорошо согласуется со значениями, отобранными Россини и др. По данным измерения энтальпии сгорания Лöffлер и Россини [880] определили $\Delta H_{f,298}^\circ(l) = -100,03 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{f,298}^\circ(g) = -80,51 \text{ ккал/моль}$.

№ 390. 1-Циклогексилудекан, C₁₇H₃₄ (состояние идеального газа).
Мол. вес 238,442

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	87,76	174,74	174,74	0,00	-85,43	27,56	-20,204
300	88,27	175,29	174,75	0,17	-85,56	28,26	-20,584
400	114,60	204,34	178,53	10,33	-91,39	67,12	-36,673
500	138,60	232,57	186,53	23,02	-95,99	107,31	-46,901
600	158,50	259,64	196,48	37,90	-99,43	148,29	-54,011
700	175,50	285,39	207,36	54,63	-101,83	189,80	-59,254
800	189,70	309,77	218,65	72,90	-103,38	231,54	-63,250
900	201,80	332,84	230,07	92,50	-104,15	273,48	-66,406
1000	212,00	354,64	241,45	113,20	-104,24	315,47	-68,944

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 278,95^\circ \text{K}$ и $T_b = 586,35^\circ \text{K}$

№ 391. 1-Циклогексилдодекан, C₁₈H₃₈ (состояние идеального газа).
Мол. вес 252,468

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	93,22	184,05	184,05	0,00	-90,36	29,57	-21,674
300	93,77	184,63	184,06	0,18	-90,49	30,30	-22,076
400	121,60	215,48	188,08	10,97	-96,64	71,55	-39,092
500	146,80	245,40	196,57	24,42	-101,49	114,18	-49,907
600	167,90	274,08	207,11	40,18	-105,13	157,66	-57,424
700	185,80	301,34	218,65	57,89	-107,67	201,69	-62,968
800	200,70	327,15	230,61	77,24	-109,32	245,97	-67,194
900	213,60	351,55	242,71	97,97	-110,15	290,47	-70,531
1000	224,40	374,64	254,76	119,89	-110,25	335,02	-73,215

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 285,65^\circ \text{K}$ и $T_b = 601,1^\circ \text{K}$.

№ 392. 1-Циклогексилтридекан, C₁₉H₃₈ (состояние идеального газа).
Мол. вес 266,494

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 291,65^\circ \text{K}$ и $T_b = 615,1^\circ \text{K}$.

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	98,69	193,36	193,36	0,00	-95,28	31,59	-23,151
300	99,26	193,98	193,37	0,19	-95,42	32,36	-23,575
400	128,50	226,60	197,62	11,60	-101,89	75,99	-41,516
500	155,10	258,22	206,59	25,82	-106,99	121,07	-52,918
600	177,20	288,50	217,74	42,46	-110,83	167,04	-60,843
700	196,10	317,27	229,92	61,15	-113,52	213,61	-66,687
800	211,80	344,51	242,56	81,56	-115,26	260,43	-71,143
900	225,30	370,25	255,33	103,43	-116,15	307,47	-74,661
1000	236,70	394,60	268,05	126,55	-116,27	354,59	-77,491

№ 393. 1-Циклогексилтетрадекан, C₂₀H₄₀ (состояние идеального газа).
Мол. вес 280,520

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	104,16	202,67	202,67	0,00	-100,21	33,59	-24,621
300	104,75	203,32	202,68	0,20	-100,36	34,41	-25,067
400	135,40	237,72	207,16	12,23	-107,15	80,42	-43,935
500	163,40	271,03	216,62	27,21	-112,51	127,95	-55,925
600	186,50	302,91	228,37	44,73	-116,54	176,42	-64,258
700	206,40	333,20	241,20	64,40	-119,37	225,51	-70,404
800	222,90	361,86	254,51	85,89	-121,21	274,88	-75,089
900	237,00	388,95	267,96	108,90	-122,15	324,47	-78,789
1000	249,00	414,56	281,35	133,22	-122,30	374,15	-81,766

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. Tm = 297,15° K и Tb = 628° K.

№ 394. 1-Циклогексилпентадекан, C₂₁H₄₂ (состояние идеального газа).
Мол. вес 294,546

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. Tm = 302,15° K и Tb = 641° K.

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	109,62	211,98	211,98	0,00	-105,14	35,60	-26,092
300	110,25	212,67	211,99	0,21	-105,29	36,46	-26,559
400	142,40	248,86	216,70	12,87	-112,40	84,84	-46,354
500	171,60	283,86	226,66	28,61	-118,01	134,83	-58,930
600	195,90	317,35	239,00	47,01	-122,25	185,79	-67,671
700	216,70	349,15	252,49	67,67	-125,21	237,41	-74,118
800	233,90	379,24	266,47	90,22	-127,15	289,31	-79,032
900	248,80	407,67	280,59	114,37	-128,15	341,46	-82,914
1000	261,40	434,56	294,66	139,90	-128,31	393,69	-86,037

№ 395. 1-Циклогексилгексадекан, C₂₂H₄₄ (состояние идеального газа).
Мол. вес 308,572

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	115,09	221,29	221,29	0,00	-110,06	37,61	-27,569
300	115,74	222,01	221,30	0,22	-110,22	38,52	-28,058
400	149,30	259,97	226,25	13,50	-117,64	89,28	-48,778
500	179,80	296,66	236,68	29,99	-123,52	141,72	-61,942
600	205,20	331,74	249,63	49,27	-127,96	195,18	-71,090
700	226,90	365,05	263,76	70,91	-131,07	249,32	-77,838
800	245,00	396,56	278,41	94,53	-133,11	303,77	-82,983
900	260,60	426,34	293,21	119,83	-134,16	358,48	-87,047
1000	273,70	454,50	307,94	146,56	-134,33	413,27	-90,316

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. Tm = 306,75° K и Tb = 653° K.

Алкилбензолы. Таблицы для состояния идеального газа

№ 396. Бензол, C₆H₆ (состояние идеального газа). Мол. вес 78,108

Приняты результаты измерений Оливера, Итона и Хаффмана [1085] и Питцера и Скотта [1166], а также значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. Tm = 278,68° K, ΔHm° = 2,351 ккал/моль и Tb = 353,25° K, при этом

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	19,52	64,34	64,34	0,00	19,82	30,99	-22,714
300	19,65	64,47	64,35	0,04	19,79	31,06	-22,623
400	26,74	71,11	65,20	2,37	18,56	35,01	-19,126
500	32,80	77,75	67,05	5,36	17,54	39,24	-17,152
600	37,74	84,18	69,38	8,89	16,71	43,66	-15,901
700	41,75	90,31	71,93	12,87	16,04	48,21	-15,051
800	45,06	96,11	74,60	17,22	15,51	52,84	-14,434
900	47,83	101,58	77,29	21,86	15,10	57,53	-13,970
1000	50,16	106,74	79,98	26,77	14,82	62,27	-13,608

$\Delta H_v = 7,353$ ккал/моль. По данным Амброза, Кокса и Тоунсенда [13], $T_c = 562,0^\circ \text{K}$; согласно сообщению Кобе и Линна [780], $P_c = 48,6$ атм и $d_c = 0,300$ г/см³.

№ 397. Толуол, C₇H₈ (состояние идеального газа). Мол. вес 92,134

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	24,77	76,64	76,64	0,00	11,95	29,16	-21,376
300	24,94	76,80	76,65	0,05	11,92	29,27	-21,320
400	33,48	85,17	77,73	2,98	10,34	35,30	-19,287
500	40,98	93,47	80,05	6,71	9,05	41,70	-18,225
600	47,20	101,51	82,96	11,13	8,02	48,32	-17,599
700	52,33	109,18	86,16	16,12	7,24	55,11	-17,205
800	56,61	116,45	89,50	21,57	6,65	61,98	-16,931
900	60,23	123,33	92,88	27,41	6,24	68,93	-16,736
1000	63,32	129,85	96,25	33,60	6,01	75,91	-16,589

Низкотемпературные термические свойства измерены Скоттом, Гатри, Мессерли, Тоддом, Бергом, Хоссенлоппом и Мак-Каллохом [1314]: $T_{tr} = 178,15^\circ \text{K}$, $\Delta H_{tr} = 1,586$ ккал/моль и $T_b = 383,77^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 7,933$ ккал/моль. Скотт и др. определили также теплоемкость пара и опубликовали новые значения для двух самых низких частот колебаний. В предположении свободного вращения метильной группы были рассчитаны термодинамические функции (принятые здесь), которые находятся в хорошем соответствии с экспериментальными значениями. В работе Скотта и др. приводятся ссылки на ранее выполненные исследования толуола.

Энтальпия образования отобрана Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. По данным измерений Амброза, Кокса и Тоунсенда [13], $T_c = 591,7^\circ \text{K}$; Кобе и Линн [780] приводят следующие значения: $P_c = 41,6$ атм и $d_c = 0,29$ г/см³.

№ 398. Этилбензол, C₈H₁₀ (состояние идеального газа). Мол. вес 106,160

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	30,69	86,15	86,15	0,00	7,12	31,21	-22,875
300	30,88	86,35	86,16	0,06	7,08	31,35	-22,841
400	40,76	96,61	87,49	3,65	5,23	39,74	-21,713
500	49,35	106,66	90,32	8,17	3,71	48,55	-21,222
600	56,44	116,30	93,86	13,47	2,48	57,63	-20,992
700	62,28	125,45	97,72	19,42	1,53	66,91	-20,890
800	67,15	134,10	101,73	25,89	0,80	76,29	-20,842
900	71,27	142,25	105,79	32,82	0,27	85,77	-20,827
1000	74,77	149,94	109,82	40,13	-0,05	95,30	-20,826

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 178,18^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 2,190$ ккал/моль и $T_b = 409,34^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,600$ ккал/моль. По данным Кобе и Линна [780], $T_c = 619,5^\circ \text{K}$, $P_c = 38$ атм и $d_c = 0,29$ г/см³.

№ 399. м-Ксилол C₈H₁₀ (состояние идеального газа). Мол. вес 106,160

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	30,49	85,49	85,49	0,00	4,12	28,41	-20,821
300	30,66	85,68	85,50	0,06	4,08	28,55	-20,800
400	40,03	95,81	86,81	3,60	2,18	37,01	-20,222
500	48,43	105,67	89,60	8,04	0,57	45,91	-20,068
600	55,51	115,14	93,08	13,24	-0,75	55,10	-20,069
700	61,43	124,16	96,88	19,10	-1,79	64,50	-20,138
800	66,41	132,69	100,83	25,50	-2,60	74,02	-20,220
900	70,63	140,77	104,82	32,36	-3,19	83,64	-20,310
1000	74,23	148,40	108,80	39,60	-3,58	93,32	-20,394

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 225,28^\circ \text{K}$, $\Delta H_m =$

$= 2,765$ ккал/моль и $T_b = 412,25^\circ\text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,70$ ккал/моль. По данным Кобе и Линна [780], $T_c = 619^\circ\text{K}$, $P_c = 36$ атм и $d_c = 0,27$ г/см³.

№ 400. *o*-Кеиллол, C_8H_{10} (состояние идеального газа). Мол. вес 106,160

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	31,85	84,31	84,31	0,00	4,54	29,18	-21,386
300	32,02	84,51	84,32	0,06	4,50	29,33	-21,364
400	41,03	94,98	85,68	3,72	2,72	37,89	-20,699
500	49,11	105,03	88,55	8,24	1,19	46,86	-20,481
600	55,98	114,60	92,40	13,50	-0,07	56,10	-20,435
700	61,76	123,68	95,97	19,40	-1,07	65,56	-20,467
800	66,64	132,25	99,98	25,83	-1,85	75,12	-20,521
900	70,80	140,35	104,02	32,70	-2,43	84,78	-20,587
1000	74,35	148,00	108,04	39,97	-2,79	94,50	-20,653

Приняты значения, отобранные Россипи, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 247,97^\circ\text{K}$, $\Delta H_m^\circ = -3,250$ ккал/моль и $T_b = 417,56^\circ\text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,800$ ккал/моль. По данным Кобе и Линна [780], $T_c = 631,5^\circ\text{K}$, $P_c = 36,9$ атм и $d_c = 0,28$ г/см³.

4 № 401. *n*-Кеяллол, C_8H_{10} (состояние идеального газа). Мол. вес 106,160

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	30,32	81,23	81,23	0,00	4,29	28,95	-21,221
300	30,49	84,42	84,24	0,06	4,25	29,10	-21,199
400	39,70	94,48	85,54	3,58	2,32	37,69	-20,592
500	48,06	104,26	88,31	7,98	0,68	46,73	-20,424
600	55,16	113,66	91,76	13,15	-0,67	56,06	-20,419
700	61,12	122,63	95,54	18,97	-1,75	65,61	-20,485
800	66,14	131,12	99,46	25,34	-2,59	75,29	-20,566
900	70,39	139,17	103,43	32,17	-3,21	85,06	-20,655
1000	74,02	146,78	107,38	39,40	-3,61	94,90	-20,740

Приняты значения, отобранные Россипи, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 286,41^\circ\text{K}$, $\Delta H_m^\circ = -4,090$ ккал/моль и $T_b = 411,50^\circ\text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,62$ ккал/моль. По данным Кобе и Линна [780], $T_c = 618^\circ\text{K}$, $P_c = 35$ атм и $d_c = 0,29$ г/см³.

№ 402. Пропилбензол, C_9H_{12} (состояние идеального газа). Мол. вес 120,186

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	36,41	95,76	95,76	0,00	1,87	32,80	-24,045
300	36,62	95,99	95,77	0,07	1,82	32,99	-24,034
400	47,82	108,09	97,34	4,31	-0,33	43,73	-23,890
500	57,65	119,85	100,67	9,59	-2,10	54,95	-24,018
600	65,86	131,11	104,82	15,78	-3,51	66,49	-24,218
700	72,63	141,78	109,34	22,71	-4,60	78,26	-24,432
800	78,30	151,86	114,03	30,27	-5,42	90,14	-24,624
900	83,10	161,37	118,77	38,34	-6,00	102,13	-24,799
1000	87,16	170,34	123,48	46,86	-6,33	114,17	-24,951

Низкотемпературные термические свойства измерены Мессерли, Годдом и Финке [994]: $T_{tr} = 173,59^\circ\text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,215$ ккал/моль, $S_{298}^\circ(l) = 68,78$ кал/(моль · °K) и $S_{298}^\circ(g) = 95,09$ кал/(моль · °K). Термодинамические функции и энтальпия образования отобраны Россипи, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], которые приводят также значение $T_b = 432,37^\circ\text{K}$, при этом $\Delta H_v = 9,14$ ккал/моль. Величина энтропии, определенная калориметрическим методом, удовлетворительно согласуется со значениями, отобранными Россипи и др., которые приняты здесь, поскольку обеспечивают сопоставимость результатов.

№ 403. Кумол, C_9H_{12} (состояние идеального газа). Мол. вес 120,186

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	36,26	92,87	92,87	0,00	0,94	32,74	-23,995
300	36,47	93,10	92,88	0,07	0,89	32,93	-23,988
400	48,00	105,21	94,45	4,31	-1,26	43,95	-24,014
500	57,90	117,01	97,79	9,62	-3,00	55,46	-24,242
600	66,20	128,33	101,94	15,84	-4,39	67,28	-24,507
700	72,90	139,05	106,49	22,80	-5,44	79,33	-24,766
800	78,60	149,17	111,19	30,38	-6,24	91,48	-24,990
900	83,30	158,70	115,95	38,48	-6,79	103,74	-25,189
1000	87,30	167,69	120,68	47,02	-7,10	116,05	-25,361

Приняты значения, отобранные Россипи, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 177,12^\circ\text{K}$, $\Delta H_m^\circ =$

$\Delta H_v = 1,7$ ккал/моль и $T_b = 425,54^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,97$ ккал/моль. По данным Кобе и Линна [780], $T_c = 635,8^\circ \text{K}$ и $P_c = 32$ атм.

№ 404. *m*-Этилтолуол, C_9H_{12} (состояние идеального газа). Мол. вес 120,186

$T, ^\circ\text{K}$	кал/(моль $^\circ\text{K}$)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	36,38	96,60	96,60	0,00	-0,46	30,22	-22,154
300	36,59	96,83	96,61	0,07	-0,51	30,41	-22,154
400	47,50	108,88	98,17	4,29	-2,68	41,06	-22,444
500	57,20	120,55	101,49	9,53	-4,49	52,21	-22,821
600	65,40	131,73	105,61	15,68	-5,95	63,69	-23,197
700	72,10	142,32	110,10	22,56	-7,08	75,40	-23,539
800	77,80	152,33	114,76	30,06	-7,96	87,23	-23,828
900	82,70	161,79	119,47	38,09	-8,58	99,17	-24,081
1000	86,80	170,72	124,15	46,58	-8,95	111,18	-24,296

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_t = 176,18^\circ \text{K}$, $\Delta H_t^\circ = 1,79$ ккал/моль, $T_m = 177,58^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,82$ ккал/моль и $T_b = 434,45^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 9,21$ ккал/моль.

№ 405. *o*-Этилтолуол, C_9H_{12} (состояние идеального газа). Мол. вес 120,186

$T, ^\circ\text{K}$	кал/(моль $^\circ\text{K}$)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	37,74	95,42	95,42	0,00	0,29	31,33	-22,961
300	37,94	95,66	95,43	0,08	0,25	31,51	-22,958
400	48,50	108,05	97,04	4,41	-1,81	42,27	-23,091
500	57,90	119,91	100,44	9,74	-3,53	53,49	-23,379
600	65,80	131,18	104,63	15,93	-4,94	65,02	-23,682
700	72,50	141,84	109,19	22,86	-6,03	76,78	-23,971
800	78,10	151,90	113,91	30,40	-6,87	88,66	-24,219
900	82,80	161,37	118,66	38,45	-7,48	100,64	-24,439
1000	86,90	170,32	123,38	46,94	-7,84	112,69	-24,627

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_t = 186,59^\circ \text{K}$, $\Delta H_t^\circ = 2,28$ ккал/моль, $T_m = 192,32^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,54$ ккал/моль и $T_b = 438,30^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 9,29$ ккал/моль.

№ 406. *n*-Этилтолуол, C_9H_{12} (состояние идеального газа). Мол. вес 120,186

$T, ^\circ\text{K}$	кал/(моль $^\circ\text{K}$)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	36,22	95,34	95,34	0,00	-0,78	30,28	-22,195
300	36,42	95,57	95,35	0,07	-0,83	30,47	-22,196
400	47,20	107,55	96,91	4,26	-3,02	41,25	-22,537
500	56,90	119,15	100,20	9,48	-4,86	52,54	-22,963
600	65,00	130,26	104,29	15,59	-6,36	64,15	-23,367
700	71,80	140,81	108,76	22,43	-7,53	76,01	-23,731
800	77,60	150,78	113,40	29,91	-8,43	88,00	-24,039
900	82,40	160,21	118,08	37,92	-9,07	100,10	-24,306
1000	86,60	169,11	122,74	46,37	-9,47	112,26	-24,533

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 210,80^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 3,04$ ккал/моль и $T_b = 435,14^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 9,18$ ккал/моль.

№ 407. 1,2,3-Триметилбензол, C_9H_{12} (состояние идеального газа). Мол. вес 120,186

$T, ^\circ\text{K}$	кал/(моль $^\circ\text{K}$)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	36,85	91,98	91,98	0,00	-2,29	29,77	-21,822
300	37,04	92,21	91,99	0,07	-2,34	29,97	-21,830
400	46,90	104,24	93,56	4,28	-4,52	41,08	-22,444
500	56,10	115,71	96,85	9,44	-6,42	52,70	-23,036
600	64,00	126,66	100,91	15,45	-8,00	64,67	-23,555
700	70,90	137,05	105,34	22,20	-9,27	76,90	-24,008
800	76,70	146,91	109,93	29,59	-10,26	89,27	-24,385
900	81,60	156,23	114,56	37,51	-10,99	101,76	-24,709
1000	85,90	165,06	119,17	45,89	-11,46	114,32	-24,984

Результаты измерений Тейлора, Джонсона и Килпатрика [1475] использовались в сочетании со значениями, отобранными Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_t = 218,68^\circ \text{K}$, $\Delta H_t^\circ = 0,157$ ккал/моль, $T_m = 230,25^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 0,320$ ккал/моль, $T_b = 449,23^\circ \text{K}$, $\Delta H_v = 9,57$ ккал/моль. По данным Кобе и Линна [780], $T_c = 668^\circ \text{K}$, $P_c = 31$ атм и $d_c = 0,28$ г/см³.

№ 408. 1,2,4-Триметилбензол, C_9H_{12} (состояние идеального газа). Мол. вес 120,186

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	36,81	94,59	94,59	0,00	-3,33	27,95	-20,489
300	36,99	94,82	94,60	0,07	-3,38	28,14	-20,502
400	46,96	106,85	96,17	4,28	-5,56	39,00	-21,305
500	56,26	118,35	99,46	9,45	-7,44	50,36	-22,010
600	64,29	129,33	103,53	15,49	-9,01	62,06	-22,604
700	71,12	139,77	107,97	22,26	-10,25	74,02	-23,108
800	76,93	149,65	112,57	29,67	-11,21	86,11	-23,523
900	81,87	159,01	117,21	37,62	-11,92	98,33	-23,876
1000	86,10	167,86	121,84	46,02	-12,37	110,61	-24,174

Данные, полученные Патнамом и Килпатриком [1208] для низкотемпературных условий, свидетельствуют о существовании двух точек плавления: при 229,32° K и приблизительно при 224,2° K, однако воспроизводимые результаты по теплоемкости получены лишь для одной фазы, имеющей более высокую точку плавления. Хастингс и Нихолсон [577] проверили спектр и рассчитали термодинамические функции для состояния идеального газа. Остальные свойства взяты из работы Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248]. $Tt = 229,35^\circ K$, $\Delta Ht^\circ = 3,152$ ккал/моль и $Tb = 442,50^\circ K$, при этом $\Delta Hv = 9,38$ ккал/моль. По данным Колбе и Линна [780], $Tc = 654,3^\circ K$ и $Pc = 33$ атм.

№ 409. Мезитилен, C_9H_{12} (состояние идеального газа). Мол. вес 120,186

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	35,91	92,09	92,09	0,00	-3,84	28,19	-20,662
300	36,10	92,32	92,10	0,07	-3,89	28,38	-20,677
400	46,41	104,13	93,64	4,20	-6,14	39,50	-21,579
500	55,92	115,54	96,88	9,33	-8,07	51,14	-22,351
600	64,08	126,47	100,91	15,34	-9,66	63,12	-22,991
700	70,99	136,88	105,31	22,10	-10,92	75,37	-23,530
800	76,84	146,75	109,88	29,50	-11,90	87,75	-23,971
900	81,81	156,10	114,50	37,44	-12,61	100,26	-24,345
1000	86,07	164,94	119,11	45,84	-13,06	112,84	-24,659

Приняты результаты низкотемпературных измерений Тейлора и Килпатрика [1476], а также значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $Tt = 221,44^\circ K$,

$\Delta Ht^\circ = 1,892$ ккал/моль, $Tt = 223,32^\circ K$, $\Delta Ht^\circ = 1,932$ ккал/моль, $Tt = 228,43^\circ K$, $\Delta Ht^\circ = 2,274$ ккал/моль и $Tb = 437,87^\circ K$, при этом $\Delta Hv = 9,33$ ккал/моль. Согласно измерениям Амброза, Кокса и Тоунсенда [13], $Tc = 637,3^\circ K$, а по данным Кобе и Линна [780], $Pc = 33$ атм и $dc = 0,28$ г/см³.

№ 410. Бутилбензол, $C_{10}H_{14}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 134,212

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	41,85	105,04	105,04	0,00	-3,30	34,58	-25,346
300	42,09	105,30	105,05	0,08	-3,35	34,81	-25,358
400	54,75	119,18	106,85	4,94	-5,83	47,93	-26,184
500	65,89	132,63	110,67	10,98	-7,85	61,61	-26,927
600	75,20	145,49	115,41	18,05	-9,46	75,64	-27,552
700	82,91	157,68	120,59	25,97	-10,69	89,94	-28,080
800	89,37	169,18	125,95	34,59	-11,61	104,37	-28,511
900	94,84	180,03	131,36	43,81	-12,25	118,92	-28,875
1000	99,49	190,27	136,75	53,53	-12,60	133,52	-29,180

Низкотемпературные термические свойства измерены Мессерли, Годдом и Финке [994]: $Ttp = 185,30^\circ K$, $\Delta Ht^\circ = 2,682$ ккал/моль, $S_{298}^\circ(l) = 76,77$ кал/(моль·°K) и $S_{298}^\circ(g) = 104,65$ кал/(моль·°K). Термодинамические функции и энтальпии образования отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], которые приводят также значение $Tb = 456,42^\circ K$. Величина энтропии, определенная калориметрическим методом, удовлетворительно согласуется со значениями, отобранными Россини и др., которые приняты здесь, поскольку обеспечивают сопоставимость результатов. По данным измерений Амброза, Кокса и Тоунсенда [13], $Tc = 660,4^\circ K$.

№ 411. м-Дизтилбензол, $C_{10}H_{14}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 134,212

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	42,27	104,99	104,99	0,00	-5,22	32,67	-23,949
300	42,58	105,26	105,00	0,08	-5,27	32,91	-23,970
400	55,01	119,24	106,82	4,97	-7,71	46,02	-25,143
500	66,03	132,74	110,66	11,04	-9,71	59,69	-26,090
600	75,19	145,61	115,42	18,12	-11,32	73,72	-26,850
700	82,89	157,79	120,61	26,03	-12,55	88,01	-27,475
800	89,31	169,29	125,99	34,65	-13,47	102,42	-27,979
900	94,69	180,13	131,41	43,85	-14,12	116,96	-28,400
1000	99,37	190,35	136,79	53,56	-14,49	131,55	-28,750

Прозен, Джонсон и Россини [1195] корреляционным методом рассчитали $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -5,22$ ккал/моль. Увеличение энтропии на $9,75$ кал/(моль·°К) при замене метильной группы на этильную использовали при вычислении энтропии газообразного *m*-диэтилбензола по энтропии газообразного *m*-ксилола и получили значение $S_{298}^{\circ}(g) = 104,99$ кал/(моль·°К). Теплоемкость газообразного *m*-диэтилбензола рассчитывали путем прибавления девяти инкрементов замены метильной группы на этильную к теплоемкости газообразного *m*-ксилола.

№ 412. *o*-Диэтилбензол, $C_{10}H_{14}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 134,212

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	43,63	103,81	103,81	0,00	-4,53	33,72	-24,713
300	43,94	104,09	103,82	0,09	-4,58	33,95	-24,731
400	56,01	118,41	105,69	5,09	-6,90	47,16	-25,767
500	66,71	132,09	109,61	11,25	-8,82	60,91	-26,621
600	75,66	145,07	114,45	18,38	-10,37	74,99	-27,314
700	83,22	157,31	119,71	26,33	-11,56	89,33	-27,889
800	89,54	168,85	125,14	34,98	-12,46	103,79	-28,353
900	94,86	179,71	130,60	44,20	-13,08	118,37	-28,743
1000	99,49	189,95	136,03	53,93	-13,43	133,01	-29,068

Прозен, Джонсон и Россини [1195] корреляционным методом рассчитали $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -4,53$ ккал/моль. Стандартное увеличение энтропии на $9,75$ кал/(моль·°К) при замене метильной группы на этильную использовали при вычислении энтропии газообразного *o*-диэтилбензола по энтропии газообразного *o*-ксилола и получили значение $S_{298}^{\circ}(g) = 103,81$ кал/(моль·°К). Теплоемкость газообразного *o*-диэтилбензола была рассчитана путем прибавления девяти инкрементов замены метильной группы на этильную к теплоемкости газообразного *o*-ксилола.

№ 413. *n*-Диэтилбензол, $C_{10}H_{14}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 134,212

Прозен, Джонсон и Россини [1195] корреляционным методом рассчитали $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -5,32$ ккал/моль. Увеличение энтропии на $9,75$ кал/(моль·°К) при замене метильной группы на этильную использовали при вычислении энтропии газообразного *n*-диэтилбензола по энтропии газообразного *n*-ксилола и получили значение $S_{298}^{\circ}(g) = 103,73$ кал/(моль·°К). К теплоемкостям газообразного

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	42,10	103,73	103,73	0,00	-5,32	32,95	-24,152
300	42,41	104,00	103,74	0,08	-5,37	33,18	-24,173
400	54,68	117,91	105,55	4,95	-7,84	46,43	-25,365
500	65,66	131,32	109,37	10,98	-9,88	60,24	-26,328
600	74,84	144,13	114,11	18,02	-11,52	74,41	-27,102
700	82,58	156,26	119,27	25,90	-12,78	88,85	-27,738
800	89,04	167,72	124,62	34,49	-13,73	103,42	-28,251
900	94,45	178,53	130,01	43,67	-14,40	118,11	-28,680
1000	99,16	188,73	135,38	53,36	-14,79	132,87	-29,037

n-ксилола прибавляли девять инкрементов замены метильной группы на этильную и получали значения теплоемкостей газообразного *n*-диэтилбензола.

№ 414. 1,2,3,4-Тетраметилбензол, $C_{10}H_{14}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 134,212

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	45,31	99,55	99,55	0,00	-10,02	29,50	-21,620
300	45,50	99,84	99,56	0,09	-10,07	29,74	-21,662
400	56,81	114,50	101,48	5,21	-12,27	43,36	-23,687
500	67,01	128,30	105,48	11,42	-14,14	57,48	-25,125
600	75,68	141,30	110,38	18,56	-15,67	71,95	-26,205
700	83,13	153,54	115,68	26,51	-16,87	86,66	-27,055
800	89,42	165,07	121,14	35,15	-17,78	101,50	-27,727
900	94,82	175,92	126,63	44,37	-18,41	116,46	-28,278
1000	99,47	186,15	132,07	54,09	-18,76	131,48	-28,733

На основании измерений энтальпии сгорания Бансе и Паркс [71] определили $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -26,2$ ккал/моль или $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -10,02$ ккал/моль. Хаффман, Паркс и Бармор [655] по данным измерений теплоемкости в температурном интервале от 90 до 298° К установили, что $S_{298}^{\circ}(l) = 69,45$ кал/(моль·°К) и $\Delta H_m^{\circ} = 2,68$ ккал/моль. Согласно Россини, Питцеру, Арнетту, Брауну и Пиментелу [1248], $T_m = 266,90^{\circ}$ К и $T_b = 478,19^{\circ}$ К. Хастингс и Нихолсон [577] по основным частотам рассчитали термодинамические функции для газообразного состояния.

№ 415. 1,2,3,5-Тетрамethylбензол, $C_{10}H_{14}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 134,212

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	44,39	100,99	100,99	0,00	-10,71	28,38	-20,800
300	44,57	101,27	101,00	0,09	-10,76	28,62	-20,845
400	55,76	115,65	102,88	5,11	-13,06	42,10	-23,004
500	66,03	129,22	106,80	11,21	-15,03	56,13	-24,533
600	74,81	142,05	111,62	18,27	-16,66	70,51	-25,682
700	82,39	154,17	116,84	26,14	-17,94	85,16	-26,586
800	88,79	165,60	122,23	34,70	-18,91	99,94	-27,301
900	94,27	176,38	127,65	43,86	-19,60	114,85	-27,887
1000	99,01	186,56	133,04	53,53	-20,01	129,82	-28,371

На основании измерений энтальпии сгорания Бансе и Паркс [71] определили $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -10,71$ ккал/моль. Используются результаты низкотемпературных измерений Хаффмана, Паркса и Бармора [655], величины, отобранные Россини, Парксом, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], а также значения термодинамических функций для газообразного состояния, рассчитанные Хастингсом и Нихолсоном [577]. $T_m = 249,46^{\circ}$ K, $\Delta H_m^{\circ} = 2,8$ ккал/моль и $T_b = 471,15^{\circ}$ K.

№ 416. 1,2,4,5-Тетрамethylбензол, $C_{10}H_{14}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 134,212

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	44,58	100,03	100,03	0,00	-10,82	28,55	-20,929
300	44,77	100,31	100,04	0,09	-10,87	28,79	-20,975
400	55,50	114,67	101,92	5,11	-13,18	42,38	-23,153
500	65,62	128,17	105,83	11,17	-15,18	56,50	-24,697
600	74,38	140,93	110,63	18,18	-16,85	70,99	-25,858
700	81,97	152,98	115,83	26,01	-18,17	85,76	-26,773
800	88,41	164,35	121,19	34,54	-19,19	100,66	-27,497
900	93,94	175,09	126,59	43,66	-19,91	115,69	-28,093
1000	98,71	185,25	131,95	53,30	-20,35	130,80	-28,584

На основании измерений энтальпии сгорания Бансе и Паркс [71] определили $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -10,82$ ккал/моль. Используются результаты низкотемпературных измерений Хаффмана, Паркса и Бармора [655], величины, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном

и Пиментелом [1248], а также значения термодинамических функций для газообразного состояния, рассчитанные Хастингсом и Нихолсоном [577]. $T_m = 352,39^{\circ}$ K, $\Delta H_m^{\circ} = 5,020$ ккал/моль и $T_b = 469,95^{\circ}$ K.

№ 417. Пентилбензол, $C_{11}H_{16}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 148,238

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	47,32	114,47	114,47	0,00	-8,23	36,55	-26,790
300	47,59	114,77	114,48	0,09	-8,29	36,82	-26,824
400	61,69	130,43	116,52	5,57	-11,08	52,31	-28,577
500	74,14	145,57	120,82	12,38	-13,36	68,42	-29,907
600	84,55	160,04	126,16	20,33	-15,17	84,95	-30,940
700	93,18	173,73	131,99	29,23	-16,54	101,76	-31,769
800	100,43	186,66	138,02	38,92	-17,56	118,72	-32,430
900	106,59	198,86	144,11	49,27	-18,25	135,80	-32,976
1000	111,83	210,37	150,17	60,20	-18,62	152,96	-33,427

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 198^{\circ}$ K и $T_b = 478,61^{\circ}$ K.

№ 418. Пентаметилбензол, $C_{11}H_{16}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 148,238

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	51,74	106,09	106,09	0,00	-17,80	29,48	-21,606
300	51,99	106,42	106,10	0,10	-17,85	29,77	-21,684
400	65,00	123,19	108,30	5,96	-20,26	46,02	-25,145
500	76,43	138,96	112,87	13,05	-22,26	62,83	-27,462
600	86,08	153,77	118,46	21,19	-23,88	80,00	-29,137
700	94,27	167,67	124,51	30,21	-25,12	97,43	-30,416
800	101,29	180,73	130,73	40,00	-26,04	114,98	-31,410
900	107,20	193,00	136,97	50,43	-26,66	132,66	-32,212
1000	112,33	204,57	143,16	61,42	-26,98	150,39	-32,867

На основании изучения низкотемпературных свойств Хаффман, Паркс и Бармор [655] обнаружили полиморфный переход при $296,8^{\circ}$ K, $\Delta H_t^{\circ} = 0,473$ ккал/моль и $S_{298}^{\circ}(s) = 70,22$ кал/(моль·°K). По данным Ферри и Томаса [418,], $T_m = 327,5^{\circ}$ K и $\Delta H_m^{\circ} = 2,950$ ккал/моль. Паркс, Уест, Нейлор, Фаджи и Мак-Клейн

[1121] по данным измерения энтальпии сгорания определили $\Delta H_{298}^{\circ}(s) = -32,33$ ккал/моль, что согласуется с результатами Бансе и Паркса [71]. Хастингс и Нихолсон [577] табулировали термодинамические данные для состояния идеального газа.

№ 419. Гексилбензол, $C_{12}H_{18}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 162,264

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	52,79	123,78	123,78	0,00	-13,15	38,56	-28,267
300	53,08	124,11	123,79	0,10	-13,22	38,88	-28,323
400	68,63	141,56	126,06	6,20	-16,33	56,74	-31,001
500	82,39	158,39	130,85	13,77	-18,86	75,31	-32,917
600	93,89	174,46	136,79	22,60	-20,87	94,33	-34,358
700	103,46	189,67	143,27	32,48	-22,38	113,67	-35,488
800	111,50	204,02	149,98	43,24	-23,50	133,17	-36,378
900	118,34	217,56	156,74	54,74	-24,25	152,81	-37,105
1000	124,20	230,34	163,47	66,88	-24,63	172,52	-37,703

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 212^{\circ}$ K и $T_b = 499,25^{\circ}$ K.

№ 420. 1,2,3-Триэтилбензол, $C_{12}H_{18}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 162,264

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,52	121,23	121,23	0,00	-16,25	36,22	-26,552
300	54,92	121,57	121,24	0,11	-16,31	36,55	-26,622
400	69,37	139,38	123,57	6,33	-19,30	54,64	-29,852
500	82,50	156,31	128,44	13,94	-21,79	73,42	-32,090
600	93,52	172,35	134,43	22,76	-23,82	92,65	-33,745
700	103,09	187,51	140,94	32,60	-25,37	112,20	-35,029
800	111,05	201,81	147,66	43,32	-26,52	131,92	-36,036
900	117,69	215,28	154,44	54,76	-27,33	151,78	-36,856
1000	123,61	227,99	161,16	66,83	-27,78	171,73	-37,529

Значение $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -16,25$ ккал/моль рассчитано по корреляционному методу Прозена, Джонсона и Россини [1195]. Увеличение стандартной энтропии на $9,75$ кал/(моль·°K) при замене метильной группы на этильную использовали при вычислении энтропии газообразного 1,2,3-триэтилбензола по энтропии 1,2,3-триметилбензола и получали значение $S_{298}^{\circ}(g) = 121,23$ кал/(моль·°K). Тепло-

емкость газообразного 1,2,3-триэтилбензола рассчитывали путем прибавления девяти инкрементов замены метильной группы на этильную к теплоемкости газообразного 1,2,3-триметилбензола.

№ 421. 1,2,4-Триэтилбензол, $C_{12}H_{18}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 162,264

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	54,48	123,84	123,84	0,00	-16,99	34,71	-25,439
300	54,87	124,18	123,85	0,11	-17,05	35,02	-25,512
400	69,43	141,99	126,18	6,33	-20,04	52,86	-28,877
500	82,66	158,95	131,05	13,95	-22,52	71,37	-31,196
600	93,81	175,03	137,05	22,79	-24,52	90,34	-32,903
700	103,31	190,22	143,57	32,66	-26,05	109,62	-34,223
800	111,28	204,55	150,31	43,40	-27,18	129,06	-35,257
900	117,96	218,05	157,09	54,87	-27,96	148,65	-36,096
1000	123,81	230,79	163,83	66,96	-28,38	168,32	-36,784

Значение $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -16,99$ ккал/моль рассчитано по корреляционному методу Прозена, Джонсона и Россини [1195]. Увеличение энтропии на $9,75$ кал/(моль·°K) при замене метильной группы на этильную использовали при вычислении энтропии газообразного 1,2,4-триэтилбензола по энтропии газообразного 1,2,4-триметилбензола и получали значение $S_{298}^{\circ}(g) = 123,84$ кал/(моль·°K). Теплоемкость газообразного 1,2,4-триэтилбензола рассчитывали путем прибавления девяти инкрементов замены метильной группы на этильную к теплоемкости газообразного 1,2,4-триметилбензола.

№ 422. 1,3,5-Триэтилбензол, $C_{12}H_{18}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 162,264

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	53,58	121,34	121,34	0,00	-17,86	34,58	-25,348
300	53,98	121,68	121,35	0,10	-17,93	34,90	-25,425
400	68,88	139,28	123,65	6,26	-20,98	53,00	-28,955
500	82,32	156,14	128,47	13,84	-23,51	71,79	-31,379
600	93,60	172,17	134,43	22,65	-25,54	91,04	-33,159
700	103,18	187,34	140,91	32,50	-27,08	110,61	-34,532
800	111,19	201,65	147,62	43,23	-28,22	130,34	-35,606
900	117,90	215,14	154,38	54,69	-29,01	150,22	-36,477
1000	123,78	227,88	161,10	66,78	-29,44	170,18	-37,191

Значение $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -17,86$ ккал/моль рассчитано по корреляционному методу Прозена, Джонсона и Россини [1195]. Увеличенные энтропии на $9,75$ кал/(моль·°К) при замене метильной группы на этильную использовали при вычислении энтропии газообразного 1,3,5-триэтилбензола по энтропии газообразного 1,3,5-триметилбензола и получали значение $S^{\circ}_{298}(g) = 121,34$ кал/(моль·°К). К теплоемкости газообразного 1,3,5-триметилбензола прибавляли девять инкрементов замены метильной группы на этильную и получали значения теплоемкостей газообразного 1,3,5-триэтилбензола.

№ 423. Гексаметилбензол, $C_{12}H_{18}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 162,264

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H^{\circ}_{298})/T$	$H^{\circ}-H^{\circ}_{298}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	59,42	108,12	108,12	0,00	-25,26	31,12	-22,813
300	59,73	108,49	108,13	0,12	-25,31	31,47	-22,923
400	74,18	127,70	110,65	6,83	-27,81	50,80	-27,753
500	86,65	145,63	115,87	14,89	-29,86	70,69	-30,898
600	97,13	162,38	122,24	24,09	-31,50	90,95	-33,127
700	105,97	178,04	129,11	34,25	-32,72	111,47	-34,802
800	113,51	192,69	136,15	45,24	-33,61	132,12	-36,092
900	119,99	206,44	143,20	56,92	-34,18	152,88	-37,123
1000	125,55	219,38	150,18	69,20	-34,42	173,70	-37,960

На основании изучения низкотемпературных свойств Франкоски и Астон [441] установили, что $Tt = 116,48^{\circ}$ К, $\Delta Ht = 0,269$ ккал/моль и $S^{\circ}_{298}(s) = 71,66$ кал/(моль·°К). Эти авторы сравнили полученные результаты с данными более ранних работ, проводившихся в температурном интервале $14-340^{\circ}$ К. Спагг, Томас и Паркс [1400] установили, что $Tt = 383,8^{\circ}$ К, $\Delta Ht = 0,422$ ккал/моль, $Tm = 438,7^{\circ}$ К и $\Delta Hm^{\circ} = 4,93$ ккал/моль. Паркс, Уест, Нейлор, Фуджини и Мак-Клейн [1121] в экспериментальной работе по измерению энтальпии сгорания приводят обзор соответствующей литературы; по результатам их измерений $\Delta H_f^{\circ}_{298}(s) = -39,19$ ккал/моль. Хастингс и Нихолсон табулировали термодинамические данные для состояния идеального газа. Момотани, Сага, Секи и Нитта [1020] повторили измерения температур и энтальпий перехода; их данные согласуются с соответствующими значениями Паркса и его учеников.

№ 424. 1-Фенилгептан, $C_{13}H_{20}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 176,290

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $Tm = 225^{\circ}$ К, $Tb = 519,25^{\circ}$ К.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H^{\circ}_{298})/T$	$H^{\circ}-H^{\circ}_{298}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	58,25	133,09	133,09	0,00	-18,08	40,57	-29,737
300	58,58	133,46	133,10	0,11	-18,15	40,93	-29,815
400	75,57	152,68	135,60	6,84	-21,58	61,17	-33,420
500	90,63	171,21	140,88	15,17	-24,37	82,19	-35,924
600	103,23	188,88	147,42	24,88	-26,58	103,71	-37,773
700	113,73	205,60	154,55	35,74	-28,24	125,57	-39,203
800	122,56	221,38	161,93	47,56	-29,45	147,61	-40,324
900	130,08	236,26	169,37	60,21	-30,25	169,81	-41,233
1000	136,50	250,31	176,77	73,54	-30,66	192,08	-41,976

№ 425. 1-Фенилоктан, $C_{14}H_{22}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 190,316

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H^{\circ}_{298})/T$	$H^{\circ}-H^{\circ}_{298}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	63,72	142,40	142,40	0,00	-23,00	42,59	-31,214
300	64,07	142,80	142,41	0,12	-23,08	42,99	-31,314
400	82,51	163,81	145,15	7,47	-26,83	65,61	-35,844
500	98,88	184,03	150,91	16,56	-29,88	89,08	-38,934
600	112,58	203,30	158,05	27,15	-32,28	113,09	-41,191
700	124,01	221,54	165,83	39,00	-34,08	137,48	-42,922
800	133,62	238,74	173,88	51,89	-35,39	162,06	-44,272
900	141,83	254,96	182,00	65,67	-36,25	186,81	-45,362
1000	148,80	270,28	190,07	80,22	-36,67	211,64	-46,252

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $Tm = 237^{\circ}$ К и $Tb = 537,55^{\circ}$ К.

№ 426. 1,2,3,4-Тетраэтилбензол, $C_{14}H_{22}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 190,316

Значение $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -29,46$ ккал/моль рассчитано по корреляционному методу Прозена, Джонсона и Россини [1195]. К значению энтропии газообразного 1,2,3,4-тетраметилбензола прибавляли умноженное на четыре увеличение энтропии на $9,75$ кал/(моль·°К) при замене метильной группы на этильную и получали $S^{\circ}_{298}(g) = 138,55$ кал/(моль·°К). К теплоемкости газообразного 1,2,3,4-тетра-

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	68,87	138,55	138,55	0,00	-29,46	37,27	-27,321
300	69,34	138,98	138,56	0,13	-29,53	37,68	-27,449
400	86,77	161,37	141,49	7,95	-32,80	60,61	-33,113
500	102,21	182,43	147,59	17,43	-35,47	84,28	-36,837
600	115,04	202,23	155,07	28,30	-37,59	108,42	-39,490
700	126,05	220,81	163,15	40,37	-39,16	132,90	-41,492
800	135,22	238,26	171,46	53,45	-40,29	157,54	-43,037
900	142,94	254,64	179,80	67,36	-41,02	182,33	-44,274
1000	149,75	270,06	188,06	82,01	-41,34	207,19	-45,278

метилбензола прибавляли девять инкрементов замены метильной группы на этильную и таким образом рассчитывали теплоемкости газообразного 1,2,3,4-тетраэтилбензола.

№ 427. 1,2,3,5-Тетраэтилбензол, C₁₄H₂₂ (состояние идеального газа).
Мол. вес 190,316

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	67,95	139,99	139,99	0,00	-29,36	36,94	-27,079
300	68,41	140,42	140,00	0,13	-29,43	37,35	-27,208
400	85,72	162,58	142,89	7,85	-32,80	60,15	-32,862
500	101,23	183,35	148,92	17,22	-35,58	83,72	-36,591
600	114,17	202,98	156,31	28,01	-37,78	107,78	-39,255
700	125,31	221,44	164,31	40,00	-39,44	132,19	-41,269
800	134,59	238,79	172,55	53,00	-40,64	156,77	-42,826
900	142,39	255,11	180,82	66,86	-41,42	181,51	-44,074
1000	149,29	270,47	189,03	81,45	-41,80	206,32	-45,089

Значение ΔH_f^o(g) = -29,36 ккал/моль рассчитано по корреляционному методу Прозена, Джонсона и Россини [1195]. К значению энтропии газообразного 1,2,3,5-тетраметилбензола прибавляли умноженное на четыре увеличение энтропии на 9,75 кал/(моль·°K) при замене метильной группы на этильную и получали S₂₉₈^o(g) = 139,99 кал/(моль·°K). К теплоемкостям газообразного 1,2,3,5-тетраметилбензола прибавляли девять инкрементов замены метильной группы на этильную и таким образом рассчитывали теплоемкости газообразного 1,2,3,5-тетраэтилбензола.

№ 428. 1,2,4,5-Тетраэтилбензол, C₁₄H₂₂ (состояние идеального газа).
Мол. вес 190,316

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	69,14	139,03	139,03	0,00	-29,46	37,13	-27,216
300	68,61	139,46	139,04	0,13	-29,53	37,54	-27,345
400	85,46	161,54	141,93	7,85	-32,91	60,43	-33,016
500	100,82	182,31	147,95	17,18	-35,71	84,10	-36,758
600	113,74	201,86	155,32	27,93	-37,96	108,27	-39,434
700	124,89	220,25	163,30	39,87	-39,66	132,80	-41,459
800	134,21	237,55	171,51	52,84	-40,90	157,50	-43,025
900	142,06	253,82	179,76	66,66	-41,72	182,36	-44,282
1000	148,99	269,16	187,94	81,22	-42,13	207,31	-45,305

Значение ΔH_f^o = -29,46 ккал/моль рассчитано по корреляционному методу Прозена, Джонсона и Россини [1195]. Стандартное увеличение энтропии при замене метильной группы на этильную умножали на четыре, прибавляли к энтропии газообразного 1,2,4,5-тетраметилбензола и получали значение S₂₉₈^o(g) = 139,03 кал/(моль·°K). К теплоемкостям газообразного 1,2,4,5-тетраметилбензола прибавляли девять инкрементов замены метильной группы на этильную и таким образом рассчитывали теплоемкости 1,2,4,5-тетраэтилбензола.

№ 429. 1-Фецилнонан, C₁₅H₂₄ (состояние идеального газа). Мол. вес 204,342

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	69,18	151,71	151,71	0,00	-27,93	44,59	-32,685
300	69,57	152,14	151,72	0,13	-28,02	45,03	-33,806
400	89,45	174,93	154,69	8,10	-32,08	70,03	-38,262
500	107,12	196,85	160,94	17,96	-35,39	95,96	-41,941
600	121,92	217,72	168,68	29,43	-37,98	122,46	-44,605
700	134,28	237,47	177,11	42,25	-39,93	149,38	-46,638
800	144,69	256,10	185,83	56,22	-41,34	176,51	-48,217
900	153,57	273,66	194,63	71,14	-42,25	203,81	-49,489
1000	161,20	290,25	203,37	86,89	-42,70	231,20	-50,526

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 249° K и T_b = 555,15° K.

№ 430. 1-Фенилдекан, $C_{16}H_{26}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 218,368

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	74,65	161,02	161,02	0,00	-32,86	46,60	-34,155
300	75,06	161,49	161,03	0,14	-32,95	47,08	-34,298
400	96,40	186,06	164,23	8,74	-37,34	74,46	-40,681
500	115,37	209,67	170,98	19,35	-40,90	102,84	-44,947
600	131,26	232,15	179,31	31,70	-43,69	131,84	-48,019
700	144,56	253,40	188,39	45,51	-45,78	161,29	-50,353
800	155,76	273,46	197,79	60,54	-47,29	190,95	-52,162
900	165,32	292,37	207,26	76,61	-48,26	220,80	-53,616
1000	173,50	310,22	216,67	93,56	-48,72	250,75	-54,790

По данным измерения энтальпии сгорания Лöffлер и Россини [830] определили $\Delta H_{f,298}^{\circ}(l) = -51,58$ ккал/моль и $\Delta H_{f,298}^{\circ}(g) = -32,86$ ккал/моль. Термодинамические функции отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248], которые приводят также значения $T_m = 258,77^{\circ}$ K и $T_b = 571,04^{\circ}$ K.

№ 431. Пентаэтилбензол, $C_{16}H_{26}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 218,368

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	81,19	154,84	154,84	0,00	-41,87	39,43	-28,901
300	81,79	155,35	154,85	0,16	-41,95	39,93	-29,085
400	102,45	181,77	158,31	9,39	-45,69	67,82	-37,053
500	120,43	206,62	165,51	20,56	-48,70	96,56	-42,203
600	135,28	229,93	174,33	33,36	-51,04	125,82	-45,828
700	147,92	251,75	183,85	47,54	-52,76	155,46	-48,534
800	158,54	272,22	193,63	62,88	-53,96	185,27	-50,610
900	167,35	291,41	203,44	79,18	-54,69	215,23	-52,262
1000	175,18	309,46	213,15	96,32	-54,97	245,26	-53,599

Значение $\Delta H_{f,298}^{\circ}(g) = -41,87$ ккал/моль рассчитано по корреляционному методу Прозена, Джонсона и Россини [1195]. К значению энтропии газообразного пентаметилбензола прибавляли умноженное на пять увеличение энтропии на 9,75 кал/(моль·°K) при замене метильной группы на этильную и получали $S_{298}^{\circ}(g) = 154,84$ кал/(моль·°K). К теплоемкости газообразного пентаметилбензола прибавляли девять инкрементов замены метильной группы на этильную и таким образом рассчитывали теплоемкости газообразного пентаэтилбензола.

№ 432. 1-Фенилундекан, $C_{17}H_{28}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 232,394

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	80,12	170,32	170,32	0,00	-37,78	48,62	-35,634
300	80,55	170,82	170,33	0,15	-37,88	49,14	-35,799
400	103,34	197,18	173,77	9,37	-42,58	78,90	-43,108
500	123,62	222,48	181,00	20,74	-46,40	109,73	-47,960
600	140,60	246,56	189,93	33,98	-49,39	141,23	-51,440
700	154,84	269,33	199,67	48,77	-51,62	173,20	-54,074
800	166,82	290,81	209,73	64,87	-53,22	205,41	-56,112
900	177,07	311,06	219,87	82,07	-54,25	237,82	-57,748
1000	185,80	330,18	229,96	100,23	-54,73	270,33	-59,077

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 268^{\circ}$ K и $T_b = 586,35^{\circ}$ K.

№ 433. 1-Фенилдодекан, $C_{18}H_{30}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 246,420

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	85,58	179,63	179,63	0,00	-42,71	50,62	-37,104
300	86,05	180,17	179,64	0,16	-42,82	51,19	-37,291
400	110,28	208,30	183,31	10,00	-47,84	83,33	-45,526
500	131,86	235,29	191,03	22,14	-51,91	116,61	-50,966
600	149,94	260,98	200,56	36,25	-55,10	150,60	-54,854
700	165,11	285,26	210,95	52,03	-57,47	185,10	-57,789
800	177,88	308,16	221,68	69,19	-59,17	219,85	-60,058
900	188,81	329,76	232,50	87,54	-60,26	254,82	-61,875
1000	198,20	350,15	243,26	106,90	-60,76	289,88	-63,351

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 276^{\circ}$ K и $T_b = 600,75^{\circ}$ K.

№ 434. Гексаэтилбензол, $C_{18}H_{30}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 246,420

Значение $\Delta H_{f,298}^{\circ}(g) = -53,60$ ккал/моль рассчитано по корреляционному методу Прозена, Джонсона и Россини [1195]. К значению энтропии газообразного гексаметилбензола прибавляли умноженное на шесть увеличение энтропии на 9,75 кал/(моль·°K) при замене метильной группы на этильную и получали величину $S_{298}^{\circ}(g) = 166,62$ кал/(моль·°K). Теплоемкости газообразного гекса-

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	94,76	166,62	166,62	0,00	-53,60	43,61	-31,965
300	95,49	167,21	166,63	0,18	-53,69	44,20	-32,201
400	119,12	198,00	170,66	10,94	-57,79	77,50	-42,340
500	139,45	226,83	179,05	23,90	-61,04	111,71	-48,825
600	156,17	253,77	189,28	38,70	-63,54	146,48	-53,354
700	170,35	278,94	200,31	55,05	-65,34	181,66	-56,714
800	182,21	302,48	211,63	72,69	-66,57	217,00	-59,280
900	192,17	324,53	222,96	91,42	-67,27	252,51	-61,315
1000	200,97	345,24	234,16	111,08	-67,46	288,08	-62,958

этилбензола рассчитывали путем прибавления к теплоемкостям газообразного гексаметилбензола девяти инкрементов замены метильной группы на этильную.

№ 435. 1-Фенилтридекан, C₁₉H₃₂ (состояние идеального газа). Мол. вес 260,446

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	91,05	188,94	188,94	0,00	-47,63	52,64	-38,582
300	91,54	189,51	188,95	0,17	-47,75	53,25	-38,790
400	117,22	219,43	192,85	10,64	-53,08	87,77	-47,950
500	140,11	248,11	201,06	23,53	-57,41	123,49	-53,977
600	159,29	275,40	211,19	38,53	-60,80	159,99	-58,272
700	175,39	301,20	222,23	55,28	-63,31	197,02	-61,508
800	188,95	325,52	233,63	73,52	-65,11	234,30	-64,006
900	200,56	348,46	245,13	93,01	-66,25	271,82	-66,004
1000	210,50	370,13	256,56	113,57	-66,77	309,45	-67,626

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 283° K и T_b = 614,45° K.

№ 436. 1-Фенилтетрадекан, C₂₀H₃₄ (состояние идеального газа). Мол. вес 274,472

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 289° K и T_b = 627° K.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	96,51	198,25	198,25	0,00	-52,56	54,64	-40,052
300	97,04	198,85	198,26	0,18	-52,68	55,30	-40,282
400	124,16	230,55	202,40	11,27	-58,34	92,19	-50,369
500	148,35	260,93	211,09	24,93	-62,92	130,37	-56,983
600	168,63	289,82	221,82	40,80	-66,50	169,36	-61,687
700	185,66	317,13	233,51	58,54	-69,16	208,92	-65,224
800	200,02	342,88	245,59	77,84	-71,06	248,75	-67,951
900	212,30	367,17	257,76	98,47	-72,26	288,82	-70,132
1000	222,80	390,09	269,86	120,24	-72,80	329,00	-71,900

№ 437. 1-Фенилпентадекан, C₂₁H₃₆ (состояние идеального газа). Мол. вес 288,498

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	101,98	207,56	207,56	0,00	-57,49	56,65	-41,552
300	102,53	208,20	207,57	0,19	-57,62	57,35	-41,774
400	131,10	241,68	211,94	11,90	-63,59	96,62	-52,788
500	156,60	273,75	221,12	26,32	-68,43	137,25	-59,989
600	177,97	304,24	232,45	43,08	-72,21	178,74	-65,101
700	195,94	333,06	244,79	61,80	-75,01	220,82	-68,939
800	211,08	360,24	257,54	82,17	-77,01	263,19	-71,896
900	224,05	385,87	270,39	103,94	-78,27	305,82	-74,259
1000	235,20	410,07	283,16	126,92	-78,82	348,56	-76,173

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 295° K и T_b = 639° K.

№ 438. 1-Фенилгексадекан, C₂₂H₃₈ (состояние идеального газа). Мол. вес 302,524

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 300° K и T_b = 651° K.

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	107,45	216,87	216,87	0,00	-62,41	58,66	-42,999
300	108,02	217,54	216,88	0,20	-62,55	59,40	-43,274
400	138,04	252,80	221,48	12,53	-68,84	101,06	-55,212
500	164,85	286,57	231,15	27,71	-73,93	144,14	-63,000
600	187,31	318,66	243,08	45,35	-77,91	188,12	-68,519
700	206,22	349,00	256,07	65,05	-80,85	232,73	-72,658
800	222,14	377,60	269,49	86,49	-82,95	277,64	-75,844
900	235,80	404,57	283,01	109,40	-84,26	322,82	-78,388
1000	247,50	430,04	296,16	133,59	-84,83	368,12	-80,449

Стиролы. Таблицы для состояния идеального газа

№ 439. Стирол, C₈H₈ (состояние идеального газа). Мол. вес 104,144

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	29,18	82,48	82,48	0,00	35,22	51,10	-37,453
300	29,35	82,67	82,49	0,06	35,19	51,19	-37,292
400	38,32	92,37	83,75	3,45	33,83	56,75	-31,003
500	45,94	101,77	86,42	7,68	32,72	62,61	-25,364
600	52,14	110,71	89,73	12,59	31,81	68,67	-25,010
700	57,21	119,14	93,33	18,07	31,09	74,88	-23,376
800	61,40	127,06	97,06	24,00	30,52	81,16	-22,171
900	64,93	134,50	100,81	30,32	30,10	87,52	-21,252
1000	67,92	141,50	104,53	36,97	29,83	93,92	-20,526

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. (См. также монографию по стиrolу, вышедшую под редакцией Боунди и Бойера [151].) T_m = 242,52° K, ΔH_m° = 2,617 ккал/моль и T_b = 418,29° K, при этом ΔH_v = 8,850 ккал/моль. T_c = 546° K, P_c = 40 атм и d_c = 0,30 г/см³.

№ 440. α-Метилстирол, C₉H₁₀ (состояние идеального газа). Мол. вес 118,170

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 249,9° K и T_b = 438,6° K.

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	34,70	91,70	91,70	0,00	27,00	49,84	-36,531
300	34,90	91,92	91,71	0,07	26,96	49,98	-36,407
400	44,80	103,34	93,20	4,06	25,27	57,92	-31,645
500	53,50	114,30	96,33	8,99	23,84	66,25	-28,958
600	60,70	124,71	100,20	14,71	22,65	74,84	-27,260
700	66,80	134,54	104,41	21,10	21,72	83,63	-26,109
800	71,80	143,79	108,76	28,03	20,99	92,51	-25,272
900	76,10	152,51	113,14	35,43	20,44	101,49	-24,645
1000	79,80	160,72	117,49	43,23	20,11	110,53	-24,155

№ 441. Пропенилбензол (β-метилстирол), цис, C₉H₁₀ (состояние идеального газа). Мол. вес 118,170

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	34,70	91,70	91,70	0,00	29,00	51,84	-37,997
300	34,90	91,92	91,71	0,07	28,96	51,98	-37,864
400	44,80	103,34	93,20	4,06	27,27	59,92	-32,738
500	53,50	114,30	96,33	8,99	25,84	68,25	-29,833
600	60,70	124,71	100,20	14,71	24,65	76,84	-27,989
700	66,80	134,54	104,41	21,10	23,72	85,63	-26,734
800	71,80	143,79	108,76	28,03	22,99	94,51	-25,819
900	76,10	152,51	113,14	35,43	22,44	103,49	-25,130
1000	79,80	160,72	117,49	43,23	22,11	112,53	-24,592

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. T_m = 211,47° K и T_b = 440,58° K.

№ 442. Пропенилбензол (β-метилстирол), транс, C₉H₁₀ (состояние идеального газа). Мол. вес 118,170

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	34,90	90,90	90,90	0,00	28,00	51,08	-37,439
300	35,10	91,12	90,91	0,07	27,96	51,22	-37,310
400	45,20	102,63	92,41	4,10	26,30	59,24	-32,364
500	54,00	113,69	95,57	9,07	24,91	67,64	-29,562
600	61,20	124,19	99,47	14,84	23,78	76,28	-27,784
700	67,20	134,09	103,72	21,27	22,89	85,12	-26,573
800	72,20	143,40	108,10	28,24	22,20	94,04	-25,690
900	76,40	152,15	112,52	35,68	21,69	103,06	-25,025
1000	80,00	160,39	116,90	43,50	21,38	112,13	-24,504

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 243,82^\circ \text{K}$ и $T_b = 451,41^\circ \text{K}$.

№ 443. *m*-Метилстирол, C_9H_{10} (состояние идеального газа). Мол. вес 118,170

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	34,70	93,10	93,10	0,00	27,60	50,02	-36,665
300	34,90	93,32	93,11	0,07	27,56	50,16	-36,538
400	44,80	104,74	94,60	4,06	25,87	57,96	-31,667
500	53,50	115,70	97,73	8,99	24,44	66,15	-28,915
600	60,70	126,11	101,60	14,71	23,25	74,60	-27,173
700	66,80	135,94	105,81	21,10	22,32	83,25	-25,990
800	71,80	145,19	110,16	28,03	21,59	91,99	-25,130
900	76,10	153,91	114,54	35,43	21,04	100,83	-24,485
1000	79,80	162,12	118,89	43,23	20,71	109,73	-23,980

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 186,81^\circ \text{K}$ и $T_b = 444,7^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 9,27$ ккал/моль, согласно Клементсу, Уайзу и Джонсену [234].

№ 444. *o*-Метилстирол, C_9H_{10} (состояние идеального газа). Мол. вес 118,170

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	34,70	91,70	91,70	0,00	28,30	51,14	-37,484
300	34,90	91,92	91,71	0,07	28,26	51,28	-37,354
400	44,80	103,34	93,20	4,06	26,57	59,22	-32,355
500	53,50	114,30	96,33	8,99	25,14	67,55	-29,527
600	60,70	124,71	100,20	14,71	23,95	76,14	-27,734
700	66,80	134,54	104,41	21,10	23,02	84,93	-26,515
800	71,80	143,79	108,76	28,03	22,29	93,81	-25,628
900	76,10	152,51	113,14	35,43	21,74	102,79	-24,960
1000	79,80	160,72	117,49	43,23	21,41	111,83	-24,439

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 204,58^\circ \text{K}$ и $T_b = 442,96^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 9,46$ ккал/моль, согласно Клементсу, Уайзу и Джонсену [234].

№ 445. *n*-Метилстирол, C_9H_{10} (состояние идеального газа). Мол. вес 118,170

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	34,70	91,70	91,70	0,00	27,40	50,24	-36,825
300	34,90	91,92	91,71	0,07	27,36	50,38	-36,699
400	44,80	103,34	93,20	4,06	25,67	58,32	-31,864
500	53,50	114,30	96,33	8,99	24,24	66,65	-29,133
600	60,70	124,71	100,20	14,71	23,05	75,24	-27,406
700	66,80	134,54	104,41	21,10	22,12	84,03	-26,234
800	71,80	143,79	108,76	28,03	21,39	92,91	-25,382
900	76,10	152,51	113,14	35,43	20,84	101,89	-24,742
1000	79,80	160,72	117,49	43,23	20,51	110,93	-24,242

Приняты значения, отобранные Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248]. $T_m = 239,00^\circ \text{K}$ и $T_b = 445,9^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 9,31$ ккал/моль, согласно Клементсу, Уайзу и Джонсену [234].

Алкилнафталины. Таблицы для состояния идеального газа

№ 446. Нафталин, C_{10}H_8 (состояние идеального газа). Мол. вес 128,164

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	31,68	80,22	80,22	0,00	36,08	53,44	-39,172
300	31,89	80,42	80,23	0,06	36,05	53,55	-39,007
400	42,83	91,13	81,61	3,81	34,55	59,62	-32,575
500	52,13	101,72	84,58	8,58	33,34	66,04	-28,863
600	59,67	111,92	88,29	14,18	32,36	72,66	-26,465
700	65,77	121,59	92,36	20,46	31,60	79,45	-24,805
800	70,77	130,70	96,59	27,29	31,01	86,32	-23,580
900	74,91	139,28	100,86	34,58	30,58	93,26	-22,646
1000	78,38	147,36	105,11	42,25	30,33	100,25	-21,908

Колеман и Пилчер [264], а также Сперос и Россини [1401] измеряли энтальпию сгорания тщательно очищенного нафталина; получено хорошо согласующееся значение $\Delta H_f^\circ(s) = 18,66$ ккал/моль. В работе Колемана и Пилчера приводятся ссылки на более ранние работы.

Низкотемпературные термические данные, относящиеся к температурному интервалу от 40 до 370° К, получены Мак-Каллохом Финке, Мессерли, Тоддом, Кинчелом и Уаддингтоном [954]; они включают значения $\Delta H_m^\circ = 4,536$ ккал/моль и $T_{tr} = 353,43^\circ$ К. Баррох и Мак-Клеллан [77] измеряли теплоемкость пара при двух температурах (451,0 и 522,7° К) и энтальпию испарения при 440,9° К. Миллер [1005] измерял давление паров в области сверхнизких давлений. Он показал, что отнесение колебаний, выполненное Митрой и Бернштейном [1015], соответствует результатам его собственных измерений, калориметрическому значению энтропии, энтальпии испарения и давлению пара в миллиметровой области по данным Кеймина и Россини [189]. На этом основании отнесения Митры и Бернштейна [1015] были использованы для расчетов представленных здесь термодинамических функций. Рассчитанная Миллером [1005] энтальпия сублимации при 298° К равна 17,42 ккал/моль, что дает $\Delta H_{f,298}^\circ(g) = 36,08$ ккал/моль.

По данным Камина и Россини [189], $T_b = 491,1^\circ$ К, а согласно измерениям Амброза, Кокса и Тоунсенда [13], $T_c = 748,3^\circ$ К.

№ 447. 1-Метилнафталин, $C_{11}H_{10}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 142,190

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	38,13	90,21	90,21	0,00	27,93	52,03	-38,134
300	38,37	90,45	90,22	0,08	27,89	52,17	-38,005
400	50,74	103,23	91,87	4,55	26,48	60,54	-33,077
500	61,25	115,72	95,40	10,16	24,80	69,30	-30,289
600	69,79	127,66	99,79	16,73	23,71	78,29	-28,517
700	76,76	138,96	104,59	24,07	22,88	87,47	-27,309
800	82,48	149,59	109,56	32,04	22,26	96,73	-26,425
900	87,49	159,59	114,57	40,53	21,83	106,07	-25,757
1000	91,21	168,99	119,54	49,45	21,61	115,46	-25,232

Результаты измерений энтальпии сгорания, полученные Сперсом и Россини [1401], использовали в сочетании с коррелированными термодинамическими функциями Миллигана, Беккера и Питцера [1009]. Соединение в конденсированном состоянии изучали Мак-Каллох, Финке, Мессерли, Тодд Кинчелом и Уаддингтон [954]; по сообщению этих исследователей, $T_t = 240,78^\circ$ К, $\Delta H_f^\circ = 1,190$ ккал/моль, $T_{tr} = 242,67^\circ$ К, $\Delta H_m^\circ = 1,160$ ккал/моль и $T_b = 517,83^\circ$ К.

№ 448. 2-Метилнафталин, $C_{11}H_{10}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 142,190

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	38,19	90,83	90,83	0,00	27,75	51,66	-37,866
300	38,42	91,07	90,84	0,08	27,71	51,81	-36,738
400	50,50	103,82	92,49	4,54	25,99	60,12	-32,844
500	60,87	116,24	96,01	10,12	24,58	68,82	-30,078
600	69,31	128,40	100,38	16,64	23,44	77,76	-28,324
700	76,28	139,33	105,15	23,93	22,57	86,90	-27,131
800	82,03	149,90	110,09	31,86	21,90	96,13	-26,260
900	86,81	159,84	115,07	40,30	21,43	105,44	-25,603
1000	90,86	169,21	120,02	49,19	21,17	114,80	-25,088

Результаты измерений энтальпии сгорания, полученные Сперсом и Россини [1401], использовали в сочетании с коррелированными термодинамическими функциями Миллигана, Беккера и Питцера [1009]. Соединение в конденсированном состоянии изучали Мак-Каллох, Финке, Мессерли, Тодд, Кинчелом и Уаддингтон [954]; по сообщению этих исследователей, $T_t = 288,5^\circ$ К, $\Delta H_f^\circ = 1,341$ ккал/моль, $T_{tr} = 307,73^\circ$ К, $\Delta H_m^\circ = 2,808$ ккал/моль и $T_b = 514,20^\circ$ К.

№ 449. 1-Этилнафталин, $C_{12}H_{12}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 156,216

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	44,02	99,94	99,94	0,00	23,10	54,01	-39,585
300	44,30	100,22	99,95	0,09	23,06	54,19	-39,478
400	58,25	114,92	101,86	5,23	21,07	64,89	-35,455
500	70,06	129,23	105,91	11,67	19,50	76,04	-33,235
600	79,65	142,88	110,94	19,17	18,26	87,45	-31,854
700	87,47	155,76	116,44	27,53	17,34	99,08	-30,932
800	93,91	167,88	122,12	36,61	16,66	110,79	-30,265
900	99,24	179,25	127,84	46,28	16,21	122,59	-29,767
1000	103,79	189,95	133,52	56,43	16,00	134,43	-29,378

Учитывая, что различие в значении ΔH_f° газообразного бензола и толуола почти такое же, как и различие между нафталином и 1-метилнафталином, различие между бензолом и этилбензолом применимо для оценки энтальпии образования газообразного 1-этилнафтали-

на по энтальпии нафталина. Остальные термодинамические функции приняты согласно корреляции Миллигана, Беккера и Питцера [1009]. По данным Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248] $T_m = 259,27^\circ \text{K}$ и $T_b = 531,82^\circ \text{K}$.

№ 450. 2-Этилнафталин, $\text{C}_{12}\text{H}_{12}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 156,216

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p °	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	44,08	100,56	100,56	0,00	22,92	53,64	-39,318
300	44,35	100,84	100,57	0,09	22,88	53,83	-39,211
400	58,01	115,52	102,47	5,22	20,88	64,47	-35,221
500	69,68	129,75	106,52	11,62	19,28	75,56	-33,024
600	79,17	143,32	111,53	19,08	18,00	86,92	-31,660
700	86,99	156,13	117,00	27,40	17,03	98,51	-30,754
800	93,46	168,18	122,65	36,43	16,30	110,18	-30,099
900	98,86	179,51	128,34	46,05	15,81	121,95	-29,614
1000	103,44	190,17	134,00	56,18	15,56	133,77	-29,235

Энтальпия образования оценена тем же путем, как в случае 1-этилнафталина. Коррелированные значения термодинамических функций приняты согласно работе Миллигана, Беккера и Питцера [1009]. По данным Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248], $T_m = 265,7^\circ \text{K}$ и $T_b = 531,0^\circ \text{K}$.

№ 451. 1,2-Диметилнафталин, $\text{C}_{12}\text{H}_{12}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 156,216

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p °	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	44,18	97,23	97,23	0,00	19,97	51,68	-37,883
300	44,46	97,51	97,24	0,09	19,93	51,88	-37,790
400	58,28	112,24	99,15	5,24	17,95	62,85	-34,336
500	70,06	126,55	103,21	11,68	16,38	74,26	-32,457
600	79,64	140,20	108,25	19,18	15,14	85,94	-31,303
700	87,51	153,08	113,74	27,54	14,22	97,83	-30,544
800	93,96	165,20	119,42	36,63	13,55	109,81	-29,995
900	99,25	176,58	125,15	46,29	13,10	121,88	-29,595
1000	103,83	187,28	130,83	56,45	12,89	133,99	-29,282

Энтальпия образования оценена по методу корреляции на основании аналогии между алкильными группами, присоединенными

к нафталину, и идентичными группами, присоединенными к бензолу. Методами корреляции Миллиган, Беккер и Питцер [1009] рассчитаны значения термодинамических функций для газообразного состояния. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали точки плавления и кипения: $T_m = 272,1^\circ \text{K}$ и $T_b = 541^\circ \text{K}$.

№ 452. 1,3-Диметилнафталин, $\text{C}_{12}\text{H}_{12}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 156,216

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p °	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	44,24	97,86	97,86	0,00	19,55	51,08	-37,438
300	44,51	98,14	97,87	0,09	19,51	51,27	-37,347
400	58,04	112,84	99,78	5,23	17,52	62,18	-34,969
500	69,68	127,08	103,83	11,63	15,92	73,53	-32,139
600	79,16	140,65	108,84	19,09	14,63	85,17	-31,020
700	87,03	153,46	114,31	27,41	13,67	97,02	-30,288
800	93,51	165,52	119,97	36,45	12,95	108,96	-29,765
900	98,87	176,85	125,66	46,07	12,46	121,00	-29,381
1000	103,48	187,51	131,32	56,20	12,21	133,08	-29,084

Энтальпия образования оценена по методу корреляции на основании аналогии между алкильными группами, присоединенными к нафталину, и идентичными группами, присоединенными к бензолу. Методами корреляции Миллиган, Беккер и Питцер [1009] рассчитаны значения термодинамических функций для газообразного состояния. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали точки плавления и кипения: $T_m = 269,1^\circ \text{K}$ и $T_b = 538^\circ \text{K}$.

№ 453. 1,4-Диметилнафталин, $\text{C}_{12}\text{H}_{12}$ (состояние идеального газа). Мол. вес 156,216

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p °	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	44,18	95,86	95,86	0,00	19,72	51,84	-37,999
300	44,46	96,14	95,87	0,09	19,68	52,04	-37,907
400	58,28	110,87	97,78	5,24	17,70	63,14	-34,499
500	70,06	125,18	101,84	11,68	16,13	74,69	-32,647
600	79,64	138,83	106,88	19,18	14,89	86,52	-31,512
700	87,51	151,71	112,37	27,54	13,97	98,54	-30,765
800	93,96	163,83	118,05	36,63	13,30	110,66	-30,229
900	99,25	175,21	123,78	46,29	12,85	122,86	-29,834
1000	103,83	185,91	129,46	56,45	12,64	135,11	-29,527

Энтальпия образования оценена по методу корреляции на основании аналогии между алкильными группами, присоединенными к нафталину, и идентичными группами, присоединенными к бензолу. Методами корреляции Миллиган, Беккер и Питцер [1009] рассчитали значения термодинамических функций для газообразного состояния. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали точки плавления и кипения: $T_m = 280,81^\circ \text{K}$ и $T_b = 541,6^\circ \text{K}$.

№ 454. 1,5-Диметилнафталин, $\text{C}_{12}\text{H}_{12}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 156,216

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	44,18	95,86	95,86	0,00	19,55	51,67	-37,875
300	44,46	96,14	95,87	0,09	19,51	51,87	-37,784
400	58,28	110,87	97,78	5,24	17,53	62,97	-34,406
500	70,06	125,18	101,84	11,68	15,96	74,52	-32,573
600	79,64	138,83	106,88	19,18	14,72	86,35	-31,450
700	87,51	151,71	112,37	27,54	13,80	98,37	-30,712
800	93,96	163,83	118,05	36,63	13,13	110,49	-30,183
900	99,25	175,21	123,78	46,29	12,68	122,69	-29,792
1000	103,83	185,91	129,46	56,45	12,47	134,94	-29,490

Энтальпия образования оценена по методу корреляции на основании аналогии между алкильными группами, присоединенными к нафталину, и идентичными группами, присоединенными к бензолу. Методами корреляции Миллиган, Беккер и Питцер [1009] рассчитали значения термодинамических функций для газообразного состояния. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали точки плавления и кипения: $T_m = 355,1^\circ \text{K}$ и $T_b = 538^\circ \text{K}$.

№ 455. 1,6-Диметилнафталин, $\text{C}_{12}\text{H}_{12}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 156,216

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	44,24	97,86	97,86	0,00	19,72	51,25	-37,562
300	44,51	98,14	97,87	0,09	19,68	51,44	-37,470
400	58,04	112,84	99,78	5,23	17,69	62,35	-34,062
500	69,68	127,08	103,83	11,63	16,09	73,70	-32,213
600	79,16	140,65	108,84	19,09	14,80	85,34	-31,082
700	87,03	153,46	114,31	27,41	13,84	97,19	-30,341
800	93,51	165,52	119,97	36,45	13,12	109,13	-29,811
900	98,87	176,85	125,66	46,07	12,63	121,17	-29,422
1000	103,48	187,51	131,32	56,20	12,38	133,25	-29,121

Энтальпия образования оценена по методу корреляции на основании аналогии между алкильными группами, присоединенными к нафталину, и идентичными группами, присоединенными к бензолу. Методами корреляции Миллиган, Беккер и Питцер [1009] рассчитали значения термодинамических функций для газообразного состояния. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали точки плавления и кипения: $T_m = 257^\circ \text{K}$ и $T_b = 536^\circ \text{K}$.

№ 456. 1,7-Диметилнафталин, $\text{C}_{12}\text{H}_{12}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 156,216

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	44,24	97,86	97,86	0,00	19,55	51,08	-37,438
300	44,51	98,14	97,87	0,09	19,51	51,27	-37,347
400	58,04	112,84	99,78	5,23	17,52	62,18	-33,969
500	69,68	127,08	103,83	11,63	15,92	73,53	-32,139
600	79,16	140,65	108,84	19,09	14,63	85,17	-31,020
700	87,03	153,46	114,31	27,41	13,67	97,02	-30,288
800	93,51	165,52	119,97	36,45	12,95	108,96	-29,765
900	98,87	176,85	125,66	46,07	12,46	121,00	-29,381
1000	103,48	187,51	131,32	56,20	12,21	133,08	-29,084

Энтальпия образования оценена по методу корреляции на основании аналогии между алкильными группами, присоединенными к нафталину, и идентичными группами, присоединенными к бензолу. Методами корреляции Миллиган, Беккер и Питцер [1009] рассчитали значения термодинамических функций для газообразного состояния. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали точки плавления и кипения: $T_m = 259,3^\circ \text{K}$ и $T_b = 536^\circ \text{K}$.

№ 457. 2,3-Диметилнафталин, $\text{C}_{12}\text{H}_{12}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 156,216

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	44,41	98,22	98,22	0,00	19,97	51,39	-37,667
300	44,65	98,50	98,23	0,09	19,93	51,58	-37,574
400	57,49	113,14	100,14	5,21	17,92	62,45	-34,121
500	68,75	127,21	104,15	11,53	16,24	73,79	-32,250
600	78,18	140,61	109,12	18,89	14,86	85,42	-31,112
700	86,02	153,26	114,53	27,12	13,79	97,28	-30,371
800	92,58	165,19	120,13	36,05	12,97	109,25	-29,844
900	98,10	176,42	125,76	45,59	12,40	121,33	-29,460
1000	102,78	187,01	131,36	55,65	12,08	133,46	-29,166

Энтальпия образования оценена по методу корреляции на основании аналогии между алкильными группами, присоединенными к нафталину, и идентичными группами, присоединенными к бензолу. Методами корреляции Миллиган, Беккер и Питцер [1009] рассчитаны значения термодинамических функций для газообразного состояния. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали точки плавления и кипения: $T_m = 378,1^\circ \text{K}$ и $T_b = 542^\circ \text{K}$.

№ 458. 2,6-Диметилнафталин, $\text{C}_{12}\text{H}_{12}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 156,216

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	44,71	97,68	97,68	0,00	19,72	51,30	-37,602
300	44,91	97,96	97,69	0,09	19,68	51,49	-37,510
400	58,07	112,73	99,61	5,25	17,71	62,41	-34,099
500	69,45	126,95	103,67	11,64	16,10	73,78	-32,248
600	78,77	140,46	108,68	19,07	14,78	85,43	-31,117
700	86,49	153,19	114,14	27,34	13,77	97,31	-30,379
800	93,09	165,19	119,78	36,33	13,00	109,28	-29,852
900	98,51	176,47	125,46	45,92	12,47	121,35	-29,467
1000	103,14	187,10	131,10	56,01	12,19	133,48	-29,170

Энтальпия образования оценена по методу корреляции на основании аналогии между алкильными группами, присоединенными к нафталину, и идентичными группами, присоединенными к бензолу. Методами корреляции Миллиган, Беккер и Питцер [1009] рассчитаны значения термодинамических функций для газообразного состояния. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали точки плавления и кипения: $T_m = 385,1^\circ \text{K}$ и $T_b = 535^\circ \text{K}$.

№ 459. 2,7-Диметилнафталин, $\text{C}_{12}\text{H}_{12}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 156,216

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	44,71	97,68	97,68	0,00	19,72	51,30	-37,602
300	44,97	97,96	97,69	0,09	19,68	51,49	-37,510
400	58,07	112,73	99,61	5,25	17,72	62,41	-34,099
500	69,45	126,95	103,67	11,65	16,10	73,78	-32,247
600	78,77	140,46	108,69	19,07	14,79	85,43	-31,116
700	86,49	153,20	114,14	27,34	13,77	97,30	-30,378
800	93,09	165,19	119,78	36,33	13,00	109,28	-29,851
900	98,51	176,48	125,46	45,92	12,47	121,35	-29,466
1000	103,14	187,10	131,10	56,01	12,20	133,47	-29,169

Энтальпия образования оценена по методу корреляции на основании аналогии между алкильными группами, присоединенными к нафталину, и идентичными группами, присоединенными к бензолу. Методами корреляции Миллиган, Беккер и Питцер [1009] рассчитаны значения термодинамических функций для газообразного состояния. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали точки плавления и кипения: $T_m = 374,1^\circ \text{K}$ и $T_b = 535^\circ \text{K}$.

№ 460. 1-Пропилнафталин, $\text{C}_{13}\text{H}_{14}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 170,242

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	49,74	109,55	109,55	0,00	17,85	55,60	-40,755
300	50,04	109,86	109,56	0,10	17,80	55,83	-40,671
400	65,30	126,40	111,71	5,88	15,52	68,88	-37,631
500	78,40	142,42	116,26	13,09	13,69	82,44	-36,032
600	89,10	157,69	121,90	21,48	12,27	96,31	-35,080
700	97,80	172,10	128,06	30,84	11,21	110,42	-34,474
800	105,10	185,65	134,42	40,99	10,45	124,63	-34,046
900	111,10	195,38	140,82	51,81	9,95	138,94	-33,738
1000	116,20	210,36	177,19	63,18	9,73	153,30	-33,503

Энтальпия образования оценена по методу корреляции на основании аналогии между алкильными группами, присоединенными к нафталину, и идентичными группами, присоединенными к бензолу. Методами корреляции Миллиган, Беккер и Питцер [1009] рассчитаны значения термодинамических функций для газообразного состояния. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел отобрали точки плавления и кипения: $T_m = 264,68^\circ \text{K}$ и $T_b = 545,93^\circ \text{K}$.

№ 461. 2-Пропилнафталин, $\text{C}_{13}\text{H}_{14}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 170,242

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	49,80	110,18	110,18	0,00	17,65	55,21	-40,471
300	50,04	110,49	110,19	0,10	17,60	55,44	-40,388
400	65,10	127,00	112,34	5,87	15,31	68,43	-37,385
500	78,00	142,96	116,88	13,05	13,45	81,93	-35,809
600	88,60	158,14	122,50	21,39	11,98	95,75	-34,877
700	97,40	172,48	128,63	30,70	10,88	109,82	-34,287
800	104,60	185,97	134,96	40,81	10,07	124,00	-33,873
900	110,70	198,65	141,34	51,59	9,53	138,28	-33,577
1000	115,80	210,59	147,67	62,92	9,27	152,61	-33,352

Энтальпия образования оценена по методу корреляции на основании аналогии между алкильными группами, присоединенными к нафталину, и идентичными группами, присоединенными к бензолу. Методами корреляции Миллиган, Беккер и Питцер [1009] рассчитали значения термодинамических функций для газообразного состояния. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали точки плавления и кипения: $T_m = 270^\circ \text{K}$ и $T_b = 546,6^\circ \text{K}$.

№ 462. 2-Этил-3-метилнафталин, $\text{C}_{13}\text{H}_{14}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 170,242

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	50,30	109,33	109,33	0,00	15,72	53,54	-39,242
300	50,57	109,65	109,34	0,10	15,67	53,77	-39,168
400	65,00	126,22	111,50	5,89	13,40	66,83	-36,514
500	77,50	142,10	116,04	13,03	11,51	80,42	-35,148
600	88,00	157,19	121,65	21,32	9,99	94,33	-34,359
700	96,80	171,43	127,76	30,58	8,83	108,50	-33,874
800	104,00	184,84	134,06	40,63	7,95	122,79	-33,542
900	110,10	197,45	140,41	51,34	7,35	137,18	-33,311
1000	115,30	209,33	146,72	62,62	7,04	151,64	-33,140

Энтальпия образования оценена по методу корреляции на основании аналогии между алкильными группами, присоединенными к нафталину, и идентичными группами, присоединенными к бензолу. Методами корреляции рассчитаны термодинамические функции для газообразного состояния (Миллиган, Беккер и Питцер [1009]). Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали точку кипения $T_b = 550^\circ \text{K}$ [1248].

№ 463. 2-Этил-6-метилнафталин, $\text{C}_{13}\text{H}_{14}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 170,242

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	50,60	108,79	108,79	0,00	14,65	52,63	-38,576
300	50,90	109,11	108,80	0,10	14,60	52,86	-38,506
400	65,60	125,82	110,97	5,94	12,37	65,97	-36,043
500	78,20	141,85	115,56	13,15	10,55	79,59	-34,786
600	88,70	157,06	121,22	21,51	9,10	93,52	-34,064
700	97,30	171,44	127,38	30,85	8,03	107,70	-33,623
800	101,40	184,64	133,72	40,74	7,00	121,99	-33,324
900	110,60	197,16	140,08	51,37	6,32	136,42	-33,124
1000	115,70	209,11	146,39	62,72	6,08	150,90	-32,977

Энтальпия образования оценена по методу корреляции на основании аналогии между алкильными группами, присоединенными к нафталину, и идентичными группами, присоединенными к бензолу. Методами корреляции Миллиган, Беккер и Питцер [1009] рассчитали значения термодинамических функций для газообразного состояния. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали точки плавления и кипения: $T_m = 318^\circ \text{K}$ и $T_b = 543^\circ \text{K}$.

№ 464. 2-Этил-7-метилнафталин, $\text{C}_{13}\text{H}_{14}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 170,242

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	50,60	108,79	108,79	0,00	14,65	52,63	-38,576
300	50,90	109,11	108,80	0,10	14,60	52,86	-38,506
400	65,60	125,82	110,97	5,94	12,37	65,97	-36,043
500	78,20	141,85	115,56	13,15	10,55	79,59	-34,786
600	88,70	157,06	121,22	21,51	9,10	93,52	-34,064
700	97,30	171,44	127,38	30,85	8,03	107,70	-33,623
800	101,40	184,64	133,72	40,74	7,00	121,99	-33,324
900	110,60	197,16	140,08	51,37	6,32	136,42	-33,124
1000	115,70	209,11	146,39	62,72	6,08	150,90	-32,977

Энтальпия образования оценена по методу корреляции на основании аналогии между алкильными группами, присоединенными к нафталину, и идентичными группами, присоединенными к бензолу. Методами корреляции Миллиган, Беккер и Питцер [1009] рассчитали значения термодинамических функций для газообразного состояния. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали точку кипения $T_b = 543^\circ \text{K}$.

№ 465. 1-Бутилнафталин, $\text{C}_{14}\text{H}_{16}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 184,268

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,18	118,83	118,83	0,00	12,68	57,38	-42,056
300	55,51	119,18	118,84	0,11	12,62	57,65	-41,995
400	72,20	137,49	121,22	6,51	10,02	73,08	-39,926
500	86,60	155,19	126,26	14,47	7,93	89,09	-38,940
600	98,40	172,06	132,50	23,74	6,31	105,47	-38,415
700	108,10	187,98	139,30	34,08	5,11	122,11	-38,123
800	116,10	202,95	146,33	45,30	4,24	138,87	-37,935
900	122,80	217,02	153,41	57,25	3,69	155,74	-37,817
1000	128,50	230,26	160,44	69,83	3,44	172,67	-37,734

Энтальпия образования оценена по методу корреляции на основании аналогии между алкильными группами, присоединенными к нафталину, и идентичными группами, присоединенными к бензолу. Методами корреляции Миллиган, Беккер и Питцер [1009] рассчитали значения термодинамических функций для газообразного состояния. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали точки $T_m = 253,39^\circ \text{K}$ и $T_b = 562,49^\circ \text{K}$.

№ 466. 2-Бутилнафталин, $\text{C}_{14}\text{H}_{18}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 184,268

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,24	119,46	119,46	0,00	12,50	57,01	-41,786
300	55,56	119,81	119,47	0,11	12,44	57,28	-41,726
400	72,00	138,10	121,85	6,50	9,83	72,65	-39,690
500	86,20	155,73	126,87	14,43	7,72	88,60	-38,729
600	97,90	172,51	133,10	23,66	6,04	104,93	-38,216
700	107,70	188,36	139,87	33,95	4,80	121,53	-37,942
800	115,70	203,28	146,87	45,13	3,89	138,25	-37,767
900	122,40	217,31	153,93	57,04	3,30	155,09	-37,660
1000	128,10	230,51	160,93	69,58	3,02	171,99	-37,587

Энтальпия образования оценена по методу корреляции на основании аналогии между алкильными группами, присоединенными к нафталину, и идентичными группами, присоединенными к бензолу. Методами корреляции Миллиган, Беккер и Питцер [1009] рассчитали значения термодинамических функций для состояния идеального газа. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали точки плавления и кипения: $T_m = 268^\circ \text{K}$ и $T_b = 565^\circ \text{K}$.

№ 467. 1-Амилнафталин, $\text{C}_{15}\text{H}_{18}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 198,294

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	60,65	128,26	128,26	0,00	7,75	59,35	-43,500
300	61,01	128,64	128,27	0,12	7,69	59,66	-43,461
400	79,20	148,74	130,88	7,15	4,77	77,46	-42,318
500	94,90	168,16	136,41	15,88	2,43	95,91	-41,920
600	107,80	186,63	143,26	26,03	0,62	114,77	-41,801
700	118,40	204,07	150,71	37,36	-0,72	133,92	-41,810
800	127,20	220,47	158,42	49,65	-1,68	153,20	-41,851
900	134,60	235,89	166,18	62,75	-2,29	172,61	-41,917
1000	140,90	250,41	173,88	76,53	-2,55	192,08	-41,976

Энтальпия образования оценена по методу корреляции на основании аналогии между алкильными группами, присоединенными к нафталину, и идентичными группами, присоединенными к бензолу. Методами корреляции Миллиган, Беккер и Питцер [1009] рассчитали значения термодинамических функций для газообразного состояния. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали точки плавления и кипения: $T_m = 251^\circ \text{K}$ и $T_b = 580^\circ \text{K}$.

№ 468. 2-Амилнафталин, $\text{C}_{15}\text{H}_{18}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 198,294

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	60,71	128,89	128,89	0,00	7,57	58,98	-43,230
300	61,06	129,27	128,90	0,12	7,51	59,29	-43,192
400	79,00	149,35	131,51	7,14	4,58	77,02	-42,082
500	94,50	168,70	137,03	15,84	2,21	95,42	-41,706
600	107,30	187,09	143,85	25,95	0,35	114,23	-41,605
700	117,90	204,45	151,28	37,22	-1,04	133,34	-41,628
800	126,80	220,79	158,96	49,47	-2,04	152,59	-41,683
900	134,20	236,16	166,69	62,53	-2,69	171,97	-41,757
1000	140,50	250,64	174,37	76,27	-2,99	191,41	-41,830

Энтальпия образования оценена по методу корреляции на основании аналогии между алкильными группами, присоединенными к нафталину, и идентичными группами, присоединенными к бензолу. Методами корреляции Миллиган, Беккер и Питцер [1009] рассчитали значения термодинамических функций для газообразного состояния. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали точки плавления и кипения: $T_m = 269^\circ \text{K}$ и $T_b = 583^\circ \text{K}$.

Углеводороды других классов. Таблицы для состояния идеального газа

№ 469. Спиропентан, C_5H_8 (состояние идеального газа). Мол. вес 68,114

Термические и спектроскопические свойства спиропентана при низких температурах тщательно изучены Скоттом, Финке, Хаббардом, Мак-Каллохом, Гроссом, Уильямсоном, Уаддингтоном и Хаффманом [1303]. По данным этих исследователей, $T_{tr} = 166,13^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 4,538$ ккал/моль и $T_b = 312,12^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 6,393$ ккал/моль; энтропии при 298°K , определенные на основании третьего закона термодинамики, равные $46,29$ кал/(моль·°K) для жидкости и $67,45$ кал/(моль·°K) для состояния идеального газа,

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o)/T}	H ^o -H _{298^o}	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	21,06	67,45	67,45	0,00	44,27	63,41	-46,479
300	21,19	67,59	67,46	0,04	44,24	63,53	-46,277
400	28,55	74,71	68,38	2,54	42,72	70,20	-38,354
500	34,91	81,79	70,35	5,72	41,52	77,21	-33,749
600	40,10	88,63	72,83	9,48	40,59	84,44	-30,755
700	44,36	95,14	75,56	13,71	39,89	91,81	-28,663
800	47,91	101,30	78,40	18,33	39,39	99,26	-27,114
900	50,93	107,12	81,27	23,27	39,05	106,77	-25,925
1000	53,51	112,62	84,13	28,50	38,88	114,31	-24,981

находятся в прекрасном соответствии со спектроскопическими отнесениями, произведенными этими авторами. Фрейзер и Прозен [442] на основании результатов измерений энтальпии сгорания сиропентана установили, что $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = 37,67$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 44,27$ ккал/моль.

№ 470. 1,3,5-Циклогептатриен, C₇H₈ (состояние идеального газа).
Мол. вес 92,134

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o)/T}	H ^o -H _{298^o}	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	28,15	75,44	75,44	0,00	43,47	61,04	-44,741
300	28,33	75,62	75,45	0,06	43,44	61,15	-44,543
400	37,13	85,01	76,67	3,34	42,22	67,25	-36,740
500	44,32	94,10	79,25	7,43	41,29	73,62	-32,176
600	50,07	102,70	82,45	12,16	40,57	80,14	-29,191
700	54,73	110,78	85,93	17,40	40,05	86,79	-27,097
800	58,58	118,35	89,51	23,07	39,67	93,49	-25,539
900	61,82	125,44	93,11	29,10	39,44	100,23	-24,339
1000	64,58	132,10	96,68	35,42	39,36	107,00	-23,384

Свойства этого соединения при низких температурах изучены Финке, Скоттом, Гроссом, Мессерли и Уаддингтоном [424]; эти исследователи установили переход в твердом состоянии при $Tt = 153,96^{\circ}$ K, $\Delta Ht^{\circ} = 0,561$ ккал/моль, $Ttp = 197,90^{\circ}$ K, $\Delta Hm^{\circ} = 0,277$ ккал/моль. $Tb = 388,64^{\circ}$ K, при этом $\Delta Hv = 9,250$ ккал/моль. На основании этих измерений по третьему закону термодинамики рассчитано значение энтропии для идеального газа $S_{298}^{\circ} = 75,44$ кал/(моль · °K). Коэн, Кистяковский и Смит [261] измерили энтальпию каталитического гидрирования циклогептатриена до цик-

логептана при 355° K. Из полученных данных Финке и др. [424] рассчитали значения $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 43,47$ ккал/моль для циклогептатриена. Эванс и Лорд [397] изучали спектр и произвели отнесение основных частот колебаний; по их расчетам энтропия для состояния идеального газа $S_{298}^{\circ} = 76,0$ кал/(моль · °K).

№ 471. Этилбензол (фенилацетилен), C₈H₈ (состояние идеального газа).
Мол. вес 102,128

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o)/T}	H ^o -H _{298^o}	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	27,46	76,88	76,88	0,00	78,22	86,46	-63,375
300	27,63	77,06	76,89	0,06	78,20	86,51	-63,019
400	35,95	86,18	78,07	3,25	77,33	89,42	-48,856
500	42,67	94,95	80,58	7,19	76,64	92,53	-40,442
600	48,01	103,22	83,67	11,73	76,05	95,75	-34,877
700	52,29	110,95	87,02	16,76	75,59	99,09	-30,934
800	55,79	118,17	90,47	22,16	75,20	102,46	-27,990
900	58,71	124,91	93,93	27,89	74,89	105,89	-25,712
1000	61,17	131,23	97,34	33,89	74,70	109,35	-23,897

Флиткрофт и Скиннер [432] измеряли энтальпию гидрирования этилбензола до этилбензола; на основании полученных этими исследователями данных мы рассчитали $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = 67,72$ ккал/моль $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 78,22$ ккал/моль. Эванс и Найквист [395] произвели полное отнесение частот колебаний и рассчитали термодинамические функции. Смит и Эндрус [1388] изучали низкотемпературные свойства, начиная от температуры жидкого воздуха и выше; по их сообщениям, $Tm = 228,3^{\circ}$ K и $Tb = 416^{\circ}$ K для образца, чистота которого составляла 99%.

№ 472. 1,3,5,7-Циклооктатетраен, C₈H₈ (состояние идеального газа).
Мол. вес 104,144

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o)/T}	H ^o -H _{298^o}	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	29,16	78,10	78,10	0,00	71,23	88,41	-64,805
300	29,32	78,29	78,11	0,06	71,20	88,52	-64,481
400	38,45	88,00	79,37	3,46	69,85	94,51	-51,634
500	46,38	97,46	82,05	7,71	68,76	100,80	-44,059
600	52,77	106,50	85,38	12,68	67,90	107,29	-39,077
700	57,90	115,03	89,01	18,22	67,25	113,91	-35,564
800	62,23	123,05	92,77	24,23	66,76	120,61	-32,946
900	65,75	130,59	96,56	30,64	66,42	127,36	-30,926
1000	68,88	137,68	100,32	37,37	66,24	134,15	-29,317

Прозеп, Джонсон и Россини [1197] производили сжигание высокочистых образцов этого вещества. На основании полученных результатов измерений мы рассчитали $\Delta H_f^{\circ}_{298}(l) = 60,93$ ккал/моль и $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = 71,23$ ккал/моль. Скотт, Гросс, Оливер и Хаффман [1312] измеряли низкотемпературные свойства того же образца, что и в работе [1197], начиная от температуры жидкого водорода и выше. Эти исследователи нашли, что $T_{tp} = 268,47^{\circ}\text{K}$, $\Delta H_m^{\circ} = 2,695$ ккал/моль и $T_b = 413,7^{\circ}\text{K}$, при этом $\Delta H_v = 8,700$ ккал/моль, $S^{\circ}_{298}(l) = 52,65$ кал/(моль $\cdot^{\circ}\text{K}$), $S^{\circ}_{298}(g) = 78,10$ кал/(моль $\cdot^{\circ}\text{K}$) и $\Delta H_{v298} = 10,300$ ккал/моль. Липшинок и Лорд [877] произвели полное спектральное отнесение и рассчитали термодинамические функции.

№ 473. Азулен, C_{10}H_8 (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,164

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H^{\circ}_{298})/T$	$H^{\circ}-H^{\circ}_{298}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	30,69	80,75	80,75	0,00	66,90	84,10	-61,647
300	30,93	80,95	80,76	0,06	66,86	84,21	-61,343
400	42,15	91,42	82,11	3,73	65,29	90,24	-49,305
500	51,69	101,89	85,02	8,44	64,02	96,64	-42,238
600	59,32	112,01	88,68	14,00	63,00	103,25	-37,606
700	65,56	121,63	92,71	20,25	62,22	110,03	-34,352
800	70,59	130,73	96,90	27,07	61,61	116,90	-31,933
900	74,75	139,29	101,14	34,34	61,16	123,84	-30,070
1000	78,24	147,35	105,36	42,00	60,89	130,82	-28,590

Ковац, Гюнтард и Платтнер [802, 803] провели исчерпывающее термодинамическое изучение азулена (циклопентациклогептен, изомерный нафталину) и по данным измерения ΔH_c° определили $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = 66,90$ ккал/моль. На основании собственных отнесений частот они рассчитали термодинамические функции и нашли, что $S^{\circ}_{298}(g) = 80,75$ кал/(моль $\cdot^{\circ}\text{K}$). Эти авторы приводят также следующие значения: $T_m = 373,64^{\circ}\text{K}$, $\Delta H_m^{\circ} = 2,89$ ккал/моль и $T_b = 523^{\circ}\text{K}$ (расчет), при этом $\Delta H_v = 13,26$ ккал/моль. Они указывают энтальпии переходов, приводимые Хейльброннером и Уилландом [581].

№ 474. Декагидронафталин, *цис*, $\text{C}_{10}\text{H}_{18}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 138,244

Паркс и Хаттон [1102], а также Мак-Каллох, Финке, Мессерли, Тодд, Кипчелое и Уаддингтон [954] измеряли низкотемпературные свойства этого соединения. Данные, сообщенные Парксом и Хаттоном, были получены при изучении переохлажденного вещества

T, °K	кал/(моль K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H^{\circ}_{298})/T$	$H^{\circ}-H^{\circ}_{298}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	39,84	90,28	90,28	0,00	-40,38	20,51	-15,034
300	40,14	90,53	90,29	0,08	-40,46	20,88	-15,213
400	56,64	104,38	92,06	4,93	-44,33	41,95	-22,918
500	71,64	118,67	95,95	11,37	-47,36	63,88	-27,922
600	84,14	132,87	100,93	19,17	-49,64	86,35	-31,450
700	94,71	146,66	106,48	28,13	-51,23	109,16	-34,079
800	103,36	159,88	112,33	38,04	-52,27	132,13	-36,094
900	110,65	172,49	118,32	48,75	-52,83	155,23	-37,692
1000	116,91	184,48	124,34	60,14	-52,95	178,37	-38,980

и поэтому заменены данными второй группы исследователей [954], которые установили необычно сложное поведение этого соединения. Медленный переход в твердом состоянии наблюдался при $216,1^{\circ}\text{K}$, причем $\Delta H_t^{\circ} = 0,511$ ккал/моль. По данным этих исследователей, $T_{tp} = 230,17^{\circ}\text{K}$, $\Delta H_m^{\circ} = 2,268$ ккал/моль и $S^{\circ}_{298}(l) = 63,34$ кал/(моль $\cdot^{\circ}\text{K}$). Кеймин и Россини [189] измеряли давление паров и установили, что $T_b = 468,91^{\circ}\text{K}$, откуда Сейер и Манн [1339] рассчитали $\Delta H_v = 9,940$ ккал/моль. Миядзава и Питцер [1016] руководствовались калориметрическими данными при расчетах термодинамических функций для состояния идеального газа с помощью спектроскопических методов.

Сперос и Россини [1401] определяли энтальпию сгорания и получили значение $\Delta H_f^{\circ}_{298}(l) = -52,45$ ккал/моль и $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -40,38$ ккал/моль. Фрай [450] измерял константы равновесия процесса гидрирования нафталина до *транс*-декалина и установил блестящее соответствие со значениями, рассчитанными из термодинамических данных. Соотношение между *транс*- и *цис*-изомерами декалина оказалось немного ниже, чем соотношение, рассчитанное из термодинамических констант.

№ 475. Декагидронафталин, *транс*, $\text{C}_{10}\text{H}_{18}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 138,244

Паркс и Хаттон [1102], а также Мак-Каллох, Финке, Мессерли, Тодд, Кипчелое и Уаддингтон [954] измерили низкотемпературные свойства этого соединения. Хотя результаты, полученные двумя этими группами исследователей, по существу согласуются, здесь цитируются данные последней группы исследователей [954]: $T_{tp} = 242,76^{\circ}\text{K}$, $\Delta H_m^{\circ} = 3,455$ ккал/моль и $S^{\circ}_{298}(l) = 63,32$ кал/(моль $\cdot^{\circ}\text{K}$).

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	40,04	89,52	89,52	0,00	-43,57	17,55	-12,862
300	40,36	89,77	89,53	0,08	-43,65	17,92	-13,05
400	56,78	103,68	91,31	4,95	-47,49	39,06	-21,34
500	71,14	117,92	95,21	11,36	-50,56	61,06	-26,69
600	84,20	132,08	100,18	19,15	-52,85	83,61	-30,472
700	94,77	145,88	105,73	28,41	-54,43	106,49	-33,247
800	103,40	159,11	111,58	38,03	-55,47	129,54	-35,368
900	110,67	171,72	117,57	48,74	-56,03	152,72	-37,085
1000	116,93	183,71	123,59	60,13	-56,15	175,94	-38,145

Кеймин и Россини [189] приводят значение $Tb = 460,41^\circ \text{K}$, откуда Сейер и Манн [1339] рассчитали среднее значение $\Delta Hv = 9,260$ ккал/моль. Миядзава и Питцер [1016] руководствовались калориметрическими данными при расчетах термодинамических функций для состояния идеального газа с помощью спектроскопических методов.

Сперос и Россини [1401] определяли энтальпию сгорания и получили значение $\Delta Hf_{298}^\circ(l) = -55,14$ ккал/моль и $\Delta Hf_{298}^\circ(g) = -43,57$ ккал/моль. Фрай [450] измерял константы равновесия процесса гидрирования нафталина до транс-декалина и установил блестящее соответствие со значениями, рассчитанными из термодинамических данных.

№ 476. Дифенил, C₁₂H₁₀ (состояние идеального газа).

Мол. вес 154,200

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	38,80	93,85	93,85	0,00	43,52	66,94	-49,063
300	39,05	94,10	93,86	0,08	43,48	67,08	-48,861
400	52,83	107,27	95,56	4,69	41,66	75,24	-41,107
500	64,38	120,34	99,21	10,57	40,23	83,81	-36,631
600	73,54	132,92	103,79	17,48	39,10	92,62	-33,736
700	80,93	144,83	108,81	25,22	38,25	101,63	-31,728
800	86,92	156,04	114,02	33,62	37,60	110,71	-30,244
900	91,86	166,57	119,28	42,56	37,14	119,88	-29,110
1000	96,00	176,47	124,51	51,96	36,89	129,10	-28,214

Колеман и Пилчер [246] на основании тщательного определения энтальпии сгорания получили значения $\Delta Hf_{298}^\circ(s) = 24,02$ ккал/моль. Они дают обзор предшествующих работ по изучению этого соединения. На основании доступных данных по давлению пара над твердым веществом они отобрали наиболее точные значения Брэдли и Крисби [158] и рассчитали $\Delta Hf_{298}^\circ(g) = 43,52$ ккал/моль.

Хаффман, Паркс и Даниелс [656] измеряли теплоемкость в условиях низких температур от 90 до 300° K и рассчитали $S_{298}^\circ(s) = 49,2$ ккал/(моль·°K). На основании данных о давлении пара, полученных Брэдли и Крисби [158], $S_{298}^\circ(g) = 92,2$ ккал/(моль·°K). Кейтон и Липпинкот [725] произвели отнесение частот колебаний и, приняв допущение о свободном вращении, рассчитали $S_{298}^\circ(g) = 93,9$ ккал/(моль·°K), что согласуется в пределах экспериментальных ошибок с указанным выше значением. Приемы термодинамические функции, рассчитанные Кейтоном и Липпинкотом [725]. Эти исследователи дают обзор предшествующих работ по спектроскопическим расчетам.

Сталл [1432] отобрал значения $Tm = 342,7^\circ \text{K}$ и $Tb = 528,1^\circ \text{K}$. По данным измерений Спагта, Томаса и Паркса [1400], $\Delta Hm^\circ = 4,44$ ккал/моль. Теплоемкости жидкости в температурном интервале 350—600° K определены Уолкером, Бруксом, Эвингом и Миллером [1567]; по их данным, $Cp = 33,46 + 0,094T$ [кал/(моль·°K)]. Уолкер и др. приводят ссылки на предшествующие работы по определению теплоемкостей и энтальпий для жидкого состояния. Путем сочетания отобранных значений для ΔHs_{298} , ΔHm и теплоемкостей получена величина $\Delta Hv = 10,9$ ккал/моль для температуры кипения при нормальном давлении.

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА СОЕДИНЕНИЙ УГЛЕРОДА, ВОДОРОДА И КИСЛОРОДА

Введение

В различных сочетаниях атомы двух видов — углерода и водорода — образуют множество углеводородов. Число соединений в огромной мере возрастает при включении в состав молекул атомов третьего вида — кислорода. В термодинамическом отношении такие соединения, содержащие ковалентные связи кислород — углерод и кислород — водород, характеризуются той же последовательностью и закономерностью изменения свойств, что и углеводороды. При этом наблюдаются отдельные отклонения в случае полярных соединений, таких, как спирты, альдегиды и кислоты, в которых концевые водородные атомы проявляют тенденцию к образованию «водородных связей» с электроотрицательными атомами других молекул.

Термодинамические свойства углеводородов и продуктов их окисления представляют особый интерес ввиду того, что ценность углеводородов как горючего зависит от разности между величиной их внутренней энергии и соответствующими величинами продуктов сгорания. Однако ввиду того, что при сгорании не все реакции протекают до конца, т. е. до образования двуокиси углерода и воды, возникает также необходимость знать термодинамические свойства многих устойчивых и неустойчивых промежуточных соединений углерода, водорода и кислорода, образующихся при горении. Животные также получают необходимые им тепло и энергию за счет процесса окисления, сопровождающегося попутным образованием многочисленных нестойких и устойчивых промежуточных продуктов. Растения завершают вторую часть этого цикла. Используя солнечный свет в качестве первичного источника энергии для процесса фотосинтеза, растения жадно поглощают двуокись углерода из атмосферы, связывая ее с водой и синтезируют соединения, менее деградированные в энергетическом отношении. После того как этот процесс образования менее деградированных соединений пройдет целый ряд стадий, определенное промежуточное соединение (например, сахар) может являться вполне подходящим горючим для осуществляемого в организмах животных цикла деградации. Таким образом, процессы, ведущие к рассеиванию энергии или к накоплению ее, постоянно протекают с образованием многочисленных общих промежуточных соединений, содержащих углерод, водород и кислород. Эти соединения играют важную роль, поскольку они охватывают всю

живую материю и синтезируются человеком для удовлетворения его нужд. Термохимия этих соединений не изучена столь всесторонне, как термохимия углеводородов, и в этом отношении открываются широкие возможности для экспериментальных и теоретических исследований. Энергия связи С — С меньше, чем энергия связи С — Н, а следовательно, самым легким путем включения атома кислорода в молекулу углеводорода является образование соединения эфирного типа. Это сопряжено с минимальной деградацией молекулы углеводорода, о чем будет сказано ниже.

Простые эфиры

Энергия связи С — С меньше энергии связи С — Н, поэтому наиболее вероятным путем присоединения атома кислорода к молекуле углеводорода является включение его в данную молекулу между двумя углеродными атомами, в результате чего образуется простой эфир. Образование эфира можно также условно представить себе как замещение одной из групп — CH_2 — в молекуле углеводорода атомом кислорода; именно это представление и используется в данной главе.

Доступные термохимические данные, относящиеся к эффекту замещения атомом кислорода одной группой — CH_2 — в молекуле исходного углеводорода, приведены в табл. X.1 и X.2. Бросаются в глаза большие различия в значениях энтальпии образования ΔH_{298}° . Эти различия обусловлены степенью разветвленности и длиной цепи соответствующих алкильных групп. В приведенных примерах значение $\Delta H_{298}^\circ(g)$ для эфира более отрицательно, нежели значение для соответствующего исходного углеводорода, в среднем на $25,5 \pm 7,0$ ккал/моль, тогда как $S_{298}^*(g)$ для эфира меньше, чем для исходных углеводородов на $1,26 \pm 0,5$ ккал/(моль·°К). В более сложных методах расчета, подобных методу, описанному в гл. VI, учитывается влияние как разветвления, так и длины цепи.

Средние значения инкрементов ΔC_p приведены в табл. X.8.

Спирты

Присоединение атома кислорода к молекуле углеводорода по связи С — Н может привести к образованию связей С — О — Н, характерных для спиртов. Свойства нормальных спиртов служат примером того, как на основании ограниченного объема данных можно с помощью правдоподобной модели получить более широкую информацию, позволяющую предсказывать свойства соединений, не прибегая к необходимым измерениям. Величины ΔH_{298}° определялись на основании результатов измерений соответствующих свойств веществ в жидком состоянии, однако значения $\Delta H_{298}^\circ(g)$ более строгие, поэтому они и были выбраны для табулирования.

Таблица X.1

Энтальпия образования простых эфиров в состоянии идеального газа при 298,15° K

Эфир	Измеренное значение ΔH_{298}° (г), ккал/моль			Литература ^{a)}
	эфир	исходный углеводород	$\Delta [\Delta H_{298}^\circ]$, ккал/моль	
Диметиловый	-43,90	-24,82	-19,17	[1145]
Этилметиловый	-51,73	-30,15	-21,58	[1145]
Диэтиловый	-60,28	-35,00	-25,28	[1146]
Метилпропиловый	-56,82	-35,00	-21,82	[1145]
Дипропиловый	-70,00	-44,89	-25,11	[252]
Дибутыловый	-79,80	-54,75	-25,05	См. текст
Метилизопропиловый	-60,24	-36,92	-23,32	[1145]
Метил-трет-бутиловый	-70,00	-44,35	-25,65	[1390]
Диизопропиловый	-76,20	-48,28	-27,92	См. текст
Изопропил-трет-бутиловый	-85,60	-53,57	-32,03	[1390]
Ди-втор-бутиловый	-86,20	-56,79	-29,41	[252]
Ди-трет-бутиловый	-87,20	-57,83	-29,37	[1390]
Среднее значение:			-25,5	

^{a)} Источники, содержащие данные о ΔH_f° простых эфиров.

Таблица X.2

Энтропия образования простых эфиров в состоянии идеального газа при 298,15° K

Эфир	Измеренное значение S_{298}° (г), кал/(моль·°K)		ΔS_{298}° ^{a)}
	эфир	исходный углеводород	
Диметиловый	63,75	64,51	-0,76
Диэтиловый	81,90	83,40	-1,50
Диизопропиловый	93,27	94,80	-1,53
Среднее значение:			-1,26

^{a)} S_{298}^* — энтропия без учета симметрии, равная $S_{298}^\circ + R \ln \sigma_i$.

Необходимые значения энтальпии испарения при 298,15° K, рассчитанные по разности между $\Delta H_f(g)$ и $\Delta H_f(l)$, приведены в табл. X.3.

Таблица X.3

Энтальпия испарения нормальных спиртов при 298,15° K

Спирт	ΔH_{298}° , ккал/моль	Литература
CH ₃ OH	8,96	[1249]
C ₂ H ₅ OH	10,08	[1553]
C ₃ H ₇ OH	11,24	[1553]
C ₄ H ₉ OH	12,28	[1553]
C ₅ H ₁₁ OH	13,28	[1553]

Они хорошо согласуются с результатами недавних измерений, выполненных Мак-Карди и Лейдлером [966]. В случае спиртов, стоящих в ряду после пропилового, добавление группы —CH₂ — повышает энтальпию испарения приблизительно на 1,00 ккал/моль, следовательно, для нормальных спиртов, имеющих более трех атомов углерода ($n > 3$).

$$\Delta H_{298}^\circ = 8,28 + 1,00n \text{ (ккал/моль)}, \quad (X.4)$$

где n — число атомов углерода в молекуле нормального спирта.

Обзор, содержащий сравнение энтальпий образования нормальных спиртов, опубликован Грином [530]. Позже появились сообщения о результатах измерений, выполненных Скиннером и Снелсоном [1365] и Чао [214].

Спирты очень трудно очистить от воды, а если она присутствует, то величины ΔH_c получаются заниженными и ΔH_{298}° приобретают слишком отрицательное значение. В данной книге приняты за основу значения ΔH_f° , опубликованные Чао [214], поскольку они более положительны, нежели значения, приводимые в других источниках (исключение составляет метанол). В табл. X.4 приведены значения энтальпии образования в газообразном состоянии для каждого из указанных нормальных спиртов и их исходных углеводородов, разность между этими двумя значениями, а также значения для спиртов, рассчитанные путем использования средней величины $\Delta [\Delta H_{298}^\circ]$ и энтальпии образования исходных углеводородов.

В табл. X.5 приведены измеренные значения энтропии для спиртов в газообразном состоянии, величины инкрементов энтропии без учета эффекта симметрии, энтропии исходных углеводородов в газообразном состоянии и энтропии спиртов в газообразном состоянии,

Таблица X.4

Энтальпия образования нормальных спиртов
в состоянии идеального газа при 298,15° К

Спирт	Измеренное значение ΔH_{298}° (г), ккал/моль			ΔH_{298}° (г), ккал/моль (рассчитано для спирта)	Литература ^{a)}
	спирт	исходный углеводород	$\Delta [\Delta H_{298}^{\circ}]$, ккал/моль		
CH ₃ OH	-48,08	-20,24	-27,84 ^{b)}	-51,63	[530]
C ₂ H ₅ OH	-56,12	-24,82	-31,30	-56,21	[214]
C ₃ H ₇ OH	-61,55	-30,15	-31,40	-61,54	[214]
C ₄ H ₉ OH	-65,59	-35,00	-30,59	-66,39	[214]
C ₅ H ₁₁ OH	-72,27	-39,96	-32,31	-71,35	[214]
C ₆ H ₁₃ OH	-76,39	-44,89	-31,50	-76,28	[214]
C ₇ H ₁₅ OH	-80,03	-49,82	-30,21	-81,21	[214]
C ₈ H ₁₇ OH	-85,34	-54,74	-30,60	-86,13	[214]
C ₉ H ₁₉ OH	-92,47	-59,67	-32,80	-91,06	[214]
C ₁₀ H ₂₁ OH	-96,38	-64,60	-31,78	-95,99	[214]
Среднее значение:			-31,39		

a) Источники, содержащие данные о ΔH_{298}° спиртов

b) Не учитывается при расчете среднего значения

Таблица X.5

Энтропия образования нормальных спиртов
в состоянии идеального газа при 298,15° К

Спирт	Измеренное значение S_{298}° (г), кал/(моль °К)		ΔS_{298}° (г), кал/(моль °К)	S_{298}° (г), кал/(моль °К) (рассчитано для спирта)	Литература ^{a)}
	спирт	исходный углеводород			
CH ₃ OH	57,29	54,85	-1,42 ^{b)}	57,82	[532]
C ₂ H ₅ OH	67,54	64,51	-0,53	67,48	[536]
C ₃ H ₇ OH	77,63	74,12	-0,05	77,09	[939]
C ₄ H ₉ OH	87,30	83,40	-0,66	86,37	[532]
C ₅ H ₁₁ OH	95,80	92,83	-0,59	95,80	[532]
C ₆ H ₁₃ OH	105,10	102,27	-0,72	105,24	[532]
C ₇ H ₁₅ OH	116,10	111,55	-0,99	114,52	[532]
Среднее значение:			-0,59		

a) Источники, содержащие данные о S° спиртов.

b) Не учитывается при расчете среднего значения.

рассчитанные по исходным углеводородам с использованием инкремента без учета эффекта симметрии. Эти инкременты и средние значения инкрементов ΔC_p приведены в табл. X.8, они использованы в этой книге вместе с соответствующими значениями для исходных углеводородов при расчетах термодинамических функций спиртов от тридеканового до эйкозанового.

Альдегиды

Присоединение одного атома кислорода к любому нециклическому углеводороду может привести к образованию по меньшей мере одного, а иногда и нескольких (изомерных) альдегидов. К сожалению, по альдегидам имеется меньше информации, поэтому предсказываемые свойства менее надежны. Чермин [221] сделал обзор всей литературы по альдегидам и, воспользовавшись методом инкремента — CH₂ —, рассчитал термодинамические свойства для ряда нормальных альдегидов, начиная от формальдегида и вплоть до деканала. Позже публиковались дополнительные экспериментальные данные которые сведены в табл. X.6 и X.7. Эта информация использована для расчета приведенных в табл. X.8 величин $\Delta [\Delta H_{298}^{\circ}]$, изменения энтропии без учета эффекта симметрии ΔS_{298}° , изменения теплоемкости ΔC_p для нормальных альдегидов и исходных углеводородов. Указанные в табл. X.8 значения использованы для пересмотра термодинамических функций Чермина [221].

Остальные кислородсодержащие органические соединения, для которых получена термодинамическая информация, характеризуются слишком широким диапазоном изменения свойств, поэтому не могут быть отнесены к единому классу. Этот факт подчеркивает желательность дополнительных исследований.

Таблица X.6

Энтальпия образования нормальных альдегидов
в состоянии идеального газа при 298,15° К

Альдегид	Измеренное значение ΔH_{298}° (г), ккал/моль		$\Delta [\Delta H_{298}^{\circ}]$, ккал/моль	ΔH_{298}° (г), ккал/моль (рассчитано для альдегида)	Литература ^{a)}
	альдегид	исходный углеводород			
Уксусный	-39,76	-24,82	-14,94	-39,31	[1249]
Пропаионовый	-45,9	-30,15	-15,75	-44,64	[1508]
Масляный	-49,0	-35,00	-14,00	-49,49	[1065]
Эпантовый	-63,1	-49,82	-13,28	-64,31	[1065]
Среднее значение:			-14,49		

a) Источники, содержащие данные о ΔH_{298}° альдегидов

Таблица X.7

Энтропия нормальных альдегидов в состоянии
идеального газа при 298,15° К

Альдегид	Измеренное значение $S_{298}^{\circ}(g)$, кал/(моль·°К)		$\Delta S_{298}^{\circ}(g)$, кал/(моль·°К)	$S_{298}^{\circ}(g)$, кал/(моль·°К) (рассчитано для альде- гида)	Температура ^{a)}
	альдегид	исходный углеводород			
Уксусный	63,15 ^{b)}	64,51	-4,92	63,31	[1167]
Пропионовый	72,83 ^{b)}	74,12	-4,85	72,92	[221]
Масляный	82,44 ^{b)}	83,40	-4,52	82,20	[221]
Энантовый	110,34 ^{b)}	111,55	-4,77	110,35	[221]
Среднее значение:			-4,76		

^{a)} Источники, содержащие данные о S° альдегидов.

^{b)} Рассчитано из спектроскопических данных.

^{c)} Значение $S_{298}^{\circ}(l)$ пересчитано с учетом данных по давлению пара.

Таблица X.8

Инкременты, использованные для расчета термодинамических
свойств простых эфиров, спиртов и альдегидов
по свойствам исходных углеводородов

Инкременты	Процессы, состояние идеального газа			
	$n-R-CH_2-n-R' \rightarrow$ $n-R-O-n-R'$	$n-R-CH_2 \rightarrow$ $n-R-OH$	$n-R-CH_2-CH_2 \rightarrow$ $n-R-CH=O$	
$\Delta[Hf_{298}^{\circ}]$, ккал/моль	-25,5	31,39	-14,49	
ΔS_{298}° , кал/(моль·°К)	-1,26	-0,59	-4,76	
ΔC_p , кал/(моль·°К)	298° К	-1,84	-2,44	-4,32
	300° К	-1,87	-2,45	-4,35
	400° К	-3,52	-3,74	-6,47
	500° К	-4,81	-4,81	-8,44
	600° К	-5,72	-5,75	-10,09
	700° К	-6,44	-6,51	-11,51
	800° К	-7,03	-7,18	-12,74
900° К	-7,57	-7,78	-13,84	
1000° К	-8,04	-8,30	-14,88	

ТАБЛИЦЫ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ

При составлении публикуемых в этой главе таблиц термодинамических свойств использованы все доступные данные. Таблицы сгруппированы по классам соединений.

Алифатические эфиры. Таблицы для состояния
идеального газа

№ 501. Диметиловый эфир, C_2H_6O (состояние идеального газа).
Мол. вес 46,068

T, °К	кал/(моль·°К)			ккал/моль			lg K _p
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	15,73	63,83	63,83	0,00	-43,99	-26,99	19,781
300	15,79	63,93	63,84	0,03	-44,01	-26,88	19,583
400	19,02	68,92	64,49	1,77	-45,20	-20,99	11,466
500	22,23	73,51	65,84	3,84	-46,24	-14,81	6,473
600	25,16	77,83	67,48	6,21	-47,10	-8,44	3,075
700	27,76	81,91	69,26	8,86	-47,79	-1,94	0,606
800	30,04	85,77	71,08	11,75	-48,34	4,64	-1,268
900	32,04	89,42	72,92	14,86	-48,74	11,30	-2,743
1000	33,79	92,89	74,74	18,15	-49,03	17,99	-3,931

Низкотемпературные термические данные, полученные Кеннеди, Сагенканом и Астоном [740], включают следующие значения: $T_{tp} = 131,65^{\circ}K$, $\Delta H_{tp} = 1,180$ ккал/моль и $T_b = 248,33^{\circ}K$, причем $\Delta H_v = 5,141$ ккал/моль; эти исследователи установили, что $S_{298}^{\circ}(g) = 63,72$ кал/(моль·°К). Кистяковский и Райс [758], а также Эйкен и Франк [383] измеряли теплоемкость паров при $300,76^{\circ}K$ и 200 и $280^{\circ}K$ соответственно. Полученные экспериментальные данные хорошо согласуются со значениями, рассчитанными из следующей спектроскопической информации: отнесения колебательных частот, выполненного Канадзавой и Нукадой [711], значений моментов инерции по данным Касаи и Майерса [722] и барьера внутреннего вращения $2,7$ ккал/моль, установленного на основании данных Касаи и Майерса [722] ($2,72$ ккал/моль) и Фейтели и Миллера [408] ($2,625$ ккал/моль). Результаты расчетов, выполненных Сеха [1329], Надни [558] и Банерджи и Дорейсвами [70], находятся в удовлетворительном согласии, за исключением беспорядочно отклоняющихся значений теплоемкостей, полученных Банерджи и Дорейсвами.

Пилчер, Пелл и Колеман [1145] методом калориметрии пламени нашли, что $\Delta H_f^{\circ}(g) = -43,99$ ккал/моль; это значение принято и здесь.

Давно полученный результат Томсена [1495], изучавшего сгорание, по расчетам Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе [1249] равный $-44,3$ ккал/моль, хорошо с этим согласуется. Гивен [489] обобщил данные по константам равновесия реакции $2\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}(g) \rightleftharpoons (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}(g) + \text{H}_2\text{O}(g)$ и получил значение $-44,4$ ккал/моль. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 400,1^\circ\text{K}$ и $P_c = 53$ атм.

№ 502. Этилметилловый эфир, $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 60,094

$T, ^\circ\text{K}$	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	21,45	74,24	74,24	0,00	-51,73	-28,12	20,611
300	21,53	74,38	74,25	0,04	-51,76	-27,98	20,379
400	26,08	81,20	75,14	2,43	-53,25	-19,81	10,825
500	30,53	87,50	76,99	5,26	-54,53	-11,30	4,939
600	34,58	93,43	79,24	8,52	-55,58	-2,56	0,931
700	38,11	99,04	81,67	12,16	-56,41	6,35	-1,983
800	41,19	104,33	84,18	16,13	-57,05	15,36	-4,196
900	43,87	109,34	86,70	20,38	-57,50	24,44	-5,936
1000	46,18	114,09	89,20	24,89	-57,80	33,57	-7,337

Пилчер, Пелл и Колеман [1145] методом калориметрии пламени нашли, что $\Delta H_{298}^\circ(g) = -51,73$ ккал/моль; это значение принято и здесь. Давно полученный Томсеном [1495] результат, как указывает Каран [744], хорошо согласуется при $-52,0$ ккал/моль. Оценочные значения термодинамических функций для состояния идеального газа получены с использованием констант, приведенных в табл. X.8. Эйкен и Франк [383] измеряли теплоемкость паров при 200 и 280°K . Экстраполяция оценочных значений показывает удовлетворительное соответствие. По данным Тиммерманса [1501], $T_b = 280,8^\circ\text{K}$ и $T_c = 437,9^\circ\text{K}$.

№ 503. Диэтиловый эфир, $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 74,120

Пилчер, Скиннер, Пелл и Поуп [1146] методом калориметрии пламени определили значение $\Delta H_{298}^\circ(g) = -60,28$ ккал/моль. Единственный более ранний результат, указанный Карашем [744], содержит серьезную ошибку. Паркс и Хаффман [1103] измеряли теплоемкости в температурном интервале от 90 до 298°K ; они установили также $T_m = 156,9^\circ\text{K}$ и $\Delta H_m = 1,745$ ккал/моль. Паркс и Хаффман [1105] использовали собственный экстраполяционный

$T, ^\circ\text{K}$	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	26,89	81,90	81,90	0,00	-60,28	-29,24	21,434
300	27,00	82,07	81,91	0,05	-60,32	-29,05	21,163
400	33,01	90,67	83,04	3,06	-62,13	-18,35	10,023
500	38,77	98,66	85,37	6,65	-63,67	-7,22	3,154
600	43,92	106,20	88,22	10,79	-64,92	4,19	-1,526
700	48,39	113,31	91,30	15,41	-65,89	15,79	-4,930
800	52,26	120,03	94,48	20,45	-66,62	27,50	-7,514
900	55,61	126,39	97,67	25,85	-67,13	39,31	-9,545
1000	58,51	132,40	100,85	31,56	-67,44	51,16	-11,181

метод и получили $S_{298}^\circ(l) = 60,5$ кал/(моль·°K). Тиммерманс [1501] приводит более десяти результатов измерений точки кипения, из которых мы отобрали значение $T_b = 307,7$ К. Метюс [940] установил, что при температуре кипения $\Delta H_v = 6,38$ ккал/моль. Приняв величину ΔC_p испарения равной $-14,3$ кал/(моль·°K), мы рассчитали $\Delta H_{v,298} = 6,516$ ккал/моль. Путем интерполяции значений, указанных Сталлом [1432], установлено, что давление пара при $298,15^\circ\text{K}$ равно 531 мм рт. ст. Поправка на неидеальность газа рассчитана по уравнению Берглю и критическим константам Кея и Донама [727], $T_c = 466,56^\circ\text{K}$ и $P_c = 36,0$ атм. Энтропия для состояния идеального газа была затем вычислена следующим образом:

$S_{298}^\circ(l)$	60,50 кал/(моль·°K)
ΔS_v (испарение) $6516/298,15$	21,85
ΔS (сжатие), $-R \ln(760/531)$	-0,71
ΔS (неидеальность газа)	0,18
$S_{298}^\circ(g)$	81,82 кал/(моль·°K)

По сообщению Кабела и Иохансона [708], величина энтропии независимо может быть рассчитана из константы равновесия реакции $2\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}(g) \rightleftharpoons (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}(g) + \text{H}_2\text{O}(g)$. Они установили, что при $394,0^\circ\text{K}$ $K_p = 24,7$, откуда $\Delta C_{394}^\circ = -2,511$ ккал/моль для эфира. Указанная выше энтальпия образования и данные по теплоемкости дают $\Delta H_{394}^\circ = -5,303$ ккал/моль для эфира и по разности $\Delta S_{394}^\circ = 7,09$ кал/(моль·°K). Приведение к температуре $298,15^\circ\text{K}$ дает $S_{298}^\circ(g) = 82,0$ кал/(моль·°K), что отлично согласуется с результатом, полученным на основании третьего закона термодинамики. Принято среднее значение $81,9$ кал/(моль·°K). Другие константы равновесия, приводимые в работе Кабела и Иохансона, вероятно, ошибочны, за исключением данных Атертона [49].

Оценка теплосмкостей газа сделана на основании значений констант, приведенных в табл. X.8. Экспериментальные данные Эйкена и Франка [383], по-видимому, завышены.

№ 504. Метилпропиловый эфир, $C_4H_{10}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 74,120

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	26,89	83,52	83,52	0,00	-56,82	-26,27	19,252
300	27,00	83,69	83,53	0,05	-56,86	-26,08	18,997
400	33,01	92,29	84,66	3,06	-58,87	-15,53	8,486
500	38,77	100,28	86,99	6,65	-60,21	-4,57	1,996
600	43,92	107,82	89,84	10,79	-61,46	6,68	-2,433
700	48,39	114,93	92,92	15,41	-62,43	18,12	-5,656
800	52,26	121,65	96,10	20,45	-63,16	29,67	-8,405
900	55,61	128,01	99,29	25,85	-63,67	41,31	-10,031
1000	58,51	134,02	102,47	31,56	-63,98	53,00	-11,583

Пилчер, Пелл и Колеман [1145] методом калориметрии пламени определили значение $\Delta H_f^\circ(g) = -56,82$ ккал/моль. Оценочные значения термодинамических функций для состояния идеального газа получены на основании значений для пентана и констант, приведенных в табл. X.8. Тиммерманс [1501] дает четыре результата определения точки кипения, из которых мы отобрали $T_b = 312,2^\circ K$

№ 505. Метилпропиловый эфир, $C_4H_{10}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 74,120

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	26,55	80,86	80,86	0,00	-60,24	-28,89	21,178
300	26,67	81,03	80,87	0,05	-60,28	-28,70	20,907
400	32,97	89,57	81,99	3,04	-62,11	-17,89	9,772
500	38,90	97,58	84,31	6,64	-63,64	-6,65	2,906
600	44,17	105,15	87,16	10,80	-64,87	4,87	-1,773
700	48,75	112,31	90,25	15,45	-65,81	16,57	-5,173
800	52,67	119,08	93,43	20,52	-66,50	28,38	-7,753
900	56,09	125,49	96,64	25,97	-66,97	40,28	-9,780
1000	59,08	131,55	99,83	31,73	-67,23	52,22	-11,412

Пилчер, Пелл и Колеман [1145] методом калориметрии пламени определили значение $\Delta H_f^\circ(g) = -60,24$ ккал/моль. Оценочные

значения термодинамических функций для состояния идеального газа получены на основании данных для 2-метилбутана и констант, приведенных в табл. X.8.

№ 506. Метил-трет-бутиловый эфир, $C_5H_{12}O$ (состояние идеального газа). Мол. вес 88,146

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	32,07	84,36	84,36	0,00	-70,00	-29,98	21,978
300	32,22	84,56	84,37	0,06	-70,05	-29,74	21,664
400	40,18	94,93	85,73	3,69	-72,18	-15,97	8,723
500	47,70	104,72	88,55	8,09	-73,92	-1,71	0,745
600	54,28	114,02	92,03	13,20	-75,28	12,87	-4,686
700	59,66	122,80	95,81	18,90	-76,30	27,65	-8,631
800	64,36	131,09	99,70	25,11	-77,02	42,54	-11,620
900	68,03	138,88	103,63	31,73	-77,51	57,52	-13,967
1000	71,66	146,23	107,52	38,72	-77,77	72,55	-15,855

По данным измерения энтальпии сгорания и энтальпии испарения Смутни и Бонди [1390] вычислили $\Delta H_f^\circ(g) = -70,0$ ккал/моль. Оценочные значения термодинамических функций для состояния идеального газа получены на основании величин для 2,2-диметилбутана и констант, приведенных в табл. X.8.

№ 507. Дипропиловый эфир, $C_6H_{14}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 102,172

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	37,83	100,98	100,98	0,00	-70,00	-25,23	18,492
300	37,99	101,22	100,99	0,08	-70,05	-24,95	18,178
400	46,90	113,38	102,58	4,32	-72,50	-9,54	5,209
500	55,26	124,76	105,89	9,44	-74,55	6,45	-2,819
600	62,61	135,50	109,94	15,34	-76,19	22,80	-8,306
700	68,94	145,64	114,32	21,93	-77,45	39,41	-12,304
800	74,39	155,21	118,84	29,10	-78,38	56,16	-15,342
900	79,11	164,25	123,39	36,78	-79,00	73,03	-17,732
1000	83,17	172,80	127,91	44,90	-79,35	89,95	-19,658

Коломина, Пелл, Сквиннер и Колеман [252] измеряли энтальпию сгорания и установили, что $\Delta H_f^\circ(l) = -78,59$ ккал/моль. По данным о давлении пара они рассчитали $\Delta H_f^\circ(g) = 8,6$ ккал/моль

и $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -70,0$ ккал/моль. Термодинамические функции оценены на основании величин для гептана и констант, приведенных в табл. X.8. Тиммерманс [1501] приводит два результата определения точки кипения, хорошо согласующиеся при $T_b = 363,2^{\circ}\text{K}$.

№ 508. Динпропиловый эфир, $\text{C}_6\text{H}_{14}\text{O}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 102,172

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	37,83	93,27	93,27	0,00	-76,20	-29,13	21,352
300	37,99	93,51	93,28	0,08	-76,25	-28,84	21,010
400	46,90	105,67	94,87	4,32	-78,70	-12,65	6,912
500	55,26	117,05	98,18	9,44	-80,75	4,10	-1,794
600	62,61	127,79	102,23	15,34	-82,39	21,23	-7,732
700	68,94	137,93	106,61	21,93	-83,65	38,61	-12,054
800	74,39	147,50	111,13	29,10	-84,58	56,13	-15,333
900	79,11	156,54	115,68	36,78	-85,20	73,77	-17,912
1000	83,17	165,09	120,20	44,90	-85,55	91,46	-19,988

По сообщениям Коломины, Пелла, Скиннера и Колемана [252] и Паркса и Манчестера [1111], энтальпия сгорания равна соответственно $-958,51$ и $-958,64$ ккал/моль, откуда следует, что $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -83,95$ ккал/моль. На основании данных по давлению и плотности пара Николини [1069] рассчитал $\Delta H_{298}^{\circ} = 7,6$ ккал/моль, тогда как по данным Смутни и Бонди [1390] эта величина равна $7,9$ ккал/моль. Принято среднее значение $7,75$ ккал/моль, из которого рассчитано $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -76,2$ ккал/моль. На основании результатов измерения теплоемкости при температурах от 90 до 298°K Паркс, Хаффман и Бармор [1106] установили, что $T_m = 186,3^{\circ}\text{K}$, $\Delta H_m = 2,635$ ккал/моль и $S_{298}^{\circ}(l) = 70,4$ кал/(моль·°K). Согласно Николини [1069], давление пара при $298,15^{\circ}\text{K}$ равно $150,7$ мм рт. ст. На основании вышеприведенных данных и с учетом поправки на неидеальность газа, равной $0,1$ кал/(моль·°K), рассчитаны следующие значения:

$S_{298}^{\circ}(l)$	70,40 кал/(моль·°K)
ΔS_v (испарение) $7750/298,15$	25,99
ΔS (сжатие), $-R \ln(760/150,7)$	-3,22
ΔS (неидеальность газа)	0,10

$S_{298}^{\circ}(g)$	93,27 кал/(моль·°K)
--------------------------------	---------------------

Теплоемкости пара рассчитаны из значений для 2,4-диметилпентана и констант, приведенных в табл. X.8. Согласно определениям Кобе, Равича и Вора [783], $T_c = 500,1^{\circ}\text{K}$ и $P_c = 28,4$ атм. По данным Сталла [1432], $T_b = 340,7^{\circ}\text{K}$.

№ 509. Изопропил-трет-бутиловый эфир, $\text{C}_7\text{H}_{16}\text{O}$
(состояние идеального газа). Мол. вес 116,198

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	43,30	99,89	99,89	0,00	-85,60	-30,79	22,570
300	43,69	100,16	99,90	0,09	-85,66	-30,46	22,186
400	53,84	114,13	101,73	4,97	-88,41	-11,62	6,348
500	63,52	127,21	105,53	10,84	-90,72	7,85	-3,432
600	71,95	139,56	110,48	17,63	-92,56	27,74	-10,104
700	79,22	151,21	115,22	25,19	-93,96	47,91	-14,958
800	85,46	162,20	120,41	33,44	-94,98	68,24	-18,641
900	90,86	172,58	125,64	42,26	-95,67	88,70	-21,537
1000	95,56	182,41	130,83	51,58	-96,03	109,22	-23,868

По данным измерения энтальпии сгорания и энтальпии испарения Смутни и Бонди [1390] вычислили $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -94,0$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -85,6$ ккал/моль. Оценка термодинамических функций для состояния идеального газа дана по значениям для 2,2,4-триметилпентана и константам, приведенным в табл. X.8.

№ 510. Дибутиловый эфир, $\text{C}_8\text{H}_{18}\text{O}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 130,224

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	48,76	119,60	119,60	0,00	-79,80	-21,16	15,508
300	48,98	119,91	119,61	0,10	-79,87	-20,80	15,150
400	60,78	135,63	121,67	5,59	-82,95	-0,62	0,339
500	71,75	150,40	125,95	12,23	-85,51	20,27	-8,858
600	81,29	164,35	131,20	19,89	-87,55	41,61	-15,156
700	89,49	177,51	136,89	28,44	-89,09	63,27	-19,754
800	96,52	189,93	142,75	37,75	-90,21	85,11	-23,249
900	102,60	201,66	148,65	47,71	-90,95	107,08	-26,001
1000	107,86	212,74	154,51	58,24	-91,34	129,12	-28,218

По данным измерений Коломины, Пелла, Скиннера и Колемана [252] и Скуратова и Козина [1370], энтальпия сгорания жидкого дибутилового эфира равна соответственно $-1276,9$ и $-1277,1$ ккал/моль; из этих значений получено $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -90,3$ ккал/моль. Согласно Метюсу и Феландту [941], эксперимен-

тальное значение $\Delta H_v = 8,83$ ккал/моль при $414,5^\circ$ К. Оценка ΔC_p испарения -14 кал/(моль \cdot °К) приводит к величинам $\Delta H_{298}^\circ = 10,5$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^\circ(g) = -79,8$ ккал/моль. По данным Тиммерманса [1501], $T_m = 175,3^\circ$ К и $T_b = 415,6^\circ$ К.

№ 511. Ди-втор-бутиловый эфир, $C_8H_{18}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 130,224

T, °K	кал/(моль \cdot °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	48,76	110,57	110,57	0,00	-86,20	-24,87	18,226
300	48,98	110,88	110,58	0,10	-86,27	-24,49	17,839
400	60,78	126,60	112,64	5,59	-89,35	-3,41	1,862
500	71,75	141,37	116,92	12,23	-91,91	18,38	-8,034
600	81,29	155,32	122,17	19,89	-93,95	40,63	-14,799
700	89,49	168,48	127,86	28,44	-95,49	63,20	-19,729
800	96,52	180,90	133,72	37,75	-96,61	85,93	-23,474
900	102,60	192,63	139,62	47,71	-97,35	108,81	-26,421
1000	107,86	203,71	145,48	58,24	-97,74	131,75	-28,793

По данным измерения энтальпии сгорания Коломина, Пелл, Скиннер и Колеман [252] вычислили $\Delta H_{298}^\circ(l) = -95,98$ ккал/моль. Они использовали данные по давлению пара для расчета $\Delta H_{298}^\circ = 9,8$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^\circ(g) = -86,2$ ккал/моль. Оценочные значения термодинамических функций для состояния идеального газа получены с использованием величин, относящихся к 3,5-диметилпентану, и констант, приведенных в табл. X.8.

№ 512. Ди-трет-бутиловый эфир, $C_8H_{18}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 130,224

T, °K	кал/(моль \cdot °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	48,76	102,12	102,12	0,00	-87,20	-23,35	17,112
300	48,98	102,43	102,13	0,10	-87,27	-22,95	16,721
400	60,78	118,15	104,19	5,59	-90,35	-1,03	0,562
500	71,75	132,92	108,47	12,23	-92,91	21,61	-9,443
600	81,29	146,87	113,72	19,89	-94,95	44,70	-16,281
700	89,49	160,03	119,41	28,44	-96,49	68,11	-21,264
800	96,52	172,45	125,27	37,75	-97,61	91,69	-25,047
900	102,60	184,48	131,17	47,71	-98,35	115,41	-28,024
1000	107,86	195,26	137,03	58,24	-98,74	139,20	-30,421

По данным измерения энтальпии сгорания Смутни и Бонди [1390] вычислили $\Delta H_{298}^\circ(l) = -96,1$ ккал/моль. Они измеряли также давление пара в интервале температур $4-109^\circ$ С и рассчитали $\Delta H_{298}^\circ = 9,0$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^\circ(g) = -87,2$ ккал/моль. Оценочные значения термодинамических функций для состояния идеального газа получены с использованием данных для 2,2,4,4-тетраметилпентана и констант, приведенных в табл. X.8. Смутни и Бонди [1390] рассчитали энергию деформации молекулы ди-трет-бутилового эфира, равную $7,6$ ккал/моль.

Циклические эфиры. Таблицы для состояния идеального газа

№ 513. Окись этилена, C_2H_4O (состояние идеального газа).
Мол. вес 44,052

T, °K	кал/(моль \cdot °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	11,54	57,94	57,94	0,00	-12,58	-3,13	2,292
300	11,60	58,02	57,95	0,03	-12,60	-3,07	2,236
400	14,95	61,82	58,44	1,36	-13,51	0,25	-0,137
500	18,03	65,49	59,49	3,01	-14,25	3,78	-1,652
600	20,62	69,02	60,78	4,95	-14,85	7,44	-2,711
700	22,78	72,36	62,20	7,12	-15,32	11,20	-3,496
800	24,60	75,53	63,67	9,49	-15,68	15,01	-4,100
900	26,15	78,52	65,16	12,03	-15,94	18,86	-4,580
1000	27,47	81,34	66,63	14,71	-16,12	22,74	-4,970

По данным измерения энтальпии сгорания в пламенном калориметре Пелл и Пилчер [1133] вычислили $\Delta H_{298}^\circ(g) = -12,58$ ккал/моль. Они сопоставили также данные предшествующих работ по изучению окиси этилена.

Джиок и Гордон [475] на основании всестороннего изучения свойств этого соединения при низких температурах пришли к выводу, что $T_{tr} = 160,71^\circ$ К, $\Delta H_m = 1,236$ ккал/моль и $T_b = 283,71^\circ$ К, при этом $\Delta H_v = 6,101 \pm 0,006$ ккал/моль и $S_{298}^\circ(g) = 57,94$ кал/(моль \cdot °К). Гюнтард и Хейльброннер [548] произвели отнесение частот колебаний и рассчитали термодинамические функции. Результаты их расчетов теплоемкостей пара согласуются с величинами, полученными в результате измерений, выполненных Кистяковским и Райсом [758], с точностью $0,1$ кал/(моль \cdot °К), однако рассчитанная ими энтропия газа на $0,30$ кал/(моль \cdot °К) превышает значение, установленное Джиоком и Гордоном [475]. Кубе и Пеннингтон [781] провели повторный расчет термодинамических функций, а позже Лорд и Нолин [885] еще раз изучили спектр и не внесли

существенных изменений в расчеты термодинамических свойств. По данным Кобе и Линна [780], $T_c = 468^\circ \text{K}$ и $P_c = 71,0 \text{ атм.}$

№ 514. Окись пропилена, $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 58,078

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	17,29	68,53	68,53	0,00	-22,17	-6,16	4,517
300	17,38	68,64	68,54	0,04	-22,20	-6,07	4,418
400	22,16	74,31	69,28	2,02	-23,39	-0,50	0,272
500	26,46	79,73	70,83	4,45	-24,37	5,34	-2,335
600	30,07	84,88	72,74	7,29	-25,15	11,36	-4,137
700	33,11	89,75	74,83	10,45	-25,75	17,50	-5,462
800	35,68	94,34	76,98	13,89	-26,21	23,70	-6,475
900	37,89	98,68	79,16	17,57	-26,53	29,96	-7,276
1000	39,79	102,77	81,31	21,46	-26,72	36,26	-7,924

Зинке и Хильденбранд [1356] измеряли теплоту сгорания и энтальпию испарения жидкой окиси пропилена и сообщили следующие данные: $\Delta H_f^\circ(l) = -28,84 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_f^\circ(g) = -22,17 \text{ ккал/моль}$. По данным измерения теплоемкости в температурном интервале от 11 до 300°K Оттинг [1083] установил, что $T_m = 161,22^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 1,561 \text{ ккал/моль}$ и $S_{298}^\circ(l) = 46,91 \text{ кал/(моль·°K)}$. Остаточная энтропия $R \ln 2$ была включена в энтропию смешения оптических *d*- и *l*-изомеров. Суммарная энтропия приводится ниже [в кал/(моль·°K)].

S (смещение), $R \ln 2$	1,377
$S_{11} - S_0$ (Дебая—Эйнштейна)	0,119
$S_{161,22} - S_{11^\circ \text{K}}$ кристалл (графически)	19,297
ΔS_m , 1561,4/161,22	9,686
$S_{298,15} - S_{161,22^\circ \text{K}}$ жидкость (графически)	16,431
$S_{298,15}^\circ(l)$	$46,91 \pm 0,15$
ΔS_v , 6667,298,15	22,361
ΔS (неидеальность газа)	0,108
ΔS (сжатие), $-R \ln(760/538)$	-0,686
$S_{298,15}^\circ$ (идеальный газ)	$68,69 \pm 0,20$

Согласно Суолену и Гершбаху [1457], момент инерции равен $824,7 \cdot 10^{-117} \text{ г}^3\text{см}^6$, отнесение колебаний в жидкой фазе, по существу совпадающее с отнесением Тобина [1510], и значение барьера внутреннего вращения $2,56 \text{ ккал/моль}$, указанное Гершбахом и Суоленом [588] и обоснованное Фейтли и Миллером [409], использо-

ваны для расчетов термодинамических функций, в том числе значения $S_{298}^\circ(g) = 68,53 \text{ кал/(моль·°K)}$, хорошо согласующегося с измерениями на основании третьего закона термодинамики и со спектроскопическим значением, рассчитанным Грином [531].

№ 515. Фуран, $\text{C}_4\text{H}_4\text{O}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 68,072

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	15,64	63,86	63,86	0,00	-8,29	0,21	-0,154
300	15,75	63,96	63,87	0,03	-8,31	0,26	-0,190
400	21,20	69,26	64,55	1,89	-9,19	3,26	-1,781
500	25,73	74,50	66,02	4,24	-9,87	6,45	-2,821
600	29,31	79,52	67,85	7,00	-10,40	9,77	-3,557
700	32,13	84,25	69,86	10,08	-10,81	13,16	-4,410
800	34,41	88,70	71,94	13,41	-11,13	16,61	-4,536
900	36,30	92,86	74,04	16,95	-11,37	20,09	-4,878
1000	37,89	96,77	76,12	20,66	-11,53	23,60	-5,157

Гатри, Скотт, Хаббард, Катц, Мак-Каллох, Гросс, Уильямсон и Уаддингтон [551] очень тщательно изучили фуран и сообщили следующие данные: $\Delta H_f^\circ(g) = -8,293 \text{ ккал/моль}$, $T_m = 150,0^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 0,489 \text{ ккал/моль}$, $T_m = 187,54^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 0,909 \text{ ккал/моль}$, $\Delta H_v = 6,474 \text{ ккал/моль}$ при $T_b = 304,5^\circ \text{K}$, $S_{298}^\circ(g) = 63,86 \text{ кал/(моль·°K)}$; они провели также полный расчет термодинамических функций. Бак, Бродерсен и Хансен [62] на основании новых отнесений частот колебаний рассчитали термодинамические функции, однако их расчетные значения не согласуются с экспериментальными данными. Здесь приняты экспериментально обоснованные значения первой группы исследователей.

№ 516. *n*-Диоксан, $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 88,104

По данным измерения теплоты сгорания Снелсон и Скиннер [1391] вычислили $\Delta H_f^\circ(l) = -84,50 \text{ ккал/моль}$; с учетом величины $\Delta H_v^\circ = 9,20 \text{ ккал/моль}$, полученной Мак-Доналдом [968], это приводит к значению $\Delta H_f^\circ(g) = -75,30 \text{ ккал/моль}$. Джекобс и Паркс [677] на основании измерения энтропии по третьему закону термодинамики получили следующие данные: $\Delta H_m^\circ = 0,562 \text{ ккал/моль}$ при $T_m = 272,9^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 3,07 \text{ ккал/моль}$ при $T_m = 284,1^\circ \text{K}$, $S_{298}^\circ(l) = 46,67 \text{ кал/(моль·°K)}$. Данные по давлению пара, полученные Сталлом [1432], показывают, что $T_b =$

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _L
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	22,48	71,65	71,65	0,00	-75,30	-43,21	31,670
300	22,60	71,79	71,66	0,05	-75,34	-43,01	31,331
400	30,23	79,35	72,63	2,69	-77,17	-31,94	17,450
500	37,49	86,90	74,73	6,09	-78,57	-20,46	8,944
600	43,44	94,28	77,38	10,14	-79,58	-8,74	3,185
700	48,25	101,35	80,30	14,74	-80,27	3,12	-0,975
800	52,15	108,05	83,36	19,76	-80,70	15,06	-4,114
900	55,36	114,39	86,46	25,14	-80,93	27,05	-6,569
1000	58,05	120,36	89,55	30,82	-80,98	39,06	-8,537

= 374,3° K, и позволяют рассчитать $\Delta H_v = 8,30$ ккал/моль при температуре кипения. Для расчетов значения $S_{298}^o(g) = 71,65$ кал/(моль·°K) и других термодинамических функций использовано отнесение частот колебаний, выполненное Малхербе и Бернстейном [916]. Правильность этих значений подтверждается следующими расчетами (без поправок на неидеальность газа):

$S_{298}^o(l)$	46,67 кал/(моль·°K)
$\Delta S_{v,298}$, 9200/298,15	30,86
ΔS (сжатие), $-R \ln(760/40)$	-5,85
S_{298}^o (состояние идеального газа)	71,68 кал/(моль·°K)

Спирты. Таблицы для состояния идеального газа

№ 517. Метиловый спирт, C₂H₅O (состояние идеального газа).

Мол. вес 32,042

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	10,49	52,29	57,29	0,00	-48,08	-38,84	28,468
300	10,52	57,36	57,30	0,02	-48,10	-38,78	28,252
400	12,29	60,62	57,73	1,16	-48,95	-35,54	19,420
500	14,22	63,58	58,61	2,49	-49,70	-32,11	14,032
600	16,02	66,33	59,67	4,00	-50,34	-28,52	10,389
700	17,62	68,92	60,81	5,69	-50,88	-24,84	7,756
800	19,04	71,37	61,98	7,52	-51,31	-21,10	5,763
900	20,29	73,69	63,15	9,49	-51,66	-17,30	4,200
1000	21,38	75,88	64,31	11,57	-51,93	-13,46	2,941

Чао и Россини [215] на основании данных, полученных при сжигании жидкого метилового спирта, установили, что $\Delta H_{298}^o(l) = -57,24$ ккал/моль, тогда как по сообщению Россини [1240] $\Delta H_{298}^o(l) = -57,02$ ккал/моль. В соответствии с соображениями, высказанными во введении к этой главе, здесь принято значение Россини, которое приводит к величине $\Delta H_{298}^o(g) = -48,08$ ккал/моль, если воспользоваться значением $\Delta H_{v,298}^o = 8,96$ ккал/моль, как указано в работе Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе [1249]. Келли [732] сообщил, что по данным измерений теплоемкости при низких температурах $Tt = 157,4^\circ$ K, $\Delta Ht^\circ = 0,154$ ккал/моль, $Tm = 175,25^\circ$ K, $\Delta Hm^\circ = 0,757$ ккал/моль и $S_{298}^o(l) = 30,3$ кал/(моль·°K). Россини и др. [1249] отобрали значение $Tb = 337,9^\circ$ K; из перечисленных ниже работ отобрали значение $\Delta H_v = 8,43$ ккал/моль.

$\Delta H_{337,9}^o$, ккал/моль	Литература
8,429	Флок, Джиннингс и Холтон [426]
8,43	Метюс [940]
8,442	Уелтнер и Питцер [1588]

Айващ, Ли и Питцер [674] пересмотрели спектроскопические данные, провели строгий расчет влияния внутреннего вращения (таблицы Питцера и Гуинна [1162] неприменимы к столь малой молекуле) и полный расчет термодинамических свойств, в том числе значения $S_{298}^o(g) = 57,29$ кал/(моль·°K). Эти рассчитанные свойства хорошо согласуются с результатами измерений теплоемкостей, полученными Эйкенем и Франком [383], Де Врисом и Коллинсом [323], Роулинсоном [1256], Уелтнером и Питцером [1588], а также со значением энтропии, определенным Келли [732] на основании третьего закона термодинамики и исправленным с учетом неидеальности газа по данным Уелтнера и Питцера [1588]. Последние исследователи впервые рассматривали пары метилового спирта как смесь димеров и тетрамеров. Последующее изучение спектра инфракрасного поглощения, выполненное Инскипом, Келлихером, Мак-Магом и Сомерсом [671], подтверждает правильность модели, согласно которой пары метилового спирта состоят из мономеров, димеров и тетрамеров, тогда как тримеры отсутствуют или присутствуют в небольшом количестве. По данным Кубе и Линна [780], $Tc = 513^\circ$ K, $Pc = 78,5$ атм и $dc = 0,272$ г/см³.

№ 518. Этиловый спирт, C₂H₆O (состояние идеального газа).

Мол. вес 46,068

Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] отобрали значение $\Delta H_{298}^o(g) = -56,240$ ккал/моль, однако впоследствии Чао

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	15,64	67,54	67,54	0,00	-56,12	-40,22	29,483
300	15,71	67,64	67,55	0,03	-56,14	-40,13	29,231
400	19,36	72,67	68,21	1,79	-57,32	-34,60	18,904
500	22,77	77,36	69,57	3,90	-58,31	-28,80	12,590
600	25,69	81,78	71,24	6,33	-59,41	-22,83	8,314
700	28,19	85,93	73,05	9,02	-59,76	-16,73	5,222
800	30,33	89,84	74,90	11,95	-60,27	-10,55	2,881
900	32,19	93,52	76,77	15,08	-60,65	-4,30	1,045
1000	33,83	97,00	78,62	18,38	-60,93	1,98	-0,433

и Россини [215] экспериментально установили, что $\Delta H_{f,298}^{\circ}(l) = -66,20$ ккал/моль, и это значение принято по соображениям, изложенным во введении к данной главе. По результатам измерений Вадсо и Вадсо [1553], $\Delta H_{v,298}^{\circ} = 10,08$ ккал/моль, а, следовательно, $\Delta H_{f,298}^{\circ}(g) = -56,12$ ккал/моль. На основании данных, полученных при измерении теплоемкости в температурном интервале от 16 до 298° K, Келли [733] сообщал, что $T_m = 158,5^{\circ}$ K, $\Delta H_m^{\circ} = 1,200$ ккал/моль и $S_{298}^{\circ}(l) = 38,4$ ккал/(моль·°K). По данным измерений Фиока, Джиннингса и Холтона [426], $T_b = 351,7^{\circ}$ K, при этом $\Delta H_v = 9,220$ ккал/моль. Теплоемкость этилового спирта в газообразном состоянии определяли Зинке и Де Врис [1355], Халфорд и Миллер [565] и Барроу [76]. Барроу произвел отнесение основных частот колебаний, сделал обзор данных по равновесиям и добился хорошего соответствия всех экспериментальных результатов. Почти десять лет спустя Грин [536] сделал обзор имеющихся данных, несколько изменил спектроскопические отнесения, пересчитал термодинамические функции и установил, что $S_{298}^{\circ}(g) = 67,54$ ккал/(моль·°K). По данным Кобе и Линна [780], $T_c = 516^{\circ}$ K, $P_c = 63,0$ атм и $d_c = 0,276$ г/см³.

№ 519. Пропиловый спирт, C₃H₈O (состояние идеального газа).
Мол. вес 60,094

Грин [530] опубликовал обзор литературных данных по изучению сгорания пропилового спирта, однако позднее стали известны результаты измерений, выполненных Чао и Россини [215], которые и были приняты. По данным Чао и Россини, $\Delta H_{f,298}^{\circ}(l) = -72,79$ ккал/моль. На основании результатов измерений Вадсо и Вадсо [1553] установлено, что $\Delta H_{v,298}^{\circ}(g) = 11,24$ ккал/моль, откуда

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	20,82	77,63	77,63	0,00	-61,55	-38,95	28,550
300	20,91	77,76	77,64	0,04	-61,58	-38,81	28,273
400	25,86	84,46	78,52	2,38	-63,11	-30,98	16,926
500	30,51	90,75	80,34	5,21	-64,40	-22,79	9,963
600	34,56	96,68	82,57	8,47	-65,46	-14,37	5,235
700	38,03	102,27	84,99	12,10	-66,29	-5,79	1,807
800	41,04	107,55	87,48	16,06	-66,94	2,90	-0,791
900	43,65	112,54	89,99	20,29	-67,41	11,66	-2,831
1000	45,93	117,26	92,49	24,78	-67,73	20,47	-4,474

получено $\Delta H_{f,298}^{\circ}(g) = -61,55$ ккал/моль. Паркс, Келли и Хаффман [1108] определяли термодинамические свойства в интервале температур от 90 до 298° K и сообщили, что $S_{298}^{\circ}(l) = 46,1$ ккал/(моль·°K). Согласно Парксу и Хаффману [1103], $T_m = 147^{\circ}$ K и $\Delta H_m^{\circ} = 1,240$ ккал/моль. По данным измерений Метюса и Мак-Кетти [939], $\Delta H_v = 9,852$ ккал/моль при $T_b = 370,35^{\circ}$ K. Эти исследователи также изучали теплоемкость пара, выполнили отнесение основных частот колебаний и определили барьер внутреннего вращения; по их данным, $S_{298}^{\circ}(g) = 77,63$ ккал/(моль·°K). Указанное значение энтропии и рассчитанные этими исследователями термодинамические функции для состояния идеального газа приняты в данной работе. По сообщению Кобе и Линна [870], $T_c = 537^{\circ}$ K, $P_c = 50,2$ атм и $d_c = 0,273$ г/см³.

№ 520. Изопропиловый спирт, C₃H₈O (состояние идеального газа).
Мол. вес 60,094

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	21,21	74,07	74,07	0,00	-65,45	-41,49	30,411
300	21,31	74,21	74,08	0,04	-65,48	-41,34	30,148
400	26,78	81,09	74,98	2,45	-66,65	-33,17	18,120
500	31,80	87,64	76,86	5,40	-67,82	-24,66	10,776
600	35,76	93,81	79,18	8,78	-68,74	-15,94	5,804
700	39,21	99,58	81,68	12,53	-69,46	-7,07	2,208
800	42,13	105,01	84,26	16,61	-69,99	1,87	-0,511
900	44,63	110,12	86,86	20,95	-70,36	10,88	-2,642
1000	46,82	114,94	89,43	25,52	-70,58	19,93	-4,355

Результаты измерений теплоты сгорания изопропилового спирта приведены в работах Паркса, Мосли и Питерсона [1116], Паркса и Манчестера [1111], Чао и Россини [215] и Снелсона и Скиннера [1391]. В работе двух последних исследователей дан обзор результатов изучения гидрирования ацетона, полученных Долливером, Грешамом, Кистяковским, Смитом и Воганом [334], и отмечено хорошее соответствие с их значением $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -76,04$ ккал/моль. Данные Вадсо и Вадсо [1553], Бермана, Ларкама и Мак-Кетты [113] и Хейлса, Кокса и Лиса [561] хорошо согласуются с экспериментальным значением $\Delta H_{298}^{\circ} = 10,89$ ккал/моль, которое дает $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -65,15$ ккал/моль. Последние две группы исследователей измерили теплоемкости пара и интерпретировали сложную зависимость между C_p и температурой, обусловленную ассоциацией молекул, приводящей к равновесной смеси мономеров, димеров и тетрамеров. Теплоемкость в интервале от 20 до 298,15° К измерял Келли [734]. По более поздним данным Эндона, Коунселла и Мартина [20], измерившим теплоемкости при температурах от 12 до 327° К, $\Delta H_{298}^{\circ} = 1,293$ ккал/моль при $T_{tr} = 185,20^{\circ}$ К и $S_{298}^{\circ}(l) = 43,16$ кал/(моль·°К). Сравнительно недавно Грин [538] сделал обзор спектроскопических данных, произвел отнесение основных частот колебаний, вычислил значение $S_{298}^{\circ}(g) = 74,07$ кал/(моль·°К) и дал полный расчет термодинамических функций. Он получил наилучшее согласие между экспериментальными данными и расчетными значениями при трех симметричных барьерах внутреннего вращения вокруг оси третьего порядка, равных соответственно 4,00 и 0,80 ккал/моль для групп CH_3 и OH . Согласно Хейлсу, Коку и Лису [561], $\Delta H_{298}^{\circ} = 9,512$ ккал/моль при $T_b = 355,39^{\circ}$ К. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 508,8^{\circ}$ К, $P_c = 53$ атм и $dc = 0,274$ г/см³.

№ 521. Бутиловый спирт, $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 74,120

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	26,29	86,80	86,80	0,00	-65,59	-36,01	26,397
300	26,41	86,97	86,81	0,05	-65,63	-35,83	26,402
400	32,80	95,45	87,92	3,02	-67,48	-25,61	13,991
500	38,76	103,43	90,23	6,60	-69,03	-14,96	6,537
600	43,90	110,96	93,06	10,74	-70,28	-4,02	1,466
700	48,31	118,06	96,13	15,36	-71,25	7,10	-2,217
800	52,11	124,77	99,30	20,38	-72,00	18,34	-5,010
900	55,40	131,10	102,48	25,76	-72,53	29,67	-7,205
1000	58,26	137,09	105,65	31,45	-72,86	41,05	-8,972

Измерения энтальпии сгорания выполнены Тьеббесом [1506], Скиннером и Снелсоном [1365], Гандри, Хедом и Льюисом [547], также Чао и Россини [215]. Полученные результаты, за исключением данных Тьеббеса, хорошо согласуются; принято значение Чао и Россини $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -77,87$ ккал/моль. Экспериментальное значение Вадсо и Вадсо [1553] $\Delta H_{298}^{\circ} = 12,28$ ккал/моль, откуда $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -65,59$ ккал/моль. Коунселл, Хейлс и Мартин [280] на основании низкотемпературных термических данных, а также теплоемкости пара и энтальпии испарения установили $T_{tr} = 184,51^{\circ}$ К, $\Delta H_{tr}^{\circ} = 2,240$ ккал/моль, $T_b = 390,88^{\circ}$ К, при этом $\Delta H_{298}^{\circ} = 10,31$ ккал/моль, $S_{298}^{\circ}(l) = 53,95$ кал/(моль·°К) и $S_{298}^{\circ}(g) = 86,8$ кал/(моль·°К). Принятые здесь значения термодинамических функций рассчитаны Грином [532]; им же по методу инкрементов получена величина $S_{298}^{\circ}(g) = 86,90$ кал/(моль·°К). По данным измерений, выполненных Амброзом и Тоунсендом [14], $T_c = 563,0^{\circ}$ К и $P_c = 43,55$ атм.

№ 522. втор-Бутиловый спирт, $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 74,120

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	27,08	85,81	85,81	0,00	-69,86	-39,99	29,311
300	27,20	85,98	85,82	0,06	-69,90	-39,81	28,997
400	33,70	94,71	86,96	3,10	-71,66	-29,49	16,114
500	39,70	102,89	89,34	6,78	-73,12	-18,78	8,208
600	44,72	110,59	92,24	11,01	-74,28	-7,80	2,842
700	49,02	117,81	95,39	15,70	-75,18	3,35	-1,047
800	52,68	124,60	98,62	20,79	-75,86	14,61	-3,992
900	55,88	130,99	101,86	26,22	-76,33	25,96	-6,503
1000	58,62	137,03	105,08	31,95	-76,63	37,35	-8,162

Результаты измерений теплоты сгорания, выполненных Скиннером и Снелсоном [1365], а также Чао и Россини [215], прекрасно согласуются между собой и приводят к значению $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -81,90$ ккал/моль. По данным измерений Бермана и Мак-Кетты [114], $\Delta H_{298}^{\circ} = 12,038$ ккал/моль, что приводит к $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -69,86$ ккал/моль; они же измеряли теплоемкость пара в интервале от 365 до 455° К. В качестве модели для уравнения состояния они выбрали равновесную смесь мономеров, димеров и тетрамеров. По молекулярной структуре, спектрам и калориметрическим данным были оценены барьеры и рассчитаны таблицы термодинамических функций. По сообщению этих исследователей, $S_{298}^{\circ}(g) = 85,81$ кал/(моль·°К). Биддискомб, Коллерсон, Хэндли, Херинг-

тон, Мартин и Спрейк [126] измеряли давление пара и определили $T_b = 372,66^\circ \text{K}$; по их расчетам, $\Delta H_{v_{373}} = 9,80 \text{ ккал/моль}$, что хорошо согласуется с данными Бермана и Мак-Кетты [114]. По данным Амброза и Тоунсенда [14], $T_c = 535,95^\circ \text{K}$ и $P_c = 41,39 \text{ атм}$

№ 523. *трет*-Бутиловый спирт, $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 74,120

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	27,10	77,98	77,98	0,00	-77,87	-45,66	33,471
300	27,23	78,15	77,99	0,06	-77,91	-45,47	33,120
400	34,16	86,96	79,14	3,13	-79,64	-34,38	18,781
500	40,27	95,25	81,54	6,86	-81,05	-22,89	10,005
600	45,37	103,06	84,48	11,15	-82,15	-11,16	4,064
700	49,64	110,38	87,67	15,91	-82,98	0,75	-0,233
800	53,32	117,26	90,91	21,06	-83,60	12,75	-3,482
900	56,42	123,72	94,23	26,55	-84,02	24,82	-6,027
1000	59,16	129,81	97,48	32,33	-84,26	36,94	-8,072

По данным измерения теплоты сгорания Скиннер и Снелсон [1365] вычислили $\Delta H_{f_{298}}^\circ(l) = -85,87 \text{ ккал/моль}$; в сочетании с данными измерения теплоты испарения, полученными Бейноном и Мак-Кеттой [124], это приводит к значению $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -77,87 \text{ ккал/моль}$. Оттинг [1082] на основании изучения термических свойств в интервале температур 15—330° K пришел к выводу, что энтальпия превращения кристаллической фазы II в кристаллическую фазу I при $T_t = 286,14^\circ \text{K}$ равна $\Delta H_t^\circ = 0,198 \text{ ккал/моль}$, энтальпия превращения кристаллической фазы II в кристаллическую фазу III при $T_t = 281,54^\circ \text{K}$ равна $\Delta H_t^\circ = 0,155 \text{ ккал/моль}$, а энтальпия превращения кристаллической фазы III в кристаллическую фазу I при $T_t = 294,47^\circ \text{K}$ равна $\Delta H_t^\circ = 0,117 \text{ ккал/моль}$; при $T_{tr} = 298,97^\circ \text{K}$ величина $\Delta H_m = 1,602 \text{ ккал/моль}$; $S_{298}^\circ(c) = 40,84 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$ и $S_{298,97}^\circ(l) = 46,30 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$. Бейнон и Мак-Кетта [124] измеряли давление пара, теплоту испарения и теплоемкость пара. Они сообщили, что полученные ими значения теплоемкости пара согласуются в пределах ошибки эксперимента с данными Рейнолдса и Де Вриса [1121], а также Зинке и Де Вриса [1355]. Бейнон и Мак-Кетта [124] произвели корреляцию значений теплоемкостей пара с моделью, предполагающей равновесную смесь мономеров, димеров и тетрамеров. Им удалось привести в соответствие значение энтропии, установленное на основании третьего закона термодинамики, со спектроскопическими данными и строением молекулы, а также рассчитать термодинамические функции. По их данным, $\Delta H_v =$

$= 7,86 \text{ ккал/моль}$ при $T_b = 355,48^\circ \text{K}$, $\Delta H_{v_{298}} = 8,00 \text{ ккал/моль}$ и $S_{298}^\circ(g) = 77,98 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$. Согласно Амброзу и Тоунсенду [14], $T_c = 506,2^\circ \text{K}$, $P_c = 39,2 \text{ атм}$ и $d_c = 0,270 \text{ г/см}^3$.

Эберц и Лукас [363], а также Тафт и Риж [1464] изучали равновесную гидратацию изобутена до *трет*-бутилового спирта и установили, что $\Delta G_{298}^\circ = -1,300 \text{ ккал/моль}$ для следующей реакции:

$\text{C}_4\text{H}_8(g) + \text{H}_2\text{O}(l) = \text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}(l)$				Δ
S_{298}°	70,17	16,72	46,30	-40,59
$\Delta H_{f_{298}}^\circ$	-4,04	-68,32	-85,87	-13,51

Под формулами соединений, участвующих в этой реакции, указаны значения энтропии и энтальпии образования; приведены также данные, полученные на основании таблиц, воспроизведенных в этой книге. Из указанных значений следует, что $\Delta G_r = -13,51 - [298,15(-40,59)] = -1,408 \text{ ккал/моль}$, а это хорошо согласуется с равновесными значениями.

№ 524. Амиловый спирт, $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 88,146

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	31,76	96,21	96,21	0,00	-72,27	-35,79	26,232
300	31,91	96,41	96,22	0,06	-72,32	-35,56	25,907
400	39,74	106,68	97,56	3,65	-71,48	-22,97	12,550
500	47,01	116,35	100,36	8,00	-76,29	-9,88	4,318
600	53,24	125,48	103,79	13,02	-77,73	3,54	-1,289
700	58,59	134,10	107,51	18,61	-78,85	17,18	-5,364
800	63,18	142,23	111,35	24,71	-79,69	30,95	-8,455
900	67,15	149,91	115,21	31,23	-80,28	44,83	-10,885
1000	70,59	157,16	119,05	38,12	-80,63	58,76	-12,841

По результатам измерений теплоты сгорания Чао и Россини [215] получили значение $\Delta H_{f_{298}}^\circ(l) = -85,55 \text{ ккал/моль}$, которое хорошо согласуется с величиной, предложенной Россини [1242]. Согласно измерениям Вадсо и Вадсо [1553], $\Delta H_{v_{298}} = 13,28 \text{ ккал/моль}$, что приводит к $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -72,27 \text{ ккал/моль}$. Паркс, Хаффман и Бармор [1106] изучали термические свойства при температурах от 90 до 298° K и сообщили следующие результаты: $T_m = 195,0^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,350 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 411,0^\circ \text{K}$. Отсюда рассчитано значение $\Delta H_{v_{411}} = 10,20 \text{ ккал/моль}$. Согласно Парксу,

Хаффману и Бармору [1106], $S_{298}^{\circ}(l) = 60,9$ кал/(моль·°К). Зинке и Де Врис [1355] измеряли теплоемкость пара и получили данные, хорошо согласующиеся с расчетными значениями Грина [532], который вычислил также термодинамические функции и величину $S_{298}^{\circ}(g) = 96,21$ кал/(моль·°К).

№ 525. *трет*-Амиловый спирт, $C_5H_{12}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 88,146

T, °K	кал/(моль·°К)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	31,47	87,68	87,68	0,00	-78,65	-39,62	29,044
300	31,63	87,88	87,69	0,06	-78,70	-39,39	28,691
400	39,97	98,14	89,03	3,65	-80,86	-25,94	14,171
500	47,68	107,91	91,83	8,04	-82,62	-11,99	5,243
600	54,25	117,20	95,29	13,15	-83,98	2,26	-0,823
700	59,59	125,97	99,06	18,85	-85,00	16,72	-5,221
800	64,22	134,24	102,94	25,04	-85,74	31,30	-8,550
900	67,82	142,01	106,86	31,65	-86,24	45,97	-11,162
1000	71,40	149,34	110,74	38,61	-86,53	60,68	-13,262

По данным измерений теплоты сгорания Чао и Россини [215] вычислили $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -90,71$ ккал/моль. Для согласования с соответствующими величинами, полученными Вадсо и Вадсо [1553], приняты во внимание данные Мак-Карди и Лейдлера [966] и установлено, что $\Delta H_{298}^{\circ} = 12,06$ ккал/моль, а это приводит к $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -78,65$ ккал/моль. Паркс, Хаффман и Бармор [1106] изучали низкотемпературные свойства в интервале от 90 до 298° К и получили следующие результаты: $T_i = 146,0^{\circ}$ К, $\Delta H_i^{\circ} = 0,469$ ккал/моль, $T_m = 264^{\circ}$ К, $\Delta H_m^{\circ} = 1,065$ ккал/моль, $T_b = 375,5^{\circ}$ К и $S_{298}^{\circ}(l) = 54,8$ кал/(моль·°К). Согласно Батлеру, Рамчандани и Томсону [187], $\Delta H_{298}^{\circ} = 9,40$ ккал/моль. В соответствии с третьим законом термодинамики энтропия рассчитана следующим образом:

$$S_{298}^{\circ}(l) \dots \dots \dots 54,80 \text{ кал/(моль·°К)}$$

$$\Delta S_v = \Delta H_v/T = 12\,060/298,15 \dots \dots \dots 40,45$$

$$\Delta S \text{ (сжатие), } -R \ln(760/16,8) \dots \dots \dots -7,57$$

$$S_{298}^{\circ}(g) \dots \dots \dots 87,68 \text{ кал/(моль·°К)}$$

Принимая во внимание общую симметрию, можно следующим образом оценить энтропию *трет*-амилового спирта [в кал/(моль·°К)].

$$S_{298}^{\circ} \text{ неопентан (g)} \dots \dots \dots 73,23 \quad S_{298}^{\circ} \text{ трет-бутиловый спирт (g)} \quad 78,00$$

$$R \ln 972 \dots \dots \dots 13,66 \quad R \ln 27 \dots \dots \dots 6,54$$

$$\dots \dots \dots 86,89 \quad \dots \dots \dots 84,54$$

Таким образом, замена метильной группы неопентана на группу ОН понижает энтропию на $(86,89 - 84,54) = 2,35$ кал/(моль·°К).

$$S_{298}^{\circ} \text{ 2,2-диметилбутан (g)} \dots \dots 85,62 \quad S_{298}^{\circ} \text{ трет-амиловый спирт (g)} \quad x$$

$$R \ln 243 \dots \dots \dots 10,90 \quad R \ln 27 \dots \dots \dots 6,54$$

$$\dots \dots \dots 96,52 \quad \dots \dots \dots (\text{минус } 2,35) = 94,17$$

Таким образом $(96,52 - 2,35 - 6,54) = x = 87,63$ кал/(моль·°К). Получается неплохое согласие, но оценочные значения имеют точность в пределах 0,5 кал/(моль·°К). Теплоемкость этого соединения в газообразном состоянии рассчитана на основании разности теплоемкостей амилового спирта и гексана и теплоемкости 2,2-диметилбутана.

№ 526. Гексильный спирт, $C_6H_{14}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 102,172

T, °K	кал/(моль·°К)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	37,23	105,52	105,52	0,00	-76,39	-32,97	24,168
300	37,41	105,76	105,53	0,07	-76,44	-32,71	23,825
400	46,68	117,80	107,11	4,28	-78,93	-17,73	9,689
500	55,26	129,17	110,39	9,39	-80,99	-2,19	0,957
600	62,58	139,90	114,42	15,29	-82,63	13,72	-4,998
700	68,87	150,03	118,79	21,87	-83,89	29,89	-9,332
800	74,25	159,59	123,30	29,03	-84,83	46,20	-12,621
900	78,90	168,61	127,84	36,70	-85,47	62,63	-15,208
1000	82,92	177,14	132,35	44,79	-85,85	79,12	-17,291

По данным измерений теплоты сгорания Чао и Россини [215] вычислили $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -90,67$ ккал/моль. Расчет по уравнению (X.1) приводит к значению $\Delta H_{298}^{\circ} = 14,28$ ккал/моль, откуда следует $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -76,39$ ккал/моль. Келли [733] на основании изучения низкотемпературных свойств в интервале 18–298° К сообщил следующие значения: $T_{tr} = 225,8^{\circ}$ К, $\Delta H_m^{\circ} = 3,676$ ккал/моль и $S_{298}^{\circ}(l) = 68,6$ кал/(моль·°К). Грин [532] получил на основании энтропии в соответствии с третьим законом термодинамики значение $S_{298}^{\circ}(g) = 105,1$ кал/(моль·°К) и по методу инкрементов рассчитал $S_{298}^{\circ}(g) = 105,52$ кал/(моль·°К), а также остальные значения термодинамических функций, принятые здесь.

№ 527. Гептиловый спирт, $C_7H_{16}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 116,198

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	42,70	114,83	114,83	0,00	-80,03	-29,68	21,752
300	42,91	115,10	114,84	0,08	-80,09	-29,37	21,393
400	53,62	128,93	116,65	4,92	-82,89	-12,02	6,565
500	63,51	141,99	120,42	10,79	-85,21	5,98	-2,613
600	71,92	154,33	125,05	17,57	-87,05	24,39	-8,883
700	79,15	165,97	130,08	25,13	-88,45	43,08	-13,451
800	85,32	176,95	135,26	33,36	-89,49	61,94	-16,919
900	90,65	187,31	140,47	42,17	-90,19	80,92	-19,649
1000	95,25	197,11	145,65	51,47	-90,58	99,97	-21,847

По данным измерения теплоты сгорания Чао и Россини [215] вычислили $\Delta H_f^\circ(298)(l) = -95,31$ ккал/моль. Расчет по уравнению (X.1) приводит к $\Delta H_{v,298} = 15,28$ ккал/моль, что дает $\Delta H_f^\circ(298)(g) = -80,03$ ккал/моль. Паркс, Кеннеди, Гейтс, Мосли, Мур и Ренквист [1109] изучали термические свойства в интервале температур от 80 до 300° K и сообщили следующие данные: $T_m = 240,4^\circ$ K, $\Delta H_m^\circ = 4,344$ ккал/моль и $S_{298}^\circ(l) = 77,9$ кал/(моль·°K). Согласно Россини, Питцеру, Арнетту, Брауну и Пиментелу [1248], $T_b = 449,4^\circ$ K. Грин [532] получил на основании энтропии в соответствии с третьим законом термодинамики значение $S_{298}^\circ(g) = 116,1$ кал/(моль·°K) и по методу инкрементов рассчитал $S_{298}^\circ(g) = 114,83$ кал/(моль·°K), а также остальные значения термодинамических функций, принятые здесь.

№ 528. Октиловый спирт, $C_8H_{18}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 130,224

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	48,17	124,14	124,14	0,00	-85,34	-28,05	20,561
300	48,41	124,44	124,15	0,09	-85,41	-27,70	20,178
400	60,56	140,06	126,19	5,55	-88,53	-7,97	4,354
500	71,76	154,81	130,45	12,18	-91,10	12,48	-5,453
600	81,26	168,75	135,69	19,84	-93,14	33,38	-12,159
700	89,43	181,90	141,36	28,39	-94,68	54,60	-17,047
800	96,39	194,31	147,21	37,69	-95,82	76,00	-20,760
900	102,40	206,02	153,10	47,63	-96,57	97,53	-23,683
1000	107,58	217,08	158,95	58,14	-96,98	119,14	-26,037

По данным измерения теплоты сгорания Чао и Россини [215] вычислили $\Delta H_f^\circ(298)(l) = -101,62$ ккал/моль; это значение в сочетании с величиной $\Delta H_{v,298} = 16,28$ ккал/моль, полученной по уравнению (X.1), дает $\Delta H_f^\circ(298)(g) = -85,34$ ккал/моль. Грин [532] рассчитал термодинамические функции, включающие значение $S_{298}^\circ(g) = 124,14$ кал/(моль·°K). Согласно Клайну и Эндрюсу [237], $T_m = 231,7^\circ$ K, а по данным Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248], $T_b = 468,4^\circ$ K.

№ 529. Нониловый спирт, $C_9H_{20}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 144,250

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	53,64	133,45	133,45	0,00	-92,47	-28,25	20,703
300	53,91	133,79	133,46	0,10	-92,54	-27,85	20,289
400	67,50	151,18	135,74	6,18	-95,98	-5,74	3,138
500	80,01	167,63	140,48	13,58	-98,81	17,15	-7,498
600	90,60	183,17	146,32	22,12	-101,04	40,56	-14,772
700	99,71	197,84	152,64	31,65	-102,73	64,31	-20,076
800	107,46	211,67	159,16	42,01	-103,97	88,24	-24,105
900	114,15	224,72	165,73	53,10	-104,78	112,33	-27,276
1000	119,91	237,06	172,25	64,81	-105,20	136,50	-29,830

По данным измерения теплоты сгорания Чао и Россини [215] вычислили $\Delta H_f^\circ(298)(l) = -109,75$ ккал/моль, это значение при $\Delta H_{v,298} = 17,28$ ккал/моль по уравнению (X.1) дает $\Delta H_f^\circ(298)(g) = -92,47$ ккал/моль. Грин [532] рассчитал $S_{298}^\circ(g) = 133,45$ кал/(моль·°K) и все термодинамические функции. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали $T_b = 486,7^\circ$ K.

№ 530. Дециловый спирт, $C_{10}H_{22}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 158,276

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	59,11	142,76	142,76	0,00	-96,38	-25,22	18,486
300	59,41	143,13	142,77	0,11	-96,46	-24,78	18,054
400	74,44	162,31	145,28	6,82	-100,22	-0,30	0,162
500	88,26	180,45	150,52	14,97	-103,30	25,05	-10,950
600	99,94	197,59	156,95	24,39	-105,73	50,95	-18,557
700	109,99	213,77	163,92	34,90	-107,56	77,23	-24,110
800	118,53	229,03	171,11	46,34	-108,89	103,70	-28,328
900	125,90	243,43	178,36	58,57	-109,76	130,35	-31,651
1000	132,24	257,03	185,55	71,48	-110,21	157,07	-34,326

По данным измерения теплоты сгорания Чао и Россини [215] вычислили значение $\Delta H_{298}^{\circ} (l) = -114,66$ ккал/моль, которое в сочетании с величиной $\Delta H_{298}^{\circ} = 18,28$ ккал/моль, рассчитанной по уравнению (X.1), дает $\Delta H_{298}^{\circ} (g) = -96,38$ ккал/моль. Согласно расчетам термодинамических функций, произведенным Грином [532], $S_{298}^{\circ} (g) = 142,76$ кал/(моль·°K) Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали $Tb = 503,2^{\circ} K$.

№ 531. Ундециловый спирт, $C_{11}H_{24}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 172,302

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	64,58	152,07	152,07	0,00	-100,91	-22,81	16,722
300	64,91	152,48	152,08	0,12	-101,00	-22,34	16,271
400	81,38	173,44	154,82	7,45	-105,07	4,53	-2,476
500	96,51	193,27	160,55	16,36	-108,41	32,33	-14,131
600	109,28	212,02	167,58	26,67	-111,04	60,72	-22,117
700	120,27	229,71	175,20	38,16	-113,01	89,53	-27,950
800	129,60	246,39	183,07	50,66	-114,44	118,54	-32,383
900	137,65	262,13	190,99	64,04	-115,36	147,74	-35,873
1000	144,57	277,00	198,85	78,16	-115,83	177,02	-38,687

В соответствии с данными табл. X.8 и значением для исходного углеводорода $\Delta H_{298}^{\circ} (g) = -100,91$ ккал/моль Грин [532] рассчитал значение $S_{298}^{\circ} (g) = 152,07$ кал/(моль·°K) и вычислил величины всех термодинамических функций. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали $Tb = 519^{\circ} K$.

№ 532. Додециловый спирт, $C_{12}H_{26}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 186,328

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	70,05	161,38	161,38	0,00	-105,84	-20,81	15,252
300	70,41	161,82	161,39	0,13	-105,93	-20,29	14,779
400	88,32	184,56	164,37	8,08	-110,33	8,96	-4,894
500	104,76	206,09	170,58	17,76	-113,92	39,21	-17,137
600	118,62	226,44	178,21	28,94	-116,75	70,10	-25,532
700	130,55	245,64	186,48	41,42	-118,87	101,43	-31,666
800	140,67	263,75	195,02	54,99	-120,39	132,99	-36,328
900	149,40	280,84	203,62	69,50	-121,37	164,74	-40,001
1000	156,90	296,98	212,15	84,83	-121,85	196,58	-42,960

Значение $\Delta H_{298}^{\circ} (g) = -105,84$ ккал/моль рассчитано по данным для соответствующего углеводорода с использованием инкремента, приведенного в табл. X.8. Грин [532] вычислил величину $S_{298}^{\circ} (g) = 161,38$ кал/(моль·°K) и произвел полный расчет термодинамических функций. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали $Tb = 534^{\circ} K$.

№ 533. Тридеканол-1, $C_{13}H_{28}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 200,354

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	75,49	170,37	170,37	0,00	-110,77	-18,71	13,712
300	75,87	170,84	170,38	0,15	-110,87	-18,14	13,217
400	95,27	195,37	173,59	8,72	-115,58	13,51	-7,383
500	112,98	218,58	180,29	19,15	-119,43	46,25	-20,214
600	127,97	240,54	188,52	31,22	-122,46	79,67	-29,017
700	140,80	261,25	197,44	44,67	-124,72	113,55	-35,452
800	151,71	280,78	206,65	59,31	-126,34	147,69	-40,344
900	161,12	299,20	215,92	74,96	-127,38	182,02	-44,199
1000	169,30	316,61	225,13	91,49	-127,88	216,46	-47,305

Значения $\Delta H_{298}^{\circ} (g) = -110,77$ ккал/моль, $S_{298}^{\circ} (g) = 170,37$ кал/(моль·°K) и теплоемкости для газообразного состояния рассчитаны по данным для соответствующего углеводорода, с использованием инкрементов, приведенных в табл. X.8. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали $Tb = 549^{\circ} K$.

№ 534. Тетрадеканол-1, $C_{14}H_{30}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 214,380

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	80,96	179,68	179,68	0,00	-115,70	-16,70	12,242
300	81,36	180,19	179,69	0,16	-115,81	-16,10	11,725
400	102,21	206,49	183,13	9,35	-120,84	17,94	-9,802
500	121,23	231,40	190,32	20,55	-124,94	53,13	-23,220
600	137,32	254,96	199,15	33,49	-128,17	89,04	-32,431
700	151,08	277,19	208,72	47,93	-130,57	125,46	-39,167
800	162,77	298,14	218,60	63,64	-132,29	162,13	-44,289
900	172,87	317,91	228,55	80,43	-133,39	199,02	-48,326
1000	181,60	336,59	238,43	98,16	-133,91	236,01	-51,578

Теплоемкости для газообразного состояния, значения $S_{298}^{\circ}(g) = 179,68 \text{ ккал/(моль} \cdot \text{°K)}$ и $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -115,70 \text{ ккал/моль}$ рассчитаны по данным для соответствующего углеводорода с использованием инкрементов, приведенных в табл. X.8. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали $T_b = 564^{\circ} \text{K}$.

№ 535. Пентадеканол-1, $C_{15}H_{32}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 228,406

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	86,42	188,99	188,99	0,00	-120,62	-14,69	10,765
300	86,86	189,53	189,00	0,17	-120,73	-14,04	10,226
400	109,15	217,62	192,68	9,98	-126,08	22,38	-12,226
500	129,47	244,22	200,35	21,94	-130,44	60,01	-26,231
600	146,66	269,38	209,78	35,77	-133,86	98,42	-35,849
700	161,35	293,12	220,00	51,19	-136,41	137,37	-42,886
800	173,84	315,50	230,55	67,96	-138,23	176,58	-48,237
900	184,61	336,61	241,18	85,89	-139,38	216,03	-52,456
1000	193,90	356,55	251,73	104,83	-139,92	255,58	-55,854

Значения $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -120,62 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}^{\circ}(g) = 188,99 \text{ ккал/(моль} \cdot \text{°K)}$ и теплоемкости для газообразного состояния рассчитаны по данным для соответствующего углеводорода с использованием инкрементов, приведенных в табл. X.8. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали $T_b = 578^{\circ} \text{K}$.

№ 536. Гексадеканол-1, $C_{16}H_{34}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 242,432

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	91,89	198,30	198,30	0,00	-125,54	-12,67	9,288
300	92,35	198,87	198,31	0,18	-125,66	-11,98	8,726
400	116,09	228,74	202,22	10,62	-131,33	26,81	-14,650
500	137,72	257,03	210,38	23,33	-135,94	66,90	-29,241
600	156,00	283,80	220,41	38,04	-139,56	107,81	-39,267
700	171,63	309,05	231,28	54,44	-142,25	149,28	-46,604
800	184,90	332,86	242,51	72,28	-144,17	191,03	-52,185
900	196,36	355,31	253,81	91,36	-145,38	233,03	-56,586
1000	206,30	376,53	265,03	111,51	-145,93	275,14	-60,130

Паркс, Кеннеди, Гейтс, Мосли, Мур и Ренквист [1109] изучали термические свойства в интервале температур 80–300° K и полу-

или следующие данные: $T_t = 307^{\circ} \text{K}$, $\Delta H_t^{\circ} = 3,976 \text{ ккал/моль}$, $T_m = 321,8^{\circ} \text{K}$, $\Delta H_m^{\circ} = 8,461 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}^{\circ}(s) = 108,0 \text{ ккал/(моль} \cdot \text{°K)}$, $S_{298}^{\circ}(l) = 145,0 \text{ ккал/(моль} \cdot \text{°K)}$. Теплоемкости для газообразного состояния, а также величины $S_{298}^{\circ}(g) = 198,30 \text{ ккал/(моль} \cdot \text{°K)}$ и $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -125,54 \text{ ккал/моль}$ рассчитаны по данным для соответствующего углеводорода с использованием инкрементов, приведенных в табл. X.8. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [248] отобрали $T_b = 592^{\circ} \text{K}$.

№ 537. Гептадеканол-1, $C_{17}H_{36}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 256,458

°K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	97,36	207,61	207,61	0,00	-130,47	-10,67	7,818
300	97,84	208,22	207,62	0,19	-130,60	-9,93	7,235
400	123,03	239,87	211,76	11,25	-136,58	31,24	-17,069
500	145,97	269,85	220,41	24,73	-141,46	73,78	-32,248
600	165,34	298,22	231,04	40,32	-145,27	117,18	-42,682
700	181,91	324,99	242,56	57,70	-148,10	161,18	-50,320
800	195,97	350,22	254,46	76,61	-150,12	205,48	-56,131
900	208,11	374,01	266,43	96,83	-151,39	250,03	-60,713
1000	218,60	396,50	278,33	118,18	-151,96	294,70	-64,403

Значение $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -130,47 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}^{\circ}(g) = 207,61 \text{ ккал/(моль} \cdot \text{°K)}$ и теплоемкость для газообразного состояния рассчитаны по данным для соответствующего углеводорода с использованием инкрементов, приведенных в табл. X.8. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали $T_b = 605^{\circ} \text{K}$.

№ 538. Октадеканол-1, $C_{18}H_{38}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 270,484

°K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	102,82	216,92	216,92	0,00	-135,39	-8,65	6,340
300	103,34	217,56	216,93	0,20	-135,52	-7,87	5,735
400	129,97	251,00	221,31	11,88	-141,83	35,68	-19,493
500	154,21	282,67	230,44	26,12	-146,96	80,67	-35,258
600	174,68	312,64	241,67	42,59	-150,97	126,57	-46,100
700	192,18	340,92	253,84	60,96	-153,95	173,09	-54,039
800	207,03	367,57	266,41	80,93	-156,06	219,93	-60,079
900	219,85	392,71	279,06	102,29	-157,38	267,04	-64,842
1000	230,90	416,46	291,63	124,84	-157,98	314,27	-68,679

Теплоемкости для газообразного состояния, а также величины $S_{298}^{\circ}(g) = 216,92 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$ и $\Delta H_f^{\circ}(g) = -135,39 \text{ ккал/моль}$ рассчитаны по данным для соответствующего углеводорода с использованием инкрементов, приведенных в табл. X.8. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали $T_b = 618^{\circ} \text{ K}$.

№ 539. Понадеканол-1, $C_{19}H_{40}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 284,510

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	108,29	226,23	226,23	0,00	-140,32	-6,64	4,870
300	108,83	226,91	226,24	0,21	-140,46	-5,83	4,210
400	136,91	262,12	230,85	12,51	-147,08	40,11	-21,912
500	162,46	295,49	240,47	27,52	-152,47	87,55	-38,265
600	184,03	327,06	252,30	44,87	-156,68	135,94	-49,514
700	202,46	356,85	265,13	64,21	-159,79	184,99	-57,754
800	218,10	384,93	278,36	85,26	-162,01	234,37	-64,024
900	231,60	411,42	291,69	107,76	-163,39	284,03	-68,909
1000	243,30	436,44	304,93	131,52	-164,00	333,82	-72,950

Значения $\Delta H_f^{\circ}(g) = -140,32 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}^{\circ}(g) = 226,23 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$ и теплоемкости для газообразного состояния рассчитаны по данным для соответствующего углеводорода с использованием инкрементов, приведенных в табл. X.8. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали $T_b = 631^{\circ} \text{ K}$.

№ 540. Эйкозанол-1, $C_{20}H_{42}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 298,536

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	113,76	235,54	235,54	0,00	-145,25	-4,64	3,400
300	114,32	236,25	235,55	0,22	-145,40	-3,78	2,751
400	143,85	273,25	240,39	13,15	-152,34	44,53	-24,331
500	170,71	308,31	250,50	28,91	-157,98	94,43	-41,271
600	193,38	341,49	262,93	47,14	-162,38	145,32	-52,929
700	212,74	372,79	276,41	67,47	-165,64	196,89	-61,470
800	229,17	402,29	290,32	89,59	-167,96	248,81	-67,963
900	243,35	430,12	304,32	113,23	-169,39	301,03	-73,096
1000	255,70	456,42	318,23	138,20	-170,02	353,37	-77,226

Теплоемкости для газообразного состояния, а также величины $\Delta H_f^{\circ}(g) = -145,25 \text{ ккал/моль}$ и $S_{298}^{\circ}(g) = 235,54 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$ рассчитаны по данным для соответствующего углеводорода с использованием инкрементов, приведенных в табл. X.8. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали $T_b = 643^{\circ} \text{ K}$.

Ненасыщенные спирты. Таблицы для состояния идеального газа

№ 541. Аллиловый спирт, C_3H_6O (состояние идеального газа).
Мол. вес 58,078

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	18,17	73,51	73,51	0,00	-31,55	-17,03	12,481
300	18,25	73,63	73,52	0,04	-31,57	-16,94	12,340
400	22,81	79,52	74,29	2,10	-32,69	-11,88	6,492
500	26,79	85,05	75,89	4,58	-33,62	-6,57	2,871
600	30,11	90,23	77,85	7,43	-34,39	-4,09	0,396
700	32,91	95,09	79,97	10,59	-35,00	4,52	-1,410
800	35,28	99,64	82,15	14,00	-35,48	10,19	-2,784
900	37,35	103,92	84,33	17,63	-35,85	15,92	-3,867
1000	39,06	107,95	86,50	21,46	-36,11	21,70	-4,742

Долливер, Грешам, Кистяковский, Смит и Воган [334] измеряли теплоту гидрирования аллилового спирта до пропилового спирта и получили данные, позволившие рассчитать $\Delta H_f^{\circ}(g) = -31,55 \text{ ккал/моль}$ для аллилового спирта. Кубе, Харрисон и Пеннингтон [777] произвели отнесение основных частот колебаний высот барьеров и рассчитали значение термодинамических функций. По сообщению этих исследователей, $S_{298}^{\circ}(g) = 73,51 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$.

Двухатомные спирты. Таблица для состояния идеального газа

№ 542. Этиленгликоль, $C_2H_6O_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 62,068

Паркс, Уест, Нейлор, Фуджи и Мак-Клейн [1121] измеряли теплоту сгорания и установили, что $\Delta H_f^{\circ}(l) = 108,73 \text{ ккал/моль}$. На основании отобранных Сталлом [1432] данных по давлению пара рассчитано значение $\Delta H_v^{\circ} = 15,68 \text{ ккал/моль}$, которое приводит к величине $\Delta H_f^{\circ}(g) = -93,05 \text{ ккал/моль}$. Паркс, Келли и Хафф-

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	23,20	77,33	77,33	0,00	-93,05	-72,77	53,337
300	23,28	77,48	77,34	0,05	-93,07	-72,64	52,917
400	27,06	84,71	78,30	2,57	-93,83	-65,71	35,901
500	30,10	91,08	80,23	5,43	-94,43	-58,61	25,617
600	32,72	96,81	82,52	8,58	-94,90	-51,40	18,721
700	35,00	102,03	84,94	11,97	-95,24	-44,12	13,775
800	36,90	106,84	87,38	15,57	-95,48	-36,81	10,054
900	38,00	111,24	89,79	19,31	-95,66	-29,46	7,153
1000	39,88	115,33	92,14	23,19	-95,76	-22,09	4,827

ман [1108] измеряли теплоемкость в интервале температур от 90 до 298° K и получили следующие результаты:

$S_{298}^{\circ}(l)$	39,9 кал/(моль·°K)
$\Delta S_v, 15\ 680/298$	52,59
ΔS (сжатие), $-R \ln(760/0,098)$	-17,80
ΔS (неидеальность газа) (пренебрежимо мало)	0,00
S_{298}° (идеальный газ)	74,69 кал/(моль·°K)

Дяткина [361] произвела отнесение основных частот колебаний рассчитала термодинамические функции и установила, что $S_{298}^{\circ}(g) = 77,33$ кал/(моль·°K). С этим значением хорошо согласуются величины $S_{298}^{\circ}(g) = 77,30$ кал/(моль·°K) и $S_{298}^{*} = -0,59$ кал/(моль·°K) рассчитанные по данным для соответствующего углеводорода. Неопределенности в определении теплоемкости при температурах ниже 90° K и экстраполяции давления паров при 298° K говорят в пользу принятого значения, установленного Дяткиной.

Циклоалканола. Таблица для состояния идеального газа

№ 543. Циклогексанол. C₆H₁₂O (состояние идеального газа).
Мол. вес 100,156

Паркс, Мосли и Петерсон [1116] и Семлерс и Суннер [1331] измеряли теплоту сгорания и получили данные, согласующиеся в пределах ошибки эксперимента. По данным последней группы исследователей, $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -83,22$ ккал/моль, откуда следует, что $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -70,40$ ккал/моль. Келли [735] изучал низкотем-

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	30,41	78,32	78,32	0,00	-70,40	-28,18	20,654
300	30,59	78,51	78,33	0,06	-70,45	-27,92	20,338
400	41,14	88,78	79,65	3,65	-72,86	-13,36	7,297
500	50,90	99,03	82,51	8,27	-74,71	1,74	-0,762
600	59,29	109,07	86,10	13,79	-76,04	17,16	-6,251
700	66,33	118,76	90,08	20,08	-76,89	32,77	-10,232
800	72,18	128,01	94,25	27,01	-77,35	48,47	-13,239
900	77,06	136,80	98,49	34,48	-77,48	64,21	-15,591
1000	81,13	145,14	102,74	42,40	-77,31	79,96	-17,474

пературные свойства и установил, что $T_t = 263,5^{\circ}$ K, $\Delta H_t = 1,960$ ккал/моль, $\Delta H_m = 0,406$ ккал/моль и $S_{298}^{\circ}(l) = 47,7$ кал/(моль·°K). Тиммерманс [1501] дает три значения для точки плавления; принята величина $T_m = 296,6^{\circ}$ K. На основании обзора данных по давлению пара Сталл [1432] пришел к выводу, что $T_b = 434^{\circ}$ K; согласно Метюсу и Феландту [941], $\Delta H_{v,434} = 10,875$ ккал/моль. Оценка среднего значения $\Delta C_p = 14,5$ кал/(моль·°K) в температурном интервале 434 — 298° K дает $\Delta H_{v,298} = 12,820$ ккал/моль. Эти данные приводят к следующим значениям:

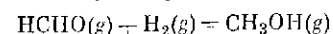
$S_{298}^{\circ}(l)$	47,70 кал/(моль·°K)
$\Delta S_v, 12\ 820/298,15$	43,00
ΔS (сжатие), $-R \ln(760/1,5)$	-12,38
$S_{298}^{\circ}(g)$	78,32 кал/(моль·°K)

Теплоемкость газообразного циклогексанола рассчитана как сумма теплоемкостей циклогексана и этилового спирта за вычетом теплоемкости этана.

Альдегиды. Таблицы для состояния идеального газа

№ 544. Формальдегид, CH₂O (состояние идеального газа).
Мол. вес 30,026

По данным измерения теплоты сгорания Вартенберг и Лернер-Штейнберг [1573] вычислили $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -27,7$ ккал/моль. Ньютон и Додж [1062] измеряли параметры равновесия реакции



T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	8,46	52,29	52,29	0,00	-27,70	-26,27	19,258
300	8,47	52,35	52,30	0,02	-27,71	-26,27	19,133
400	9,38	54,90	52,64	0,91	-28,11	-25,72	14,053
500	10,46	57,11	53,32	1,90	-28,50	-25,08	10,961
600	11,52	59,12	54,12	3,00	-28,86	-24,36	8,873
700	12,49	60,97	54,97	4,20	-29,17	-23,59	7,363
800	13,37	62,69	55,83	5,50	-29,44	-22,77	6,220
900	14,16	64,31	56,68	6,88	-29,67	-21,92	5,323
1000	14,81	65,84	57,52	8,33	-29,86	-21,05	4,599

и установили, что при 197° С $Kp = 2090$, откуда $\Delta G_{470}^{\circ}/470 = -15,19$ ккал/(моль·°K). Мы рассчитали величину $\Delta H_{r,298} = 470 (-15,19 - 26,59) = -19,637$ ккал, используя следующие функции энергии Гиббса:

Соединение	$\frac{(G_{470}-H_{298})}{470}$, кал/(моль·°K)	Литература
НСНО (g)	53,09	Пиллаи и Клевеленд [1149]
H ₂ (g)	31,84	Россини и др. [1248]
СН ₃ ОН (g)	58,34	Иваш, Ли и Питцер [674]
$\Delta(G_{470}-H_{298})/470$	-26,59	

Из значения $\Delta H_{f,298}^{\circ} = -48,080$ ккал/моль для СН₃ОН (g) мы рассчитали для формальдегида $\Delta H_{f,298}^{\circ}(g) = -28,44$ ккал/моль. На основании анализа этих данных мы отобрали для НСНО (g) значение $\Delta H_{f,298}^{\circ}(g) = -28,0 \pm 1,5$ ккал/моль. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] на основании литературных данных отобрали $T_m = 154,9^{\circ}$ К и $T_b = 253,9^{\circ}$ К, при этом $\Delta H_v = 5,85$ ккал/моль. Пиллаи и Клевеленд [1149] рассмотрели спектроскопические данные для некоторых плоских молекул XYZ₂ и рассмотрели пять молекул этого типа, в том числе НСНО и DCDO. Они использовали результаты Блау и Нилсена [143] по определению частот в инфракрасной области спектра. Структурные параметры, взятые из измерений Лоуренса и Страндберга [852] в микроволновой области, согласуются с соответствующими результатами измерений Эрландсона [382]. Пиллаи и Клевеленд [1149] рассчитали значе-

ния термодинамических параметров газообразного состояния; из их значений мы отобрали $S_{298}^{\circ}(g) = 52,29$ ккал/(моль·°K). Эта величина энтропии всего лишь на 0,03 ккал/(моль·°K) больше значения, рассчитанного несколько лет назад Томпсоном [1487].

№ 545. Ацетальдегид, С₂H₄O (состояние идеального газа).
Мол. вес 44,052

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	13,06	63,15	63,15	0,00	-39,76	-31,86	23,353
300	13,11	63,24	63,16	0,03	-39,78	-31,81	23,174
400	15,73	67,37	63,70	1,47	-40,57	-29,03	15,862
500	18,27	71,16	64,82	3,17	-41,27	-26,07	11,393
600	20,52	74,69	66,17	5,12	-41,86	-22,97	8,366
700	22,50	78,01	67,63	7,27	-42,35	-19,78	6,176
800	24,20	81,12	69,12	9,61	-42,74	-16,53	4,516
900	25,68	84,06	70,62	12,10	-43,05	-13,24	3,214
1000	26,96	86,84	72,10	14,74	-43,27	-9,91	2,165

Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] на основании старых литературных данных о теплотах сгорания и последних работ Долливера, Грешама, Кистяковского, Смита и Вогана [334] по определению теплоты гидрирования до этилового спирта сообщили следующие значения: $\Delta H_{f,298}^{\circ}(g) = -39,76$ ккал/моль, $T_m = 155^{\circ}$ К, $\Delta H_m = 0,770$ ккал/моль и $T_b = 293,3^{\circ}$ К. По данным измерений Колемана и Де Вриса [245], $\Delta H_{v,293,3} = 6,145$ ккал/моль. Отнесения частот колебаний, первоначально использованные Смитом [1381], были пересмотрены Питцером и Уелтнером [1167] для получения лучшего согласия с данными Райдила [1227] по изучению равновесного гидрирования, а также с результатами измерения теплосмкостей в газообразном состоянии, полученными Колеманом и Де Врисом [245]. Питцер и Уелтнер [1167] получили данные, лучше всего согласующиеся со значением потенциального барьера внутреннего вращения 1,00 ккал/моль; они рассчитали термодинамические функции и установили, что $S_{298}^{\circ}(g) = 63,15$ ккал/(моль·°K). Более поздние работы Лина и Килба [874] в микроволновой области показали, что потенциальный барьер внутреннего вращения равен $1,14 \pm 0,06$ ккал/моль; в то же время из инфракрасных спектров Фейтли и Миллер [407] определили потенциальный барьер, равный $1,18 \pm 0,15$ ккал/моль. Эванс и Беристейн [394] изучали спектры более тщательно и внесли исправления в отнесение частот колебаний, но это не привело к значительным изменениям в величинах термодинамических функций.

№ 546. Пропионовый альдегид, C_3H_6O (состояние идеального газа).

Мол. вес 58,078

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	18,80	72,83	72,83	0,00	-45,90	-31,18	22,851
300	18,87	72,95	72,84	0,04	-45,92	-31,09	22,644
400	23,09	78,97	73,63	2,14	-47,00	-25,97	14,188
500	26,89	84,54	75,26	4,64	-47,91	-20,60	9,005
600	30,22	89,74	77,24	7,50	-48,66	-15,07	5,489
700	33,03	94,62	79,38	10,67	-49,26	-9,42	2,941
800	35,45	99,19	81,57	14,10	-49,73	-3,70	1,011
900	37,55	103,49	83,77	17,75	-50,08	2,08	-0,505
1000	39,27	107,54	85,95	21,59	-50,32	7,89	-1,725

По данным измерения теплоты сгорания Тьеббес [1508] вычислил $\Delta Hf_{298}^\circ(l) = -52,95$ ккал/моль и $\Delta Hf_{298}^\circ(g) = -45,9$ ккал/моль. На основании данных о строении молекулы и спектроскопической информации Чермин [221] определил значение $S_{298}^\circ(g) = 72,83$ ккал/(моль·°K), которое и принято здесь наряду с данными о теплоемкости в газообразном состоянии. Мёллер [1019] также изучал спектр и рассчитал значение теплоемкости, которое оказалось на несколько процентов ниже значения, определенного Чермином. Согласно измерениям Тьеббеса [1508], $T_m = 170^\circ$ K и $T_b = 321^\circ$ K.

№ 547. Масляный альдегид, $C_7H_{14}O$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 72,104

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	24,52	82,44	82,44	0,00	-49,00	-27,43	20,105
300	24,61	82,60	82,45	0,05	-49,03	-27,30	19,885
400	30,20	90,46	83,48	2,80	-50,40	-19,84	10,837
500	35,20	97,74	85,61	6,07	-51,56	-12,06	5,269
600	39,60	104,56	88,21	9,82	-52,51	-4,07	1,481
700	43,40	110,96	91,01	13,97	-53,24	4,07	-1,271
800	46,60	116,97	93,88	18,48	-53,80	12,29	-3,358
900	49,30	122,61	96,76	23,27	-54,20	20,58	4,998
1000	51,70	127,94	99,62	28,33	-54,45	28,91	6,319

По данным измерения теплоты сгорания Нихолсон [1065] определил значение, хорошо согласующееся с результатами измерений Тьеббеса [1508], согласно которым $\Delta Hf_{298}^\circ(l) = -57,06$ ккал/моль

и $\Delta Hf_{298}^\circ(g) = -49,0$ ккал/моль. Паркс, Кеннеди, Гейтс, Мосли, Мур и Рейквист [1409] измеряли теплоемкости в температурном интервале от 80 до 300° K и получили следующие результаты: $T_m = 176,8^\circ$ K, $\Delta H_m = 2,654$ ккал/моль и $S_{298}^\circ(l) = 59,0$ ккал/(моль·°K). На основании этих данных Чермин [221] получил значение $S_{298}^\circ(g) = 82,44$ ккал/(моль·°K) и рассчитал остальные термодинамические функции для состояния идеального газа. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали $T_b = 348,02^\circ$ K.

№ 548. Валериановый альдегид, $C_{11}H_{20}O$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 86,130

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	29,96	91,53	91,53	0,00	-54,45	-25,88	18,968
300	30,08	91,72	91,54	0,06	-54,49	-25,70	18,724
400	37,10	101,35	92,80	3,43	-56,18	-15,84	8,654
500	43,40	110,32	95,42	7,46	-57,60	-5,59	2,441
600	49,00	118,74	98,61	12,08	-58,74	4,92	-1,793
700	53,70	126,66	102,06	17,22	-59,61	15,61	-4,874
800	57,70	134,10	105,60	22,80	-60,27	26,40	-7,211
900	61,10	141,09	109,16	28,74	-60,72	37,26	-9,048
1000	64,00	147,69	112,69	35,00	-60,99	48,18	-10,528

С использованием инкрементов, приведенных в табл. X.8, получены значения $\Delta Hf_{298}^\circ(g) = -54,45$ ккал/моль и $S_{298}^\circ(g) = 91,53$ ккал/(моль·°K). Теплоемкость для состояния идеального газа определена Чермином [221]. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали $T_m = 182^\circ$ K и $T_b = 375,7^\circ$ K.

№ 549. Гексановый альдегид (гексаль), $C_6H_{12}O$

(состояние идеального газа). Мол. вес 100,156

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	35,43	101,07	101,07	0,00	-59,37	-23,93	17,541
300	35,57	101,29	101,08	0,07	-59,41	-23,71	17,275
400	44,00	112,70	102,57	4,06	-61,43	-11,49	6,280
500	51,70	123,37	105,68	8,85	-63,10	1,19	-0,520
600	58,30	133,39	109,47	14,36	-64,44	14,17	-5,162
700	63,90	142,81	113,57	20,47	-65,46	27,36	-8,543
800	68,70	151,66	117,78	27,11	-66,22	40,67	-11,110
900	72,90	160,00	122,01	34,20	-66,73	54,07	-13,129
1000	76,40	167,87	126,21	41,67	-67,01	67,52	-14,756

С использованием инкрементов, приведенных в табл. X.8, получены значения $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -59,37$ ккал/моль и $S_{298}^{\circ}(g) = 101,07$ кал/(моль·°К). Теплоемкость для состояния идеального газа определена Чермином [221]. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали $Tm = 217^{\circ}\text{K}$ и $Tb = 401,9^{\circ}\text{K}$.

№ 550. Эпантиловый альдегид (гепталь), $\text{C}_7\text{H}_{14}\text{O}$
(состояние идеального газа). Мол. вес 114,182

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	40,89	110,31	110,31	0,00	-63,40	20,71	15,183
300	41,07	110,60	110,35	0,08	-63,15	20,45	14,900
400	51,00	123,80	112,08	4,69	-65,48	-5,85	3,197
500	59,90	136,16	115,67	10,25	-67,41	9,29	-4,058
600	67,70	147,79	120,06	16,64	-68,94	24,77	-9,021
700	74,20	158,72	124,81	23,74	-70,10	40,49	-12,640
800	79,80	169,00	129,70	31,45	-70,96	56,34	-15,390
900	84,60	178,69	134,61	39,67	-71,53	72,29	-17,554
1000	88,70	187,82	139,48	48,34	-71,83	88,30	-19,298

По данным измерения теплоты сгорания Пихолсон [1065] вычислил величину $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -74,5$ ккал/моль, которая приводит к значению $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -63,1$ ккал/моль. Паркс, Кеннеди, Гейтс, Мосли, Мур и Ренквист [1109] измеряли теплоемкость в температурном интервале 80—300° K и получили следующие результаты: $Tm = 229,8^{\circ}\text{K}$, $\Delta Hm = 5,637$ ккал/моль и $S_{298}^{\circ}(l) = 83,3$ кал/(моль·°K). На основании данных о давлении пара, полученных Сталлом [1432], рассчитано значение $\Delta Hv_{298} = 11,40$ ккал/моль. Чермин [221] обобщил имеющиеся данные и рассчитал термодинамические функции, в том числе $S_{298}^{\circ}(g) = 110,34$ кал/(моль·°K), что хорошо согласуется со значением энтропии, рассчитанным на основании третьего закона термодинамики. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали $Tb = 425,8^{\circ}\text{K}$.

№ 551. Октаналь, $\text{C}_8\text{H}_{16}\text{O}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 128,208

Функции теплоемкости определены Чермином [221]. С использованием инкрементов, приведенных в табл. X.8, получены значения $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -69,23$ ккал/моль и $S_{298}^{\circ}(g) = 119,66$ кал/(моль·°K). Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали $Tm = 246^{\circ}\text{K}$ и $Tb = 446^{\circ}\text{K}$.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	46,36	119,66	119,66	0,00	-69,23	-19,91	14,594
300	46,56	119,95	119,67	0,09	-69,29	-19,61	14,284
400	57,90	134,92	121,63	5,32	-71,94	-2,63	1,436
500	68,20	148,98	125,71	11,64	-74,12	14,96	-6,539
600	77,00	162,21	130,70	18,91	-75,85	32,94	-11,997
700	84,50	174,66	136,40	27,00	-77,16	51,19	-15,980
800	90,90	186,37	141,66	35,77	-78,11	69,57	-19,006
900	96,40	197,40	147,25	45,15	-78,73	88,08	-21,389
1000	101,00	207,80	152,79	55,02	-79,05	106,65	-23,307

№ 552. Понаналь, $\text{C}_9\text{H}_{18}\text{O}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 142,234

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	51,82	128,97	128,97	0,00	-74,16	-17,91	13,124
300	52,06	129,30	128,98	0,10	-74,22	-17,56	12,792
400	64,80	146,05	131,17	5,95	-77,19	1,80	-0,983
500	76,40	161,78	135,74	13,03	-79,64	21,84	-9,546
600	86,40	176,62	141,33	21,18	-81,57	42,31	-15,412
700	94,80	190,58	147,38	30,25	-83,01	63,09	-19,697
800	101,90	203,72	153,61	40,09	-84,06	84,02	-22,952
900	108,10	216,09	159,87	50,60	-84,74	105,09	-25,517
1000	113,40	227,76	166,08	61,68	-85,08	126,21	-27,583

Функции теплоемкости определены Чермином [221]. С использованием инкрементов, приведенных в табл. X.8., получены значения $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -74,16$ ккал/моль и $S_{298}^{\circ}(g) = 128,97$ кал/(моль·°K). Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали $Tm = 255^{\circ}\text{K}$ и $Tb = 467^{\circ}\text{K}$.

№ 553. Деканаль, $\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{O}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 156,260

Функции теплоемкости рассчитаны Чермином [221]. С использованием инкрементов, приведенных в табл. X.8, получены значения

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	57,29	138,28	138,28	0,00	-79,09	-15,90	11,654
300	57,55	138,64	138,29	0,11	-79,16	-15,51	11,300
400	71,80	157,18	140,72	6,59	-82,45	6,23	-3,402
500	84,70	174,62	145,77	14,43	-85,14	28,72	-12,551
600	95,70	191,06	151,96	23,46	-87,26	51,68	-18,825
700	105,00	206,53	158,67	33,51	-88,86	74,99	-23,410
800	113,00	221,09	165,57	44,42	-90,01	98,46	-26,896
900	119,90	234,80	172,51	56,07	-90,74	122,07	-29,642
1000	125,70	247,75	179,39	68,36	-91,10	145,76	-31,854

$\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -79,09$ ккал/моль и $S_{298}^{\circ}(g) = 138,28$ кал/(моль · °K).
Россини, Шитцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали $T_m = 267^{\circ}\text{K}$ и $T_b = 486^{\circ}\text{K}$.

Кетоны. Таблицы для состояния идеального газа

№ 554. Ацетон, C₃H₆O (состояние идеального газа).
Мол. вес 58,078

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	17,90	70,49	70,49	0,00	52,00	-36,58	26,811
300	17,97	70,61	70,50	0,04	-52,02	-36,48	26,577
400	22,00	76,33	71,25	2,04	-53,20	-31,12	17,001
500	25,89	81,67	72,80	4,44	-54,22	-25,48	11,135
600	29,34	86,70	74,70	7,20	-55,07	-19,65	7,156
700	32,34	91,45	76,76	10,29	-55,74	-13,69	4,273
800	34,93	95,94	78,88	13,65	-56,28	-7,64	2,088
900	37,19	100,19	81,01	17,26	-56,67	-1,54	0,373
1000	39,15	104,21	83,13	21,08	-56,93	4,61	-1,007

На основании результатов измерения теплоты испарения и теплоемкости пара Пеннингтон и Кобе [1135] сделали отнесения основных частот колебаний и установили термодинамические свойства ацетона в состоянии идеального газа, в том числе определили $S_{298}^{\circ}(g) = 70,49$ кал/(моль · °K). Полученная этими исследователями величина $\Delta H_v = 6,952$ ккал/моль при $T_b = 329,28^{\circ}\text{K}$ и расчетное зна-

чение энтропии $S_{298}^{\circ}(g) = 70,49$ кал/(моль · °K) хорошо согласуются с полученными на основании третьего закона термодинамики данными Келли [734], по сообщению которого $S_{298}^{\circ}(l) = 47,9$ кал/(моль · °K), $T_m = 176,61^{\circ}\text{K}$ и $\Delta H_m = 1,366$ ккал/моль. Майлс и Хант [1000] определили энтальпию сгорания пара, применив метод калориметрии пламени. После внесения небольших поправок на изменение в атомных весах и энтальпию сгорания водорода получено значение $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -51,74$ ккал/моль. Теплоту гидрирования паров ацетона при 355°K измеряли Долливер, Грешам, Кистяковский, Смит и Воган [334]. Полученные этими исследователями результаты в сочетании с точными значениями для изопропилового спирта приводят к величине $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -52,07$ ккал/моль. В качестве третьего источника информации служат данные, полученные Колбом и Баруеллом [791] при изучении системы ацетон — водород — изопропиловый спирт. На основании этих данных получено значение $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -52,03$ ккал/моль (метод расчета описан на стр. 78). Приятно округленное среднее значение, равное $-52,00$ ккал/моль. Дополнительные данные, полученные при изучении той же системы, приведены в работе Бакли и Херингтона [180]. Новейшие данные хорошо согласуются с отображенными нами. По данным Кобе и Линна [780], $T_c = 508,7^{\circ}\text{K}$ и $P_c = 46,6$ атм.

№ 555. Бутанон-2, C₄H₈O (состояние идеального газа).
Мол. вес 72,104

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	24,59	80,81	80,81	0,00	-56,97	-34,91	25,591
300	24,68	80,97	80,82	0,05	-57,00	-34,78	25,335
400	29,81	88,77	81,85	2,78	-58,39	-27,15	14,834
500	34,76	95,97	83,96	6,01	-59,59	-19,20	8,392
600	39,09	102,70	86,53	9,71	-60,58	-11,03	4,017
700	42,83	109,01	89,29	13,81	-61,37	-2,70	0,843
800	46,08	114,95	92,13	18,26	-61,99	5,72	-1,562
900	48,90	120,54	94,98	23,01	-62,43	14,21	-3,451
1000	51,33	125,82	97,80	28,02	-62,72	22,75	-4,973

Зинке и Оттинг [1358] измеряли энтальпию сгорания и термические свойства в условиях низких температур; по их данным, $T_{tr} = 186,48^{\circ}\text{K}$, $\Delta H_m^{\circ} = 2,017$ ккал/моль, $S_{298}^{\circ}(l) = 57,08$ кал/(моль · °K) и $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -65,31$ ккал/моль. Зинке и Оттинг на основании собственных данных и данных, полученных Никерсоном, Кобе и Мак-Кетгой [1068] при изучении теплоемкости пара и энтальпии испарения, установили барьеры внутреннего вращения по методу

Скотта и Мак-Каллоха [1317]. Значения этих барьеров использовали при расчетах термодинамических функций. На основании величины $\Delta H\nu_{298}^\circ = 8,34$ ккал/моль, установленной Никерсоном и др. [1068], получено значение $\Delta Hf_{298}^\circ(g) = -56,97$ ккал/моль. Зинке и Оттинг [1358] приводят ссылки на предшествующие работы по изучению этого соединения. Бакли и Херингтон [180] определили константы равновесия реакции гидрирования бутанола-2 до бутанола-2. Результаты этих исследователей прекрасно согласуются с принятыми нами значениями. Ссылки на более ранние работы по изучению равновесной реакции гидрирования приведены в работе Бакли и Херингтона. Согласно Никерсону и др. [1068], $T_b = 352,61^\circ\text{K}$, при этом $\Delta H\nu = 7,475$ ккал/моль. По данным измерений Кубе, Кроуфорда и Стефенсона [773], $T_c = 535,7^\circ\text{K}$ и $P_c = 41$ атм.

№ 556. Пентанон-2, $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 86,130

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	(p°)	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	28,91	89,91	89,91	0,00	-61,82	-32,76	24,016
300	29,06	90,09	89,92	0,06	-61,86	-32,59	23,738
400	36,42	99,49	91,15	3,34	-63,64	-22,55	12,319
500	42,80	108,31	93,71	7,31	-65,12	-12,10	5,288
600	48,32	116,62	96,84	11,87	-66,32	-1,38	0,504
700	53,06	124,43	100,23	16,95	-67,26	9,52	-2,973
800	57,13	131,79	103,72	22,46	-67,98	20,53	-5,609
900	60,62	138,72	107,23	28,35	-68,48	31,64	-7,682
1000	63,61	145,27	110,71	34,57	-68,80	42,79	-9,351

Теплоемкость пара и энтальпию испарения пентанола-2 и бутанола-2 измеряли Никерсон, Кубе и Мак-Кетта [1068]. Эти исследователи изучали молекулярную структуру, спектроскопические данные и барьеры внутреннего вращения; они рассчитали таблицы термодинамических функций для бутанола-2, которые позже были модифицированы Зинке и Оттингом [1358]. Первая группа исследователей на основании результатов измерений определила значение для инкремента группы $-\text{CH}_2-$, необходимого для расчетов термодинамических функций высших членов ряда метилкетонов. Приведенные здесь значения для пентанола-2 получены с использованием этих инкрементов и величин для бутанола-2, полученных Зинке и Оттингом [1358]; по этим данным для пентанола-2 $S_{298}^\circ(g) = 89,91$ ккал/(моль·°K). Значения теплоемкости, полученные Никерсоном, Кубе и Мак-Кеттой [1068], не требуют исправлений. Если из энтальпии образования пентана в газообразном состоянии вычесть

энтальпию образования газообразного бутана, то получим инкремент для группы $-\text{CH}_2-$ $\Delta Hf_{298}^\circ(g) = (-35,00) - (-30,15) = -4,85$ ккал/моль. Использование этого инкремента и значений для бутанола-2, полученных Зинке и Оттингом [1358], дает для пентанола-2 величину $\Delta Hf_{298}^\circ(l) = -71,70$ ккал/моль и $\Delta Hf_{298}^\circ(g) = -61,82$ ккал/моль, $\Delta H\nu_{298} = 9,885$ ккал/моль и $\Delta H\nu = 7,980$ ккал/моль при $T_b = 375,42^\circ\text{K}$ по измерениям Никерсона, Кубе и Мак-Кетты [1068].

Ненасыщенные кетоны. Таблица для состояния идеального газа

№ 557. Кетен, $\text{C}_2\text{H}_2\text{O}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 42,036

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	(p°)	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	12,37	57,79	57,79	0,00	-14,60	-14,41	10,561
300	12,41	57,87	57,80	0,03	-14,60	-14,41	10,495
400	14,22	61,70	58,30	1,36	-14,81	-14,31	7,817
500	15,68	65,03	59,32	2,86	-15,02	-14,16	6,188
600	16,89	68,00	60,53	4,49	-15,22	-13,97	5,088
700	17,91	70,68	61,79	6,23	-15,42	-13,74	4,290
800	18,80	73,13	63,06	8,07	-15,60	-13,49	3,686
900	19,57	75,39	64,30	9,99	-15,78	-13,22	3,209
1000	20,25	77,49	65,52	11,98	-15,93	-12,92	2,824

Райс и Гринберг [1223] измеряли теплоту реакции кетена с разбавленным водным раствором едкого натра и с рядом алифатических спиртов. На основании полученных этими исследователями данных Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] определили значение $\Delta Hf_{298}^\circ(g) = -14,6$ ккал/моль. Последующие экспериментальные данные, полученные Коксом и Эсбитом [283] методом микроволновой инфракрасной спектроскопии, а также соответствующие данные Мура и Пиментела [1023] позволили получить значительно более точные величины термодинамических функций по сравнению со значениями, рассчитанными на основании более ранних спектроскопических данных, приведенных в работе Дрейтона и Томпсона [349], Бэка и Андерсена [61] и Арендала и Флетчера [25]. Здесь приняты значения термодинамических функций, рассчитанные Муром и Пиментелом [1023], в том числе значение $S_{298}^\circ(g) = 57,79$ ккал/(моль·°K). Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] отобрали $T_m = 122^\circ\text{K}$ и $T_b = 217^\circ\text{K}$. В литературных источниках не приводились значения ΔH_m и $\Delta H\nu$.

Циклокетаны. Таблица для состояния идеального газа

№ 558. Циклогексанон, $C_6H_{10}O$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 98,140

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	26,21	77,00	77,00	0,00	-55,00	-21,69	15,898
300	26,39	77,17	77,01	0,05	-55,05	-21,49	15,652
400	36,00	86,09	78,16	3,18	-57,23	-9,95	5,436
500	45,00	95,11	80,65	7,24	-58,94	2,08	-0,907
600	52,90	104,03	83,80	12,14	-60,18	14,40	-5,244
700	59,50	112,70	87,32	17,77	-60,99	26,90	-8,398
800	65,00	121,01	91,01	24,01	-61,44	39,48	-10,785
900	69,50	128,94	94,79	30,74	-61,59	52,11	-12,654
1000	73,00	136,45	98,58	37,87	-61,49	64,75	-14,151

Ковн, Кистяковский и Смит [261] на основании результатов измерения энтальпии гидрирования газообразного циклогексанона до газообразного циклогексанола при 355° K получили значение $\Delta H_r^\circ_{355} = -15,424$ ккал/моль, из которого после внесения необходимых поправок рассчитана величина $\Delta H_r^\circ_{298} = -15,30$ ккал/моль. Прирав для циклогексанола $\Delta H_f^\circ_{298}(g) = -70,40$ ккал/моль, удалось рассчитать для циклогексанона значение $\Delta H_f^\circ_{298}(g) = -55,10$ ккал/моль. Селлерс и Саннер [1331] измеряли энтальпию сгорания и определили величину $\Delta H_c^\circ(l) = -841,04$ ккал/моль; из этого значения и величины $\Delta H_v^\circ_{302} = 10,11$ ккал/моль, найденной Колосовским и Алимовым [799], были рассчитаны $\Delta H_f^\circ_{298}(l) = -64,86$ ккал/моль и $\Delta H_f^\circ_{298}(g) = -54,75$ ккал/моль. Принято значение $\Delta H_f^\circ_{298}(g) = -55,00$ ккал/моль. Оценка величины энтропии для газообразного состояния при 298° K получена из сравнения разностей энтропии этилового спирта и ацетальдегида, этана и ацетальдегида, пропана и ацетона, изопропилового спирта и ацетона; полученное при этом среднее значение относилось к циклогексанолу и циклогексанону. На основании такого сравнения получена величина $S^\circ_{298}(g) = 77 \pm 1$ кал/(моль·°K). Теплоемкость для газообразного состояния установлена путем суммирования соответствующих величин для циклогексана и ацетона с последующим вычитанием значения для пропана. По данным Тиммерманса [1501], $T_m = 242,0^\circ$ K и $T_b = 428,8^\circ$ K. Величина $\Delta H_v = 9,00$ ккал/моль при точке кипения получена из данных Колосовского и Алимова [799] для температуры 293° K.

Насыщенные карбоновые кислоты и их производные. Таблицы для состояния идеального газа

№ 559. Муравьиная кислота, CH_2O_2 (состояние идеального газа).
Мол. вес 46,026

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	10,81	59,45	59,45	0,00	-90,49	-83,89	61,492
300	10,84	59,52	59,46	0,03	-90,50	-83,85	61,084
400	12,85	62,92	59,91	1,21	-90,96	-81,56	44,561
500	14,62	65,99	60,82	2,59	-91,34	-79,17	34,602
600	16,02	68,78	61,92	4,12	-91,64	-76,70	27,938
700	17,32	71,35	63,08	5,79	-91,87	-74,20	23,164
800	18,35	73,73	64,27	7,58	-92,05	-71,66	19,576
900	19,21	75,94	65,44	9,45	-92,18	-69,10	16,779
1000	19,95	78,00	66,60	11,41	-92,27	-66,53	14,539

Зинке [1353] на основании данных, полученных при сжигании образцов высокой чистоты, определил значение $\Delta H_f^\circ_{298}(l) = -101,52$ ккал/моль, которое в сочетании с $\Delta H_v^\circ_{298} = 4,78$ ккал/моль и с учетом изменения энтальпии при переходе от насыщенного пара к состоянию идеального газа мономера, равного 6,25 ккал/моль (по сообщению Уоринга [1571]), приводит к величине $\Delta H_f^\circ_{298}(g) = -90,49$ ккал/моль. Стаут и Фишер [1428] на основании измерения низкотемпературных свойств установили, что $T_{tr} = 281,45^\circ$ K, $\Delta H_{tr} = 3,035$ ккал/моль и $S^\circ_{298}(l) = 30,82 \pm 0,1$ кал/(моль·°K). Милликан и Питчер [1010] опубликовали обзор спектроскопических данных, вновь измерили инфракрасный спектр, пересмотрели отнесения основных частот колебаний и рассчитали $S^\circ_{298}(g) = 59,43$ кал/(моль·°K). Сравнительно недавно Грин [534] проанализировал все имеющиеся данные, включая информацию, полученную микроволновым методом, и рассчитал весьма тщательно все термодинамические функции, из которых принято значение $S^\circ_{298}(g) = 59,45$ кал/(моль·°K). Халфорд [562] и Уоринг [1571] вычислили энтропию испарения до равновесного пара (состоящего из мономеров и димеров) и превращения равновесного пара в идеальный газ при 298,15° K. Они считают, что димеры существуют в кристаллическом состоянии с возможной неупорядоченной ориентацией атомов водорода в водородной связи. Последующие рентгеноструктурные определения показали, что кристалл относится к типу структур с бесконечными цепями. Вследствие этого из первоначальных расчетов был исключен член, описывающий неупорядоченную ориентацию в данном кристалле, и получены следующие зна-

чения для энтропии муравьиной кислоты в состоянии идеального газа при 298,15° К:

Метод	S_{298}° кал/(моль·°К)	Литература
Спектроскопический	59,427	Милликап и Штцер [4010]
Термический	59,30±0,3	Халфорд [562]
Термический	59,44±0,1	Уоринг [1571]

Эти данные хорошо согласуются в пределах ошибки эксперимента. По сообщению Уоринга [1571], $\Delta H_v = 5,235$ ккал/моль при $T_b = -373,7^{\circ}$ К.

№ 560. Уксусная кислота, $C_2H_4O_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 60,052

T, °К	кал/(моль·°К)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ} - H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ} - H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	15,90	67,52	67,52	0,00	-103,93	-90,03	65,989
300	15,97	67,62	67,53	0,03	-103,95	-89,94	65,520
400	19,52	72,72	68,20	1,81	-104,76	-85,14	46,518
500	22,60	77,41	69,58	3,92	-105,42	-80,16	35,036
600	25,15	81,76	71,25	6,34	-105,94	-75,06	27,339
700	27,35	85,81	73,04	8,94	-106,34	-69,88	21,817
800	29,08	89,58	74,88	11,77	-106,64	-64,65	17,662
900	30,60	93,09	76,71	14,75	-106,87	-59,39	14,421
1000	31,99	96,39	78,51	17,88	-107,01	-54,10	11,823

Эванс и Скиллер [389] проанализировали результаты работ по определению теплот сгорания, измерили теплоту сгорания и получили значение $\Delta H_f^{\circ} (l) = -415,72$ ккал/моль. По экспериментальным данным Брауна [174], Мак-Даугалла [895] и Риттера и Саймонса [1233] мы рассчитали инкремент энтальпии 11,75 ккал/моль для перехода от реальной жидкости к идеальному мономерному газу при 298,15° К, а это приводит к значению $\Delta H_f^{\circ} (g) = -103,93$ ккал/моль. Паркс, Келли и Хаффман [1108] измеряли теплоемкость в температурном интервале 90—298° К и получили значение $S_{298}^{\circ} (l) = 38,20$ кал/(моль·°К). Позже Вельтнер [1587] измерял теплоемкость пара и теплоту испарения; на основании полученных данных он определил константу равновесия мономер — димер. Он произвел отнесение частот, рассчитал термодинамические функции и получил $S_{298}^{\circ} (g) = 67,52$ кал/(моль·°К). Россини, Вагман,

Эванс, Левин и Джаффе [1249] отобрали $T_m = 298,76^{\circ}$ К, $\Delta H_m = -2,80$ ккал/моль и $T_b = 391,25^{\circ}$ К; при этой температуре Вельтнер [1587] получил значение $\Delta H_v = 5,663$ ккал/моль. Величины $T_c = -594,8^{\circ}$ К и $P_c = 56,0$ атм приняты по данным измерений Юнга, цитированным Тиммермансом [1501].

№ 561. Метилформиат, $C_2H_4O_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 60,052

T, °К	кал/(моль·°К)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ} - H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ} - H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	15,90	72,00	72,00	0,00	-83,60	-71,03	52,067
300	16,00	72,10	72,01	0,03	-83,62	-70,96	51,689
400	19,50	77,20	72,68	1,81	-84,43	-66,61	36,390
500	22,60	81,89	74,06	3,92	-85,09	-62,07	27,130
600	25,20	86,25	75,73	6,32	-85,60	-57,42	20,913
700	27,40	90,30	77,52	8,95	-86,00	-52,69	16,449
800	29,40	94,07	79,36	11,78	-86,30	-47,91	13,088
900	30,60	97,59	81,19	14,76	-86,53	-43,09	10,464
1000	32,00	100,89	83,00	17,89	-86,67	-38,26	8,360

Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] сделали обзор литературных данных по теплотам сгорания и отобрали значение $\Delta H_f^{\circ} (g) = -83,6$ ккал/моль. Значение энтропии $S_{298}^{\circ} (g) = -72,0$ кал/(моль·°К) найдено на основании результатов изучения равновесия, полученных Лейси, Даннингом и Сторчем [836]. Россини и др. [1249] отобрали $\Delta H_v = 6,750$ ккал/моль при $T_b = 304,7^{\circ}$ К. Согласно Тиммермансу [1500], $T_m = 173^{\circ}$ К и $\Delta H_m = 1,800$ ккал/моль. Карл [299] проанализировал данные микроволновой спектроскопии и определил потенциальный барьер внутреннего вращения метильной группы при 1,190 ккал/моль. Теплоемкость метилформиата в газообразном состоянии принята равной теплоемкости газообразной уксусной кислоты.

№ 562. Уксусный ангидрид, $C_4H_6O_3$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 102,088

Данные Конна, Кистяковского, Роберта и Смита [258] и Вадсо [1558] хорошо согласуются в отношении энтальпии гидролиза жидкого уксусного ангидрида до жидкой уксусной кислоты, для которых энтальпия равна соответственно $-13,96$ и $-14,00$ ккал/моль. Среднее значение $-13,98$ ккал/моль использовано наряду с энтальпиями образования уксусной кислоты и воды для расчета энтальпии образования уксусного ангидрида $\Delta H_f^{\circ} (l) = 149,14$ ккал/моль. Экспериментальные низкотемпературные данные [968] включают

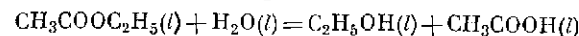
T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	С _р ^о	S ^о	-(G ^о -H ₂₉₈ ^о)/T	H ^о -H ₂₉₈ ^о	ΔHf ^о	ΔGf ^о	
298	23,78	93,20	93,20	0,00	-137,60	-113,93	83,511
300	23,91	93,35	93,21	0,05	-137,63	-113,79	82,889
400	30,86	101,21	94,23	2,80	-139,02	-105,61	57,702
500	36,78	108,75	96,39	6,19	-140,09	-97,13	42,455
600	41,62	115,89	99,05	10,11	-140,91	-88,46	32,221
700	45,74	122,63	101,94	14,49	-141,50	-79,67	24,874
800	48,91	128,95	104,93	19,23	-141,92	-70,81	19,344
900	51,64	134,87	107,93	24,25	-142,19	-61,91	15,032
1000	54,11	140,44	110,90	29,54	-142,32	-52,97	11,576

следующие значения: $T_m = 199,11^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,51 \text{ ккал/моль}$ и $S_{298}^\circ(l) = 64,2 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$. Эти данные приводят к величине энергии Гиббса для реакции гидролиза $12,66 \text{ ккал/(моль} \cdot \text{°K)}$, что удовлетворительно согласуется со значением $12,2 \text{ ккал/(моль} \cdot \text{°K)}$, полученным Кнопфом, Линнеллом и Чайлдом [767] на основании данных о равновесии. Результаты измерения давления пара, полученные Мак-Дональдсом, Шрейдером и Сталлом [969], использованы для расчета $\Delta H_{298}^\circ = 11,54 \text{ ккал/моль}$, $\Delta H_{298}^\circ(g) = -137,6 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}^\circ(g) = 93,2 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$ и $\Delta H_v = 9,85 \text{ ккал/моль}$ при $T_b = -411,8^\circ \text{K}$. Теплоемкость пара аппроксимирована путем вычитания значений для водяных паров из удвоенных значений для уксусной кислоты. По данным Кубе и Линна [780], $T_c = 569^\circ \text{K}$ и $P_c = 46,2 \text{ атм}$.

№ 563. Этилацетат, C₄H₈O₂ (состояние идеального газа).
Мол. вес 88,104

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	С _р ^о	S ^о	-(G ^о -H ₂₉₈ ^о)/T	H ^о -H ₂₉₈ ^о	ΔHf ^о	ΔGf ^о	
298	27,16	86,70	86,70	0,00	-105,86	-78,25	57,359
300	27,24	86,87	86,71	0,06	-105,89	-78,08	56,882
400	32,84	95,47	87,84	3,06	-107,36	-68,58	37,470
500	38,70	103,44	90,17	6,64	-108,58	-58,74	25,675
600	43,65	110,95	93,02	10,77	-109,52	-48,69	17,733
700	47,69	117,99	96,09	15,34	-110,23	-38,49	12,015
800	51,01	124,58	99,24	20,28	-110,75	-28,21	7,705
900	53,75	130,76	102,40	25,52	-111,11	-17,86	4,337
1000	56,05	136,54	105,53	31,01	-111,34	-7,48	1,635

Вадсо [1555] измерял энтальпию гидролиза и установил, что $\Delta H_{298}^\circ = 0,89 \text{ ккал/моль}$ для реакции



С учетом ранее принятых значений для этилового спирта, уксусной кислоты и воды это значение приводит к величине для этилацетата $\Delta H_{298}^\circ(l) = -114,49 \text{ ккал/моль}$. Величины давления пара, отобранные Сталлом [1432]: 71 мм рт. ст. при 20°C , 90 мм рт. ст. при 25°C и 115 мм рт. ст. при 30°C . Из уравнения Клаузиуса — Клапейрона следует, что

$$\Delta H_{v298} = R \frac{\Delta P}{P} \cdot \frac{T^2}{\Delta T} = 1,9872 \cdot \frac{(115-71)}{90 \times 1000} \cdot \frac{(298,15)^2}{(30-20)} = 8,63 \text{ ккал/моль.}$$

Это значение приводит к принятой здесь величине $\Delta H_{298}^\circ(g) = -105,86 \text{ ккал/моль}$. Такая величина достаточно хорошо согласуется с теплотой сгорания жидкого этилацетата $\Delta H_{298}^\circ(g) = -106,58 \text{ ккал/моль}$, которая определена Шенбергом [1285]. Паркс, Хаффман и Бармор [1106] измеряли теплоемкость в температурном интервале $90-298^\circ \text{K}$ и получили значения $T_m = 189,3^\circ \text{K}$ и $\Delta H_m^\circ = 2,505 \text{ ккал/моль}$; они установили также следующие значения:

$S_{298}^\circ(l)$	62,0 кал/(моль · °K)
$\Delta S_v, 8630/298,15$	28,94
ΔS (сжатие), $-R \ln(760/90)$	-4,24
<hr/>	
S_{298}° (идеальный газ)	86,7 кал/(моль · °K)

Метюс [940] измерил $\Delta H_v = 7,720 \text{ ккал/моль}$ при $T_b = 349,15^\circ \text{K}$. Теплоемкость в газообразном состоянии измерена Джаткарсом [683], а также Бенневицем и Росспером [103]; полученные хорошо согласующиеся значения экстраполированы к высоким температурам в предположении, что при 1500°K теплоемкость составляет 80% величины, принятой для нормальных условий.

Ненасыщенные кислоты. Таблицы для состояния идеального газа

№ 564. Акриловая кислота, C₃H₄O₂ (состояние идеального газа).
Мол. вес 72,062

Использование сочетания расчетных методов можно иллюстрировать следующим примером. Шенберг [1285] по данным измерения теплоты сгорания жидкой пропионовой кислоты вычислил $\Delta H_{298}^\circ(l) = -121,92 \text{ ккал/моль}$. Скиннер и Снелсон [1364] на основе измерений энтальпии гидрирования жидкой акриловой кислоты до жидкой пропионовой кислоты ($-30,35 \text{ ккал/моль}$) определили для акриловой кислоты $\Delta H_{298}^\circ(l) = -91,75 \text{ ккал/моль}$. Сталл [1432] отобрал для акриловой кислоты давление пара $3,10 \text{ мм рт. ст.}$ при 20°C , $4,28 \text{ мм рт. ст.}$ при 25°C и $5,85 \text{ мм рт. ст.}$ при 30°C . На основа-

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	18,59	75,29	75,29	0,00	-80,36	-68,37	50,113
300	18,67	75,41	75,30	0,04	-80,38	-68,30	49,751
400	22,94	81,38	76,08	2,13	-81,13	-61,15	35,046
500	26,56	86,90	77,70	4,61	-81,73	-59,83	26,149
600	29,50	92,01	79,66	7,41	-82,21	-55,40	20,179
700	32,00	96,75	81,77	10,49	-82,59	-50,90	15,892
800	33,93	101,16	83,92	13,79	-82,88	-46,36	12,664
900	35,61	105,25	86,07	17,27	-83,10	-41,78	10,145
1000	37,12	109,08	88,18	20,91	-83,24	-37,17	8,124

нии уравнения Клаузиуса — Клапейрона мы получили $\Delta H_v = -11,21$ ккал/моль. Следовательно, для акриловой кислоты $\Delta H_f^{298}(g) = -80,54$ ккал/моль.

Паркс и Хаффман [1105] приводят для масляной кислоты $S_{298}^o(l) = 54,1$ кал/(моль·°K). По данным для давления пара, отобранным Сталлом [1432], мы интерполировали давления 0,68, 0,98 и 1,40 мм рт. ст. для 20, 25 и 30° С соответственно. На основе этих результатов мы рассчитали для масляной кислоты $\Delta H_v^{298} = 12,98$ ккал/моль. В заключение была рассчитана энтропия масляной кислоты:

$S_{298}^o(l)$	54,10 кал/(моль·°K)
ΔS_v , 12 980/298,15	43,53
ΔS (сжатие), $-R \ln(760/0,98)$	-13,22
Поправка на неидеальность газа (приближенное значение)	0,02
S_{298}^o (идеальный газ)	84,43 кал/(моль·°K)

Теперь можно оценить энтропию акриловой кислоты в газообразном состоянии, пользуясь указанными ниже значениями энтропий соответствующих соединений в газообразном состоянии при 298,15°K.

Замещение группы -CH ₃ группой -COOH	
H ₃ CCCH ₃ (54,85), H ₃ CCOOH (67,52)	12,67
H ₃ CCCH ₂ CH ₂ CH ₃ (74,12), H ₃ CCCH ₂ CH ₂ COOH (84,43)	10,31
Среднее значение:	11,49

Для H₂CCCH₃ значение $S_{298}^o(g) = 63,80$ кал/(моль·°K). Таким образом, для H₂CCCHCOOH (g) соответствующее значение равно $63,80 + 11,49 = 75,29$ кал/(моль·°K). Наконец, теплоемкость акриловой кислоты в газообразном состоянии может быть оценена исходя из следующих величин теплоемкостей:

T, °K	H ₃ CCOOH (1)	H ₃ CCCH ₃ (2)	(1)-(2)	H ₂ CCCHCH ₃ (3)	H ₂ CCCHCOOH (3)+(1)-(2)
298	15,90	12,58	3,32	15,27	18,59
300	15,97	12,64	3,33	15,34	18,67
400	19,52	15,68	3,84	19,10	22,94
500	22,60	18,66	3,94	22,62	26,56
600	25,15	21,35	3,80	25,70	29,50
700	27,35	23,72	3,63	28,37	32,00
800	29,08	25,83	3,25	30,68	33,93
900	30,60	27,69	2,91	32,70	35,61
1000	31,99	29,33	2,66	34,46	37,12

Димеризация или полимеризация этих соединений не учитывалась.

Фенолы. Таблицы для состояния идеального газа

№ 565. Фенол, C₆H₆O (состояние идеального газа).
Мол. вес 94,108

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	24,75	75,43	75,43	0,00	-23,93	-7,86	5,763
300	24,90	75,59	75,44	0,05	-23,05	-7,77	5,661
400	32,45	83,82	76,51	2,93	-24,09	-2,51	1,369
500	38,64	91,75	78,77	6,50	-24,90	2,99	-1,306
600	43,54	99,24	81,56	10,61	-25,53	8,62	-3,140
700	47,44	106,26	84,59	15,17	-26,01	14,36	-4,482
800	50,62	112,80	87,72	20,07	-26,28	20,14	-5,502
900	53,26	118,92	90,85	25,27	-26,64	25,98	-6,308
1000	55,49	124,65	93,94	30,71	-26,80	31,84	-6,958

Теплоту сгорания измеряли Паркс, Манчестер и Воган [1112] и Кокс [285]; принято значение $\Delta H_f^{298}(c) = -39,44$ ккал/моль, полученное Коксом. На основании тщательного изучения давления

пара Биддискомб и Мартин [129] сообщили следующие данные: $\Delta H_v = 9,73$ ккал/моль при $T_b = 454,99^\circ\text{K}$ и $\Delta H_{s_{298}} = 16,41$ ккал/моль для твердого состояния, откуда вычислено $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -23,03$ ккал/моль. Паркс, Хаффман и Бармор [1106] измеряли термические свойства в интервале температур от 90 до 298°K и установили, что $S_{298}^\circ(c) = 34,10$ кал/(моль $\cdot^\circ\text{K}$); позже Алдон, Коунсен, Херрингтон и Мартин [19] изучали термические свойства в температурном интервале $12-336^\circ\text{K}$ и получили значения $S_{298}^\circ(c) = 34,42$ кал/(моль $\cdot^\circ\text{K}$) и $\Delta H_m = 2,752$ ккал/моль при $T_{tr} = 314,06^\circ\text{K}$. Последняя группа исследователей отметила, что значения ΔH_s и давления пара при $298,15^\circ\text{K}$ определены недостаточно точно и не приводят к соответствию значения $S_{298}^\circ(g) = 75,43$ кал/(моль $\cdot^\circ\text{K}$), выведенного на основании спектроскопических данных и установленного экспериментально, однако их экстраполяция значений C_p/T обеспечивает хорошее согласие между экспериментальной величиной $S_{400}^\circ(g)$ и полученной из спектроскопических данных. Эванс [392] и позже Грин [533] на основании по существу одних и тех же отнесенных колебаний рассчитали в основном одинаковые значения термодинамических функций. Расчеты [968] показывают, что $T_c = 692^\circ\text{K}$ и $P_c = 60,5$ атм.

№ 566. *m*-Крезол, C_7H_8O (состояние идеального газа).
Мол. вес 108,134

T, °K	кал/(моль $\cdot^\circ\text{K}$)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	29,27	85,27	85,27	0,00	-31,63	-9,69	7,099
300	29,91	85,46	85,28	0,06	-31,66	-9,55	6,958
400	38,74	95,30	86,56	3,50	-33,08	-1,95	1,067
500	46,20	104,78	89,26	7,76	-34,21	5,96	-2,607
600	52,26	113,75	92,60	12,69	-35,10	14,08	-5,128
700	57,19	122,19	96,23	18,17	-35,78	22,34	-6,974
800	61,27	130,10	99,98	24,10	-36,29	30,67	-8,378
900	64,93	137,53	103,74	30,41	-36,65	39,06	-9,486
1000	68,50	144,55	107,47	37,08	-36,79	47,49	-10,379

Из спектроскопических данных Грин [537] рассчитал теплоемкости *m*-крезола в газообразном состоянии и значение $S_{298}^\circ(g) = -85,27$ кал/(моль $\cdot^\circ\text{K}$); он сообщил, что $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -31,63$ ккал/моль. Парди и Вейнрич [1101] получили следующие данные: $T_m = 284,7^\circ\text{K}$ и $\Delta H_v = 10,32$ ккал/моль при $T_b = 475,4^\circ\text{K}$.

№ 567. *o*-Крезол, C_7H_8O (состояние идеального газа).
Мол. вес 108,134

T, °K	кал/(моль $\cdot^\circ\text{K}$)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	31,45	85,47	85,47	0,00	-30,74	-8,86	6,491
300	31,31	85,67	85,48	0,06	-30,77	-8,72	6,353
400	39,74	95,86	86,81	3,63	-32,07	-1,16	0,635
500	46,91	105,52	89,59	7,97	-33,41	6,69	-2,923
600	52,77	114,61	93,01	12,96	-33,94	14,72	-5,362
700	57,56	123,11	96,71	18,49	-34,58	22,89	-7,147
800	61,55	131,06	100,52	24,44	-35,06	31,13	-8,503
900	65,25	138,53	104,33	30,78	-35,38	39,43	-9,573
1000	68,82	145,59	108,10	37,49	-35,50	47,75	-10,436

Грин [537] рассчитал термодинамические функции, определил $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -30,74$ ккал/моль и $S_{298}^\circ(g) = 85,47$ кал/(моль $\cdot^\circ\text{K}$), а также рассчитал из спектроскопических данных теплоемкости пара. Парди и Вейнрич [1101] получили следующие данные: $T_m = 303,2^\circ\text{K}$ и $\Delta H_v = 10,20$ ккал/моль при $T_b = 464,0^\circ\text{K}$.

№ 568. *p*-Крезол, C_7H_8O (состояние идеального газа).
Мол. вес 108,134

T, °K	кал/(моль $\cdot^\circ\text{K}$)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	29,75	83,09	83,09	0,00	-29,97	-7,38	5,406
300	29,91	83,28	83,10	0,06	-30,00	-7,24	5,272
400	38,65	93,11	84,38	3,50	-31,42	0,58	-0,317
500	46,07	102,56	87,08	7,75	-32,56	8,72	-3,810
600	52,10	111,51	90,41	12,66	-33,47	17,05	-6,212
700	57,03	119,92	94,03	18,13	-34,16	25,54	-7,973
800	61,11	127,81	97,77	24,04	-34,70	34,10	-9,315
900	64,85	135,22	101,52	30,34	-35,06	42,72	-10,374
1000	68,40	142,24	105,24	37,06	-35,22	51,38	-11,229

Из спектроскопических данных Грин [537] рассчитал $S_{298}^\circ(g) = 83,09$ кал/(моль $\cdot^\circ\text{K}$) и теплоемкости для газообразного состояния, он сообщил, что $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -29,97$ ккал/моль. Парди и Вейнрич [1101] получили следующие данные: $T_m = 307,9^\circ\text{K}$ и $\Delta H_v = 10,32$ ккал/моль при $T_b = 475,3^\circ\text{K}$.

Фенилкарбоновые кислоты. Таблица для состояния
идеального газа

№ 569. Бензойная кислота, $C_7H_6O_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 122,118

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	24,73	88,19	88,19	0,00	-69,36	-50,29	36,859
300	24,86	88,35	88,20	0,05	-69,39	-50,17	36,547
400	33,07	96,64	89,27	2,95	-71,01	-43,50	23,768
500	40,76	104,87	91,57	6,66	-72,36	-36,46	15,938
600	47,02	112,87	94,46	11,05	-73,47	-29,18	10,629
700	52,06	120,51	97,64	16,02	-74,35	-21,72	6,782
800	56,14	127,74	100,95	21,43	-75,07	-14,16	3,869
900	59,50	134,55	104,31	27,22	-75,64	-6,51	1,581
1000	62,30	140,97	107,66	33,31	-76,07	1,20	-0,262

Джессап [687, 688], а также Прозен и Россини [1201] получили в основном согласующиеся данные по теплоте сгорания, приводящие к значению $\Delta H_{f,298}^\circ(c) = -92,062$ ккал/моль. Девис и Джонс [310] указывают значение $\Delta H_{f,1,7}^\circ = 21,85$ ккал/моль, которое дает $\Delta H_{f,298}^\circ = 22,70$ ккал/моль, откуда $\Delta H_{f,298}^\circ(g) = -69,36$ ккал/моль. На основании тщательных измерений теплоемкости при низких температурах Фурукава, Мак-Коски и Кинг [454] получили значения $S_{298}^\circ(c) = 40,05$ кал/(моль · °K), $T_m = 395,52^\circ$ K и $\Delta H_m^\circ = -4,32$ ккал/моль. По данным Сталла [1432], $T_b = 522,4^\circ$ K, при этом $\Delta H_v = 12,10$ ккал/моль (по данным Девиса и Джонса [310]). Мы рассчитали термодинамические функции для состояния идеального газа на основании предварительного отнесения основных колебательных частот и установили значение $S_{298}^\circ(g) = 88,19$ кал/(моль · °K).

Глава XI

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА АЗОТСОДЕРЖАЩИХ
СОЕДИНЕНИЙ

Введение

В этой главе рассмотрены соединения, содержащие азот наряду с углеродом и водородом, а в некоторых случаях и с кислородом. Данные о соединениях, содержащих галоген или серу, можно найти в двух следующих главах.

Многие азотсодержащие органические соединения имеют промышленное значение; ежегодное производство их составляет миллионы килограммов. Обзор химии и использования промышленных азотсодержащих соединений дан в работе Астла [28]. Учитывая, что целый ряд из описанных Астлом процессов лимитируется термодинамическими равновесиями, применение термодинамических расчетов к таким реакциям может оказаться весьма плодотворным. Но в отличие от технологии углеводородов, где термодинамика нашла самое широкое применение, эффективность такого подхода при рассмотрении азотсодержащих органических соединений сильно ограничена отсутствием точных данных о свободных энергиях. Паркс и Хаффман [1105] обсуждают значения свободной энергии для 24 азотсодержащих органических соединений, однако почти все величины, приводимые в этой работе, недостаточно надежны, а такие важные классы, как алифатические амины, нитрилы и нитросоединения, не представлены вовсе. Точные данные по этим и другим классам азотсодержащих соединений все еще весьма скудны, поэтому таблицы, помещенные в этой главе, содержат много оценок, полученных путем расчета с использованием констант (инкрементов).

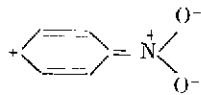
Хотя полные термодинамические данные, отличающиеся высокой точностью, получены только для небольшого числа азотсодержащих соединений, энтальпии образования многих из этих соединений определены со средней точностью. Такое положение частично явилось следствием того, что органические азотсодержащие соединения имеют большое значение как взрывчатые вещества и высокоэнергетические топливные материалы. Как отмечает Полинг [1130], прочность связи в молекулярном азоте вопреки ожиданиям очень велика. Поэтому молекулы, содержащие связи C — N, O — N и H — N, крайне нестабильны в том отношении, что легко перегруппировываются с образованием молекулярного азота и других продуктов, таких, как окись углерода и вода. В качестве хоро-

но известных примеров можно назвать нитроглицерин, тринитротолуол и гексоген (циклонит). В последнее время благодаря этому свойству азотсодержащие соединения нашли применение в качестве реактивного топлива; типичными системами являются анилин — азотная кислота и диметилгидразин — жидкий кислород. Теоретически максимальные характеристики взрывчатого вещества или реактивного топлива могут быть определены по энтальпии образования; широкие исследования в этой области выполнены Уильямсом, Мак-Эваном и Генри [1616], Холкомбом и Дорсеем [613], Маррином и Голдхагеном [1039], Медардом и Томасом [981—986].

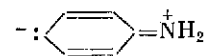
Органические азотсодержащие соединения играют очень важную роль в биохимии. Интерес к термодинамике биохимических процессов привел Хаффмана и его сотрудников к работам по измерению энтропии и энтальпии сгорания ряда аминокислот. Борсук и Хаффман [148] обобщили полученные результаты и рассчитали равновесие для синтеза аминокислот в физиологических условиях (например, протекающего в печени процесса образования аланина из пировиноградной кислоты и аммиака). В последнее время интерес к этой области вновь возрос; термические данные для некоторых из указанных соединений были получены заново с высокой степенью точности; были определены также свойства других аминокислот, ранее не изучавшихся [241, 666].

При работе с органическими азотсодержащими соединениями были выполнены интересные исследования в области структурного анализа, резонанса и внутреннего вращения. Результаты тщательного изучения пирролидина, полученные Мак-Каллохом [946], подкрепили концепцию псевдовращения (вращения угла максимального скручивания вокруг оси кольца) в насыщенных пятичленных циклах. Псевдовращение может быть свободным, как в циклопентане [753], или немного заторможенным, как в пирролидине [948].

В ненасыщенных шестичленных циклах атом азота может замещать атом углерода с образованием гетероциклических ароматических соединений. Резонансная стабилизация в этих соединениях сопоставима со стабилизацией в бензоле, однако точное сравнение невозможно из-за неопределенности при установлении прочности «нормальной» связи C=N. Согласно Бедфорду, Визеру и Мортимеру [93], энергия резонанса пиридина и пиразина равна соответственно 32 и 24 ккал/моль, а бензола 36 ккал/моль. Представление о резонансе важно также для объяснения барьеров, препятствующих внутреннему вращению. Нитрогруппа в алифатических соединениях вращается свободно, но если она присоединена к бензольному кольцу, то возможен резонанс, включающий структуру [1130]



в которой связь между углеродом и азотом частично имеет характер двойной связи. Барьер внутреннего вращения в нитробензоле по экспериментальным данным составляет около 6 ккал/моль. Аналогично аминогруппы в алифатических соединениях имеют барьер внутреннего вращения около 2 ккал/моль, тогда как в анилине он повышается до 3,4 ккал/моль, поскольку и здесь возможна резонансная структура, включающая кольцо [1130]:



В то же время метильные группы, связанные с ароматическим кольцом, вращаются свободно, как это установлено при изучении пиколинов (метилпиридинов). При изучении пиколина было сделано важное наблюдение — неожиданно большой сдвиг низких колебательных частот при переходе от жидкой к парообразной фазе; этот эффект был впервые отмечен при изучении толуола. Использование жидкостных частот для паровой фазы приводит к ошибке в расчетных значениях функций почти столь же большой, как и обычная калориметрическая неточность, и обуславливает расхождение с калориметрическими данными, даже если учесть свободное вращение. Из других заслуживающих внимания работ по изучению барьеров внутреннего вращения следует отметить исследования молекулы метилнитрата, в которой, согласно термическим данным, происходит свободное вращение нитрогруппы и метильной группы, однако микроволновые спектроскопические данные свидетельствуют о больших барьерах, равных 9 ккал/моль для нитрогруппы и 2,3 ккал/моль для метильной группы. Для объяснения такого противоречия необходимы дополнительные исследования.

Как уже указывалось, многие из приведенных в этой главе таблиц для состояния идеального газа основаны на оценочных расчетах с использованием констант, причем особенно это относится к теплоемкостям и энтропиям. К сожалению, из-за недостатка экспериментальных данных по азотсодержащим соединениям эти оценки не отличаются высокой достоверностью. В табл. XI.1 приведены различные константы «метил-замещения», использованные для получения этих оценок, а также данные, на основании которых определены сами константы. Некоторые противоречия в этой таблице могли явиться следствием неточности экспериментальных определений, однако возможно, что и сам метод «метил-замещения» для некоторых рядов не позволяет получать оценки с высокой степенью точности.

Таблица XI.1

Константы замещения для алифатических азот

содержащих соединений в газообразном состоянии

Тип соединения	$\Delta[\Delta H_{298}^\circ]$, ккал/моль	ΔS_{298}° , гал/(моль °K)	ΔC_p , кал/(моль °K)																	
			298°K	300°K	400°K	500°K	600°K	700°K	800°K	900°K	1000°K									
Первичные амины																				
$\text{CH}_3\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{NH}_2$	14,74	-0,41	-0,59	-0,62	-1,29	-1,92	-2,48	-2,96	-3,38	-3,75	-4,07									
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2$	13,82	0,01	-0,21	-0,22	-0,89	-1,58	-2,20	-2,73	-3,19	-3,59	-3,95									
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$	12,85																			
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$	13,00																			
$\text{R}-\text{CH}_3 \rightarrow \text{R}-\text{NH}_2$	13,60	-0,20	-0,40	-0,42	-1,09	-1,75	-2,34	-2,85	-3,29	-3,67	-4,01									
Вторичные амины																				
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{NHCH}_3$	20,32	-0,60	-1,07	-1,08	-1,65	-2,09	-2,47	-2,78	-3,14	-3,37	-3,64									
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{NHCH}_2\text{CH}_3$	17,70																			
$\text{R}-\text{CH}_2-\text{R}' \rightarrow \text{R}-\text{NH}-\text{R}'$	19,0	-0,60	-1,07	-1,08	-1,65	-2,09	-2,47	-2,78	-3,14	-3,37	-3,64									
Третичные амины																				
$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{N}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	26,45	-1,40	-1,21	-1,21	-1,69	-1,99	-2,28	-2,56	-2,87	-3,15	-3,42									
$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{CH}_3\text{CH}_2-\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_2\text{CH}_3 \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \text{CH}_3\text{CH}_2-\text{N}-\text{CH}_2\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_2\text{CH}_3 \end{array}$	21,54																			
$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{R}-\text{C}-\text{R}' \\ \\ \text{R}'' \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \text{R}-\text{N}-\text{R}' \\ \\ \text{R}'' \end{array}$	24,0	-1,40	-1,21	-1,21	-1,69	-1,99	-2,28	-2,56	-2,87	-3,15	-3,42									
Нитрилы																				
$\text{CH}_3\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CN}$	41,24	-0,22	-0,10	-0,12	-1,06	-2,07	-3,00	-3,82	-4,57	-5,24	-5,83									
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$	35,92	0,43	-0,11	-0,13	-1,36	-2,50	-3,46	-4,26	-4,94	-5,56	-6,13									
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CN}$	38,29																			
$\text{R}-\text{CH}_3 \rightarrow \text{R}-\text{CN}$	38,50	0,10	-0,10	-0,12	-1,21	-2,29	-3,23	-4,04	-4,75	-5,40	-6,00									
Нитросоединения																				
$\text{CH}_3\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{NO}_2$	2,38	8,70	1,12	1,12	1,12	0,90	0,57	0,18	-0,27	-0,72	-1,16									
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{NO}_2$	0,62																			
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NO}_2$	0,35																			
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NO}_2$	0,60																			
$\text{R}-\text{CH}_3 \rightarrow \text{R}-\text{NO}_2$	0,52	8,70	1,12	1,12	1,12	0,90	0,57	0,18	-0,27	-0,72	-1,16									

			ΔC_p , кал/(моль °K)								
			298°K	300°K	400°K	500°K	600°K	700°K	800°K	900°K	1000°K
			-0,59	-0,62	-1,29	-1,92	-2,48	-2,96	-3,38	-3,75	-4,07
			-0,21	-0,22	-0,89	-1,58	-2,20	-2,73	-3,19	-3,59	-3,95
			-0,40	-0,42	-1,09	-1,75	-2,34	-2,85	-3,29	-3,67	-4,01
			-1,07	-1,08	-1,65	-2,09	-2,47	-2,78	-3,14	-3,37	-3,64
			-1,07	-1,08	-1,65	-2,09	-2,47	-2,78	-3,14	-3,37	-3,64
			-1,21	-1,21	-1,69	-1,99	-2,28	-2,56	-2,87	-3,15	-3,42
			-0,10	-0,12	-1,06	-2,07	-3,00	-3,82	-4,57	-5,24	-5,83
			-0,11	-0,13	-1,36	-2,50	-3,46	-4,26	-4,94	-5,56	-6,13
			-0,10	-0,12	-1,21	-2,29	-3,23	-4,04	-4,75	-5,40	-6,00
			1,12	1,12	1,12	0,90	0,57	0,18	-0,27	-0,72	-1,16
			1,12	1,12	1,12	0,90	0,57	0,18	-0,27	-0,72	-1,16

Тип соединения	$\Delta [AH_f^{\circ}_{298}]$, ккал/моль	ΔS°_{298} , кал/(моль °К)
Нитраты		
$\text{CH}_3\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{ONO}_2$	-8,86	15,12
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{ONO}_2$	-11,98	16,56
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{ONO}_2$	-11,45	
$\text{R}-\text{CH}_3 \rightarrow \text{R}-\text{ONO}_2$	-10,8	15,8

Первичные алкиламины. Таблицы для состояния идеального газа

№ 601. Метиламин, CH_5N (состояние идеального газа).
Мол. вес 31,058

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H^{\circ}_{298})/T$	$H^{\circ}-H^{\circ}_{298}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	11,97	57,98	57,98	0,00	-5,50	7,71	-5,648
300	12,01	58,06	57,99	0,03	-5,52	7,79	-5,672
400	14,38	61,84	58,48	1,35	-6,53	12,38	-6,764
500	16,73	65,30	59,51	2,90	-7,39	17,21	-7,522
600	18,86	68,55	60,75	4,69	-8,09	22,20	-8,085
700	20,76	71,60	62,08	6,67	-8,65	27,29	-8,521
800	22,44	74,48	63,45	8,83	-9,09	32,46	-8,866
900	23,94	77,21	64,83	11,15	-9,41	37,67	-9,148
1000	25,26	79,81	66,20	13,61	-9,64	42,92	-9,380

Астон, Силлер и Мессерли [43] получили следующие термические данные для метиламина в условиях низких температур: $T_{tp} = 179,69^{\circ}\text{K}$, $\Delta H_m^{\circ} = 1,466$ ккал/моль и $\Delta H_v = 6,169$ ккал/моль при $T_b = 266,82$ K. Энтропия идеального газа при точке кипения по расчетам равна $56,42 \pm 0,3$ кал/(моль °K). Сравнительно большая неточность объясняется эффектом термического гистерезиса, проявляющимся в случае твердого состояния. Установлено, что теплоемкость очень сильно зависит от предшествующей термической обработки образца.

Основываясь на тщательном спектроскопическом исследовании, Грей и Лорд [523] произвели отнесение частот колебаний. Ву, Зерби, Калифано и Кроуфорд [1631] пересмотрели всего лишь одну частоту из данного отнесения, основываясь на расчете в нормальных

Продолжение табл. XI.1

ΔC_p , кал/(моль °K)								
298°K	300°K	400°K	500°K	600°K	700°K	800°K	900°K	1000°K
5,70	5,70	6,19	6,29	6,19	5,97	5,64	5,27	4,86
5,70	5,70	6,19	6,29	6,19	5,97	5,64	5,27	4,86

координатах. Идентичные структурные данные и барьеры внутреннего вращения получили Ито [672], Нисикава [1077] и Нисикава, Ито и Симода [1078]. На основании пересмотренных отнесений колебаний и структурных данных было получено значение энтропии идеального газа при температуре кипения, равное $56,69$ кал/(моль °K), согласующееся в пределах ошибки эксперимента со значением, установленным на основании третьего закона термодинамики. Термодинамические функции рассчитаны по молекулярным данным, которые кажутся надежно установленными. Результаты измерения теплоемкости для газообразного состояния, полученные Фелсингом и Джессеном [116], по-видимому, завышены, возможно вследствие ассоциации частиц в газовой фазе. Кобе и Харрисон [775] рассчитали термодинамические функции по менее точным молекулярным данным и энтропии, определенной по третьему закону термодинамики.

Джаффе [678] измерял энтальпию сгорания жидкого метиламина и вычислил $\Delta H_f^{\circ}_{298}(l) = -11,31$ ккал/моль. По результатам измерений энтальпии испарения, полученным Астоном и др. [43], а также по данным о теплоемкости Джаффе установил, что $\Delta H_v_{298} = 5,8$ ккал/моль, откуда $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -5,5$ ккал/моль. Коттрел и Джилл [277] определили $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -2,8$ ккал/моль, исходя из энтальпии сгорания нитрата метиламина и энтальпий растворения метиламина и нитрата метиламина. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] приводят значение $-6,7$ ккал/моль, полученное на основании очень старых данных по теплотам сгорания. Принято значение Джаффе. Кобе и Линн [780] отобрали $T_c = 430,1^{\circ}\text{K}$ и $P_c = 73,6$ атм.

№ 602. Этиламин, $\text{C}_2\text{H}_7\text{N}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 45,084

Вагнер [1564] сравнил частоты для целого ряда молекул, имеющих скелет $\text{C}-\text{C}-\text{X}$. По его схеме и спектроскопическим данным, полученным Стюартом [1420] и Кольраушем [787], отнесение основ-

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	17,36	68,08	68,08	0,00	-11,00	8,91	-6,528
300	17,44	68,19	68,09	0,04	-11,03	9,03	-6,576
400	21,65	73,80	68,82	2,00	-12,34	15,92	-8,698
500	25,44	79,04	70,35	4,35	-13,42	23,11	-10,103
600	28,68	83,98	72,21	7,06	-14,27	30,50	-11,109
700	31,47	88,61	74,23	10,07	-14,92	38,02	-11,870
800	33,89	92,98	76,30	13,35	-15,42	45,61	-12,460
900	36,02	97,09	78,38	16,84	-15,76	53,27	-12,935
1000	37,88	100,99	80,45	20,54	-15,97	60,96	-13,321

ных частот (в см⁻¹) выглядит следующим образом: 414, 773, 780, 889, 997, 1046, 1082, 1122, 1223, 1300, 1376, 1450 (3), 1620, 2950 (5), 3320 (2). Величины суммарных и приведенных моментов инерции рассчитаны на основании стандартных длин связи и углов; барьеры внутреннего вращения оценены 3,30 и 1,99 ккал/моль соответственно для метильной группы и аминогруппы. Термодинамические функции рассчитаны на основании этих молекулярных данных. Джаффе [678] измерял энтальпию сгорания жидкости и вычислил ΔHf₂₉₈^o(l) = -17,71 ккал/моль. Из данных по давлению пара, полученных Мелом [987], Джаффе рассчитал ΔHv₂₉₈^o = 6,7 ккал/моль, откуда ΔHf₂₉₈^o(g) = -11,0 ккал/моль. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] отобрали ΔHf₂₉₈^o(g) = -11,6 ккал/моль, основанное на старых данных по теплотам сгорания, утративших свою ценность. Россини и др. [1249] указывают также следующие значения: T_m = 192,2° K и ΔHv = 6,7 ккал/моль при T_b = 289,7° K.

В работе Полаида и Мела [1173] приведено значение С_p298^o(l) = 31,1 кал/(моль·°K) и даны величины плотности жидкости и давления пара. Мел [987] рассчитал таблицы свойств этиламина для использования его в качестве охлаждающего агента. Кобе и Линн [780] отобрали T_c = 456° K и P_c = 55,5 атм.

№ 603. Пропиламин, C₃H₉N (состояние идеального газа).
Мол. вес 59,110

Термодинамические функции оценены на основании констант, приведенных в табл. XI.1, и значений для n-бутана. Караш [744] указывает два значения энтальпии сгорания, основанные на работах Томсена и Лемоулта. Работа Лемоулта, как известно, недоступна (см. [387]), да и полученный им результат, вероятно, занижен.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	22,89	77,48	77,48	0,00	-17,30	9,51	-6,974
300	22,98	77,63	77,49	0,05	-17,33	9,68	-7,050
400	28,51	85,01	78,45	2,63	-18,97	18,94	-10,349
500	33,59	91,93	80,46	5,74	-20,34	28,58	-12,491
600	37,96	98,45	82,92	9,32	-21,37	38,46	-14,007
700	41,70	104,59	85,58	13,31	-22,17	48,50	-15,144
800	44,94	110,37	88,32	17,64	-22,76	58,63	-16,016
900	47,77	115,83	91,08	22,28	-23,16	68,83	-16,744
1000	50,21	120,99	93,82	27,18	-23,40	79,08	-17,281

Определение Томсена дает величину ΔHf₂₉₈^o(g) = -17,3 ккал/моль. Россини и соотр. [1250] приводят значения T_m = 190,2° K, T_b = 321,0° K и константы для уравнения Антуана. На основании констант Антуана, критических констант, отобранных Кобе и Липпом [780] (T_c = 507° K и P_c = 46,8 атм), и использования уравнения Хаггенмахера [560] получено значение ΔHv₂₉₈^o = 7,46 ккал/моль, из которого следует ΔHf₂₉₈^o(l) = -24,8 ккал/моль.

№ 604. Бутиламин, C₄H₁₁N (состояние идеального газа).
Мол. вес 73,136

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	28,33	86,76	86,76	0,00	-22,00	11,76	-8,619
300	28,45	86,94	86,77	0,06	-22,04	11,97	-8,716
400	35,44	96,10	87,97	3,26	-24,00	22,61	-12,900
500	41,83	104,71	90,46	7,13	-25,59	35,70	-15,605
600	47,30	112,83	93,52	11,59	-26,85	48,08	-17,512
700	51,98	120,48	96,83	16,56	-27,79	60,65	-18,935
800	56,01	127,69	100,24	21,96	-28,49	73,33	-20,031
900	59,54	134,50	103,67	27,74	-28,94	86,09	-20,905
1000	62,54	140,93	107,08	33,85	-29,19	98,90	-21,613

По данным измерений энтальпии сгорания Эванс, Фейрбразер и Скиннер [387] вычислили ΔHf₂₉₈^o(l) = -30,53 ккал/моль. Это значение почти на 11 ккал/моль менее отрицательно, чем более раннее значение, полученное Карашем [744] на основании данных Лемоулта. Россини и соотр. [1250] отобрали T_m = 224,1° K и T_b = 351,0° K, а также константы для уравнения Антуана. Эти константы исполь-

зованы наряду с оценками $T_c = 525^\circ \text{K}$ и $P_c = 40 \text{ атм}$ и уравнением Хаггенмахера [560] для вычисления $\Delta H_{298} = 8,50 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{298}^\circ(g) = -22,10 \text{ ккал/моль}$. Термодинамические функции оценены с использованием констант, приведенных в табл. XI.1, и значений для *n*-пентана.

№ 605. втор-Бутиламин, $\text{C}_4\text{H}_{11}\text{N}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 73,136

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	27,99	83,90	83,90	0,00	-24,90	9,71	-7,118
300	28,12	84,08	83,91	0,06	-24,94	9,92	-7,229
400	35,40	93,18	85,10	3,24	-26,91	21,86	-11,942
500	41,96	101,80	87,58	7,11	-28,51	34,24	-14,966
600	47,55	109,96	90,64	11,60	-29,74	46,91	-17,085
700	52,34	117,66	93,96	16,60	-30,66	59,76	-18,658
800	56,42	124,92	97,38	22,04	-31,31	72,72	-19,865
900	59,99	131,78	100,82	27,87	-31,72	85,76	-20,824
1000	62,54	138,24	104,24	34,00	-31,94	98,83	-21,599

По данным измерения энтальпии сгорания 2-аминобутана Эванс, Фейрбразер и Скиннер [387] вычислили $\Delta H_{298}^\circ(l) = -32,88 \text{ ккал/моль}$. Старая работа Лемоулта, как указывает Караш [744], приводила к значению $-39,0 \text{ ккал/моль}$. Энтальпия испарения при 298°K , равная по оценке $8,0 \text{ ккал/моль}$, позволила рассчитать $\Delta H_{298}^\circ(g) = -24,9 \text{ ккал/моль}$. Согласно Россини и сотр. [1250], $T_m = 168,7^\circ \text{K}$ и $T_b = 336^\circ \text{K}$. Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XI.1, и значений для 2-метилбутана.

№ 606. трет-Бутиламин, $\text{C}_4\text{H}_{11}\text{N}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 73,136

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	28,67	80,76	80,76	0,00	-28,65	6,90	-5,056
300	28,79	80,94	80,77	0,06	-28,69	7,12	-5,183
400	36,46	90,30	81,99	3,33	-30,57	19,35	-10,573
500	43,25	99,18	84,55	7,32	-32,05	32,01	-13,991
600	48,87	107,58	87,69	11,94	-33,15	44,93	-16,364
700	53,55	115,47	91,10	17,06	-33,94	58,01	-18,111
800	57,49	122,89	94,62	22,62	-34,48	71,18	-19,443
900	60,88	129,86	98,15	28,54	-34,79	84,41	-20,497
1000	63,79	136,43	101,65	34,78	-34,91	97,67	-21,346

По данным измерения энтальпии сгорания Эванс, Фейрбразер и Скиннер [387] вычислили $\Delta H_{298}^\circ(l) = -35,95 \text{ ккал/моль}$. Караш [744] приводит прекрасно согласующееся значение, полученное на основании данных Лемоулта. Такое согласие следует считать случайным, поскольку данные Лемоулта для других изомеров, как известно, содержат ошибку в несколько килокалорий на моль. Согласно оценке Эванса и др. [387], энтальпия испарения при 298°K равна $7,3 \text{ ккал/моль}$; эта величина кажется правдоподобной и приводит к значению $\Delta H_{298}^\circ(g) = -28,65 \text{ ккал/моль}$. Россини и сотр. [1250] отобрали $T_m = 205,7^\circ \text{K}$ и $T_b = 317,6^\circ \text{K}$. Термодинамические функции оценены с использованием констант, приведенных в табл. XI.1, и значений для неопентана.

Вторичные алкиламины. Таблицы для состояния идеального газа

№ 607. Диметиламин, $\text{C}_2\text{H}_7\text{N}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 45,084

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	16,50	65,24	65,24	0,00	-4,50	16,25	-11,913
300	16,58	65,35	65,25	0,04	-4,53	16,38	-11,932
400	20,89	70,71	65,95	1,91	-5,93	23,57	-12,877
500	24,93	75,82	67,42	4,21	-7,06	31,08	-13,584
600	28,41	80,68	69,22	6,88	-7,96	38,79	-14,130
700	31,42	85,29	71,19	9,87	-8,63	46,64	-14,562
800	33,94	89,65	73,23	13,14	-9,12	54,57	-14,906
900	36,24	93,79	75,29	16,66	-9,45	62,55	-15,189
1000	38,19	97,71	77,34	20,38	-9,63	70,57	-15,423

Низкотемпературные данные Астона, Эйдинова и Форстера [32] включают следующие значения: $T_{tr} = 180,96^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,420 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 280,04^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 6,330 \text{ ккал/моль}$, а также $S_{298}^\circ(g) = 65,24 \text{ кал/(моль·°K)}$. На основании отнесений колебаний и барьеров внутреннего вращения, полученных Астоном и др., Кобе и Харрисон [775] рассчитали термодинамические функции вплоть до 1000°K . Результаты измерения теплоемкостей пара, полученные Фелсигом и Джессеном [416], хорошо согласуются с этими рассчитанными значениями. Джаффе [678] по данным измерения энтальпии сгорания жидкого диметиламина получил значение $\Delta H_{298}^\circ(l) = -10,5 \text{ ккал/моль}$. На основании энтальпии испарения и данных по теплоемкости, полученных Астоном и др. [32], Джаффе получил значение $\Delta H_{298}^\circ(g) = -4,5 \text{ ккал/моль}$. В работе Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе

[1249] приведено значение $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -6,6$ ккал/моль, основанное на старых малодоступных данных. Кубе и Линн [780] отобрали $T_c = 437,7^{\circ}\text{K}$ и $P_c = 52,4$ атм.

№ 608. Диэтиламин, $\text{C}_4\text{H}_{11}\text{N}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 73,136

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	27,66	84,18	84,18	0,00	-17,30	17,23	-12,628
300	27,79	84,36	84,19	0,06	-17,34	17,44	-12,704
400	34,88	93,33	85,36	3,19	-19,36	29,35	-16,037
500	41,49	101,84	87,81	7,02	-21,00	41,73	-18,238
600	47,14	109,92	90,83	11,46	-22,28	54,39	-19,812
700	52,05	117,57	94,11	16,42	-23,23	67,26	-20,997
800	56,16	124,79	97,50	21,84	-23,91	80,22	-21,910
900	59,81	131,62	100,91	27,64	-24,35	93,28	-22,640
1000	62,91	138,09	104,31	33,78	-24,56	106,37	-23,240

Джаффе [678] по данным измерениям энтальпии сгорания жидкого диэтиламина вычислил $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -24,79$ ккал/моль. Средние значения энтальпии испарения при 298°K , установленные Колосовским и Алимовым [799], а также Поляндо и Мелом [1173], дают значение $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -17,3$ ккал/моль. Караш [744] приводит старые литературные данные, из которых следует, что $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -29,2$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -21,3$ ккал/моль. Эти значения не учитывались. Оценки термодинамических функций для состояния идеального газа получены на основании значений для пентана и констант, приведенных в табл. XI.1. Согласно Полянду и Мелу [1173], $T_m = 223,2^{\circ}\text{K}$ и $T_b = 327,3^{\circ}\text{K}$. Кубе и Линн [780] отобрали $T_c = 496^{\circ}\text{K}$ и $P_c = 36,6$ атм.

Третичные алкиламин. Таблицы для состояния идеального газа

№ 609. Триметиламин $\text{C}_3\text{H}_9\text{N}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 59,110

Свойства триметиламина при низких температурах изучали Астон, Сагсикан, Жаж, Моссен и Зур [42], которые получили следующие данные: $T_{tr} = 156,07^{\circ}\text{K}$, $\Delta H_{tr} = 1,564$ ккал/моль, $\Delta P_v = 5,482$ ккал/моль при $T_b = 276,02^{\circ}\text{K}$ и $S_{276,02}^{\circ}(g) = 67,31$ кал/(моль · °K). По отнесениям колебаний они рассчитали барьер внутреннего вращения, углы между связями и межатомные расстояния, а также определили из калориметрических данных величину энтро-

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	21,93	69,02	69,02	0,00	-5,70	23,64	-17,325
300	22,05	69,16	69,03	0,05	-5,74	23,82	-17,349
400	28,08	76,34	69,96	2,56	-7,44	33,94	-18,542
500	33,63	83,22	71,93	5,65	-8,80	44,44	-19,426
600	38,34	89,78	74,36	9,25	-9,83	55,19	-20,102
700	42,29	95,99	77,01	13,29	-10,59	66,10	-20,635
800	45,62	101,86	79,76	17,69	-11,12	77,08	-21,056
900	48,50	107,41	82,52	22,40	-11,45	88,13	-21,401
1000	50,98	112,65	85,28	27,38	-11,60	99,22	-21,682

пии. Установленная величина барьера внутреннего вращения была подтверждена результатами микроволновых исследований, выполненных Лайдом и Манном [872]. В работе Кубе и Харрисона [775] даны термодинамические функции для состояния идеального газа, рассчитанные на основании вышеприведенных данных. Джаффе [678] определил энтальпию сгорания жидкого триметиламина и вычислил $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -10,94$ ккал/моль. Энтальпия испарения, полученная Астоном и др. [42] и пересчитанная для 298°K , позволила получить значение $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -5,70$ ккал/моль. В работе Караша [744] приводятся три значения энтальпии сгорания, полученные в более старых и малодоступных исследованиях. Два из этих значений сильно отличаются от величины, полученной Джаффе, а третье находится в отличном соответствии.

№ 610. Триэтиламин, $\text{C}_6\text{H}_{15}\text{N}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 101,188

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	38,46	96,90	96,90	0,00	-23,80	26,36	-19,320
300	38,66	97,14	96,91	0,08	-23,86	26,67	-19,425
400	48,70	109,66	98,54	4,45	-26,52	43,93	-24,000
500	58,10	121,56	101,97	9,80	-28,67	61,80	-27,011
600	66,10	132,88	106,18	16,02	-30,32	80,05	-29,156
700	72,80	143,58	110,77	22,98	-31,54	98,55	-30,767
800	78,56	153,69	115,51	30,55	-32,39	117,18	-32,011
900	83,50	163,23	120,29	38,66	-32,91	135,92	-33,005
1000	87,80	172,26	125,04	47,23	-33,14	154,71	-33,811

По данным измерения энтальпии сгорания Джаффе [678] и Лауч, Эрцбергер и Требер [851] вычислили $\Delta H_{298}^{\circ}(l)$, равные $-32,07$ и $-29,6$ ккал/моль. Принято первое значение, полученное Джаффе в результате более тщательно выполненных исследований. На основании данных измерения давления пара Копп и Файндлей [273] рассчитали константы уравнения Антуана. Их уравнение очень хорошо согласуется со старыми данными Жуковского [705], однако плохо согласуется с результатами Полауда и Мела [1173]. Уравнение Коппа и Файндлея признано наиболее точным и использовано в сочетании с критическими константами, отобранными Кобе и Линном [780] ($T_c = 532^{\circ}\text{K}$ и $P_c = 30$ атм), а также с уравнением Хагенмахера [560] для расчета значения $\Delta H_{298}^{\circ} - 8,29$ ккал/моль. Исходя из этой величины, мы рассчитали $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -23,8$ ккал/моль. Караш [744] приводит значение, определенное более 50 лет назад, которое на 8 ккал/моль отличается от величины, установленной Джаффе.

Согласно Полауду и Мелу [1173], $T_m = 158,5^{\circ}\text{K}$, а по Коппу и Файндлею [273], $T_b = 362,7^{\circ}\text{K}$. Термодинамические функции оценены с использованием констант, приведенных в табл. XI.1, и значений для 2-этилентана.

Циклические амины. Таблицы для состояния идеального газа

№ 611. Этиленмин, $\text{C}_2\text{H}_5\text{N}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 43,068

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	12,55	59,90	59,90	0,00	29,50	42,54	-31,18
300	12,63	59,98	59,91	0,03	29,48	42,62	-31,06
400	16,83	61,20	60,45	1,51	28,78	47,17	-29,77
500	20,52	68,37	61,62	3,38	27,1	51,98	-22,718
600	23,56	72,39	63,08	5,59	26,86	56,93	-20,73
700	26,05	76,21	64,69	8,07	26,38	61,99	-19,372
800	28,14	79,83	66,36	10,78	26,03	67,10	-18,329
900	29,92	83,25	68,04	13,69	25,81	72,25	-17,511
1000	31,45	86,48	69,73	16,76	25,69	77,42	-16,919

Результаты тщательных измерений энтальпии сгорания жидкого этиленмина, выполненных Нелсоном и Джессаном [1052], позволяют получить значение $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = 21,96$ ккал/моль. Согласно Вепкеру [1589], $T_b = 329^{\circ}\text{K}$. Оценка энтропии испарения 22 кал/(моль °K) приводит к значению $\Delta H_v = 7,24$ ккал/моль.

Если же привить оценку ΔC_p испарения равной -10 кал/(моль °K), то $\Delta H_{298}^{\circ} = 7,55$ ккал/моль, откуда $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 29,5$ ккал/моль. Согласно Тиммермансу [1502], $T_m = 195,2^{\circ}\text{K}$.

Томпсон и Кейв [1489], а также Хоффман, Эванс и Глоклер [612] определили основные частоты на основании изучения инфракрасных спектров и спектров комбинационного рассеяния. Несмотря на некоторые различия в отнесении основных частот к различным видам колебаний, их численные значения достаточно хорошо согласуются в отношении 16 из 18 частот. Томпсон и Кейв не привели значения для одного вида колебаний и значение для другого подвергли сомнению. Для этих частот Хоффман, Эванс и Глоклер приняли значения 1654 и 1209 cm^{-1} . Частоту 1654 cm^{-1} нельзя с уверенностью принять для деформационного колебания группы NH, к которому она отнесена. По соотношению с другими молекулами для этого вида колебаний произвольно принята частота 800 cm^{-1} . Гарнер, Фиора и Кендрик [1523] рассчитали структурные константы из данных микроволновой спектроскопии и сделали обзор предшествующих работ в этой области. Результаты, полученные Игараси [670] при изучении дифракции электронов, согласуются в предел ошибок эксперимента. Термодинамические функции рассчитаны на основании частот с учетом исправления отнесенных, внесенного Хоффманом, Эвансом и Глоклером, и молекулярных констант Гарнера, Фиора и Кендрика.

№ 612. Пирролидин, $\text{C}_4\text{H}_9\text{N}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 71,120

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	19,39	73,97	73,97	0,00	-0,86	27,41	-20,089
300	19,53	74,10	73,98	0,04	-0,90	27,58	-20,091
400	27,33	80,80	74,84	2,39	-3,02	37,41	-20,439
500	34,39	87,68	76,72	5,49	-4,69	47,72	-20,856
600	40,31	94,49	79,11	9,23	-5,96	58,32	-21,242
700	45,22	101,08	81,78	13,51	-6,90	69,12	-21,578
800	49,35	107,39	84,59	18,25	-7,55	80,01	-21,858
900	52,85	113,41	87,46	23,36	-7,96	90,99	-22,095
1000	55,84	119,44	90,35	28,80	-8,16	102,01	-22,293

Данные, характеризующие свойства пирролидина в условиях низких температур, опубликованы в работах Хилденбранда, Зинке, Мак-Доналда, Крамера и Сталла [600], а также Мак-Каллоха, Доуслина, Хаббарда, Годда, Мессерли, Хоссенлоппа, Фроу, Доусона и Уаддингтона [948]. Результаты этих работ превосходно

согласуются. Здесь приведены результаты Мак-Каллоха и др., отличающиеся несколько большей точностью: $Tt = 207,14^\circ \text{K}$, $\Delta Ht^\circ = 0,129 \text{ ккал/моль}$, $Ttp = 215,31^\circ \text{K}$, $\Delta Hm^\circ = 2,050 \text{ ккал/моль}$, $Tb = 359,72^\circ \text{K}$, при которой $\Delta Hv = 7,89 \text{ ккал/моль}$, и $S_{298}^\circ(l) = 48,76 \text{ кал/(моль} \cdot ^\circ \text{K)}$. Результаты измерения энтальпии сгорания, полученные двумя вышеуказанными группами ученых, также прекрасно согласуются и приводят к значению $\Delta Hf_{298}^\circ(l) = -9,84 \text{ ккал/моль}$. Мак-Каллох и др. определяли также теплоемкость пара и энтальпию испарения в зависимости от температуры и рассчитали $\Delta Hv_{298}^\circ = 8,98 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta Hf_{298}^\circ(g) = -0,86 \text{ ккал/моль}$. На основании отнесения колебаний и исправленных параметров несколько ограниченного «псевдовращения» они рассчитали термодинамические функции, полностью соответствующие экспериментальным данным.

Хелм, Ланум, Кук и Болл [584] измеряли плотность, вязкость, поверхностное натяжение и коэффициент преломления чистого пирролидина. Бриглеб [169] сопоставил основность и энергии резонанса ряда органических азотсодержащих оснований, в том числе и пирролидина.

№ 613. Пиридин, $\text{C}_5\text{H}_5\text{N}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 79,098

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔHf°	ΔGf°	
298	18,67	67,59	67,59	0,00	33,50	45,46	-33,324
300	18,80	67,71	67,60	0,04	33,48	45,54	-33,171
400	25,42	74,05	68,41	2,26	32,38	49,73	-27,172
500	31,11	80,35	70,17	5,09	31,52	54,18	-23,679
600	35,72	86,44	72,38	8,44	30,87	58,77	-21,401
700	39,44	92,24	74,81	12,21	30,40	63,46	-19,812
800	42,49	97,71	77,33	16,31	30,07	68,20	-18,630
900	45,04	102,87	79,89	20,69	29,85	72,98	-17,722
1000	47,17	107,73	82,43	25,30	29,76	77,79	-16,999

Работа по вычислению термодинамических свойств пиридина, выполненная Мак-Каллохом, Доуслином, Мессерли, Хоссенлоппом, Кинченло и Уаддингтоном [949], содержит следующие данные: $Ttp = 231,48^\circ \text{K}$, $\Delta Hm^\circ = 1,979 \text{ ккал/моль}$, $Tb = 388,38^\circ \text{K}$, при этом $\Delta Hv = 8,392 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}^\circ(l) = 42,52 \text{ кал/(моль} \cdot ^\circ \text{K)}$, $S_{298}^\circ(g) = 67,59 \text{ кал/(моль} \cdot ^\circ \text{K)}$, $\Delta Hf_{298}^\circ(l) = 23,89 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta Hf_{298}^\circ(g) = 33,50 \text{ ккал/моль}$. Обзор более ранних работ сделал Ли [864], который получил соответствующее значение с несколько меньшей точностью. Данные Херингтона и Мартина [585] по дав-

лению пара, а также Кокса, Чоллонера и Митэма [288] по энтальпии образования превосходно согласуются с соответствующими данными Мак-Каллоха и др.

№ 614. α -Пиколин, $\text{C}_6\text{H}_7\text{N}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 93,124

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔHf°	ΔGf°	
298	23,90	77,68	77,68	0,00	23,65	42,32	-31,017
300	24,05	77,83	77,69	0,05	23,62	42,43	-30,909
400	31,92	85,85	78,73	2,86	22,17	48,93	-26,735
500	38,82	93,74	80,94	6,40	21,01	55,77	-24,374
600	44,55	101,34	83,71	10,58	20,11	62,80	-22,873
700	49,27	108,57	86,75	15,28	19,45	69,98	-21,846
800	53,21	115,41	89,91	20,41	18,97	77,22	-21,095
900	56,52	121,88	93,11	25,90	18,67	84,52	-20,524
1000	59,34	127,98	96,29	31,69	18,54	91,86	-20,074

Исчерпывающие термодинамические данные для α -пиколина взяты из работы Скотта, Хаббарда, Мессерли, Годда, Хоссенлоппа, Гуда, Доуслина и Мак-Каллоха [1315]. Полученные в этой работе результаты включают следующие значения: $Ttp = 206,45^\circ \text{K}$, $\Delta Hm^\circ = 2,324 \text{ ккал/моль}$, $\Delta Hv = 8,654 \text{ ккал/моль}$ при $Tb = 402,54^\circ \text{K}$, $\Delta Hv_{298}^\circ = 10,15 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}^\circ(l) = 52,07 \text{ кал/(моль} \cdot ^\circ \text{K)}$, $S_{298}^\circ(g) = 77,68 \text{ кал/(моль} \cdot ^\circ \text{K)}$, $\Delta Hf_{298}^\circ(l) = 13,50 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta Hf_{298}^\circ(g) = 23,65 \text{ ккал/моль}$. Измеренная энтропия соответствует свободному вращению метильной группы. Данные по давлению пара, полученные Херингтоном и Мартином [585], и значения точки плавления и криоскопической энтальпии плавления, установленные Биддискомбом, Коулсоном, Хандли и Херингтоном [127], отлично согласуются между собой. Вторые вириальные коэффициенты и рассчитанные значения энтальпии испарения, установленные Андоном, Коксом, Херингтоном и Мартином [21], а также Коксом и Андоном [287], удовлетворительно согласуются с результатами Скотта и др. Энтальпия сгорания, определенная Коксом, Чоллонером и Митэмом [288], приводит к значению $\Delta Hf_{298}^\circ(l) = 14,10 \text{ ккал/моль}$. Нет основания искать причины несоответствия, которое лишь немного превышает сумму экспериментальных ошибок.

№ 615. β -Пиколин, $\text{C}_6\text{H}_7\text{N}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 93,124

Полные термодинамические данные для β -пиколина взяты из работы Скотта, Гуда, Гатри, Годда, Хоссенлоппа, Осборна и Мак-Каллоха [1310]. Их результаты включают следующие значения:

T, °K	кал/(моль · К)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	23,80	77,67	77,67	0,00	25,37	44,04	-32,280
300	23,94	77,82	77,68	0,05	25,34	44,15	-32,164
400	31,82	85,81	78,71	2,85	23,87	50,66	-27,678
500	38,74	93,68	80,92	6,38	22,71	57,50	-25,130
600	44,47	101,26	83,68	10,55	21,80	64,54	-23,506
700	49,19	108,48	86,72	15,24	21,13	71,72	-22,392
800	53,12	115,31	89,87	20,36	20,65	78,98	-21,574
900	56,43	121,77	93,06	25,84	20,34	86,29	-20,953
1000	59,23	127,86	96,24	31,63	20,20	93,63	-20,463

$T_m = 255,01^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 3,389 \text{ ккал/моль}$, $\Delta H_v = 8,932 \text{ ккал/моль}$ при $T_b = 417,29^\circ \text{K}$, $\Delta H_v_{298}^\circ = 10,62 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}^\circ(l) = 51,70 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$, $S_{298}^\circ(g) = 77,67 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$, $\Delta H_f_{298}^\circ(l) = 14,75 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_f_{298}^\circ(g) = 25,37 \text{ ккал/моль}$. Экспериментально установленная энтропия свидетельствует о свободном вращении метильной группы. Точка плавления и криоскопически найденная энтальпия плавления приведены в работе Биддискомба, Коулсона, Хандли и Херингтона [127]. Данные по давлению пара получены Херингтоном и Мартином [585], а вторые вириальные коэффициенты и рассчитанные энтальпии испарения опубликованы в работе Андона, Кокса, Херингтона и Мартина [21], а также Кокса и Андона [287]; они хорошо согласуются с результатами Скотта и др. Энтальпия сгорания, определенная Коксом, Чолонером и Митэмом [288], приводит к значению $\Delta H_f_{298}^\circ(l) = 16,32 \text{ ккал/моль}$. Не удалось найти явных причин, объясняющих расхождение со значениями Скотта и др., которое более чем в пять раз превышает сумму экспериментальных ошибок.

Аниламины. Таблица для состояния идеального газа

№ 616. Анилин, $\text{C}_6\text{H}_7\text{N}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 93,124

Термодинамические свойства анилина определены Хаттоном, Хилденбрандом, Зинке и Сталлом [579] по результатам собственных измерений в сочетании с литературными данными. Приведенные в этой работе низкотемпературные данные, в том числе $T_{lp} = 267,13^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 2,519 \text{ ккал/моль}$ и $S_{298}^\circ(l) = 45,72 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$,

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	25,91	76,28	76,28	0,00	20,76	39,84	-29,205
300	26,07	76,45	76,29	0,05	20,73	39,96	-29,109
400	31,17	85,09	77,41	3,08	19,50	46,57	-25,444
500	39,81	93,45	79,79	6,84	18,55	53,45	-23,363
600	46,09	101,38	82,73	11,19	17,83	60,50	-22,035
700	50,32	108,81	85,93	16,02	17,30	67,66	-21,123
800	53,79	115,76	89,23	21,23	16,91	74,87	-20,454
900	56,71	122,27	92,54	26,76	16,64	82,14	-19,946
1000	59,18	128,38	95,83	32,56	16,51	89,43	-19,545

хорошо согласуются с результатами предшествующих, более узких работ Паркса, Хаффмана и Бармора [1106]. Величина теплоемкости анилина в жидком состоянии при температуре около 298°K в сочетании с результатами измерений Хафа, Мейсона и Сейджа [616, 617] в условиях высоких температур приводит к значению $C_p(l) = 33,71 + 0,0409T$ [кал/(моль · °K)]. Энтальпия сгорания, по данным измерений Хаттона и др., также хорошо согласуется со значением, полученным Андерсоном и Джилбертом [17] и пересмотренным Коулзом и Джилбертом [244]. После внесения исправлений, связанных с принятием атомного веса углерода, равным 12,010, получено среднее значение $\Delta H_f_{298}^\circ(l) = 7,43 \text{ ккал/моль}$. При расчете термодинамических функций для состояния идеального газа использованы отнесения колебаний по Эвансу [391], несколько пересмотрены лишь величины барьеров внутреннего вращения. Значения функций свободной энергии для жидкости и газа использованы затем в сочетании с литературными данными при расчете величин $\Delta H_v_{298}^\circ = 13,325 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_f_{298}^\circ(g) = 20,76 \text{ ккал/моль}$. Согласно расчетам, температура кипения равна $457,55^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 10,643 \text{ ккал/моль}$.

Нитрилы. Таблицы для состояния идеального газа

№ 617. Ацетонитрил, $\text{C}_2\text{H}_3\text{N}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 41,052

Термодинамические функции сравнительно недавно рассчитаны Шиллаи и Клевелепдом [1148] на основании принятых в работе Томаса, Шеррарда и Шеридана [1485] отнесений частот колебаний и структурных молекулярных постоянных. Правильность принятых структурных постоянных подтверждается работами Костейна [275]

T, °K	кал/(моль °K)			кал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	12,48	58,19	58,19	0,00	21,00	25,24	-18,50
300	12,52	58,27	58,20	0,03	20,99	25,27	-18,407
400	14,62	62,16	58,71	1,39	20,46	26,78	-14,63
500	16,59	65,64	59,76	2,95	19,99	28,41	-12,418
600	18,35	68,83	61,01	4,70	19,58	30,13	-10,970
700	19,90	71,77	62,34	6,61	19,23	31,92	-9,907
800	21,26	74,52	63,69	8,67	18,94	33,76	-9,221
900	22,45	77,10	65,04	10,86	18,70	35,62	-8,670
1000	23,50	79,52	66,37	13,16	18,53	37,52	-8,199

и Венкатесварлу, Бейкера и Горди [1533]. Результаты расчетов Пиллаи и Клевеленда хорошо согласуются с более ранними данными Эвелла и Боурланда [400], Томпсона [1488], а также Гюнтарда и Ковача [549].

Иванцов [675] измерял теплоемкость пара и теплоту испарения с помощью современного струйного калориметра. Полученные им значения теплоемкостей, пересчитанные для нулевого давления, блестяще согласуются со спектроскопическими данными. Согласно определению Иванцова, $T_b = 354,8^\circ \text{K}$, при этой температуре $\Delta H_v = 7,3 \text{ ккал/моль}$.

Патнам, Мак-Ичерн и Килпатрик [1209] изучали низкотемпературные свойства ацетонитрила и получили следующие результаты: $T_t = 216,9^\circ \text{K}$, $\Delta H_t^\circ = 0,215 \text{ ккал/моль}$, $T_{tp} = 229,32^\circ \text{K}$, $\Delta H_{tm}^\circ = 1,952 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{v_{298}}^\circ = 7,94 \text{ ккал/моль}$; они рассчитали $S_{298}^\circ(l) = 35,76 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$ и $S_{298}^\circ(g) = 58,67 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$. Величина энтропии, рассчитанная по методу, основанному на применении третьего закона термодинамики, выше спектроскопического значения на $0,48 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$. Расхождение можно объяснить тем, что использовалось экспериментальное значение $\Delta H_{v_{298}}^\circ$; экстраполяция результатов Иванцова [675] приводит к $\Delta H_{v_{298}}^\circ = 7,86 \text{ ккал/моль}$ и $S_{298}^\circ(g) = 58,40 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$.

Единственные доступные данные по энтальпии образования приведены в работе Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе [1249]. В качестве наиболее надежного принято их значение для газообразного состояния $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = 21,0 \text{ ккал/моль}$, основанное на результатах Томсена [1495]. Россини и др. отобрали также значения $T_m = 228,3^\circ \text{K}$ и $\Delta H_m^\circ = 2,13 \text{ ккал/моль}$. Праузниц и Каргер [1185] получили значения вторых вириальных коэффициентов при низких давлениях в температурном интервале $40-100^\circ \text{C}$ и рассчитали константы равновесия димеризации.

№ 618. Акрилонитрил, $\text{C}_3\text{H}_3\text{N}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 53,062

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	15,24	65,47	65,47	0,00	44,20	46,68	-34,215
300	15,30	65,57	65,48	0,03	44,19	46,69	-34,014
400	18,36	70,40	66,11	1,72	43,75	47,60	-26,006
500	20,95	74,78	67,42	3,69	43,36	48,61	-21,245
600	23,11	78,80	68,98	5,90	43,03	49,69	-18,097
700	24,90	82,50	70,65	8,30	42,74	50,82	-15,866
800	26,43	85,93	72,35	10,87	42,50	51,99	-14,202
900	27,75	89,12	74,04	13,58	42,30	53,19	-12,915
1000	28,88	92,10	75,70	16,41	42,16	54,41	-11,890

Термодинамические функции для состояния идеального газа рассчитаны из спектроскопических данных Халверсоном, Стаммом и Уолоном [568]. Энтальпия сгорания жидкого акрилонитрила измерена Девисом и Видеманом [314], получившими результат $\Delta H_{f_{298}}^\circ(l) = 35,9 \text{ ккал/моль}$. По данным этих исследователей, $T_m = 189,5^\circ \text{K}$ и $T_b = 350,5^\circ \text{K}$, при которой $\Delta H_v = 7,8 \text{ ккал/моль}$. Оценка энтальпии испарения при 298°K приводит к значению $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = 44,2 \text{ ккал/моль}$.

№ 619. Пропионитрил, $\text{C}_3\text{H}_5\text{N}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 55,078

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	17,46	68,50	68,50	0,00	12,10	22,98	-16,844
300	17,53	68,61	68,51	0,04	12,08	23,05	-16,789
400	21,18	74,16	69,24	1,98	11,19	26,84	-14,665
500	24,52	79,26	70,74	4,26	10,43	30,84	-13,481
600	27,42	83,99	72,56	6,86	9,79	34,99	-12,743
700	29,94	88,41	74,51	9,73	9,27	39,23	-12,248
800	32,14	92,55	76,51	12,84	8,86	43,53	-11,893
900	34,05	96,45	78,51	16,15	8,56	47,89	-11,629
1000	35,70	100,13	80,49	19,64	8,35	52,28	-11,425

Вебер и Килпатрик [1583] изучали свойства пропионитрила при низких температурах и получили следующие данные: $T_t = 176,96^\circ \text{K}$, $\Delta H_t^\circ = 0,408 \text{ ккал/моль}$, $T_m = 180,37^\circ \text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,202 \text{ ккал/моль}$.

$S_{298}^{\circ}(l) = 45,25 \text{ ккал/(моль}\cdot\text{°K)}$, $\Delta H_{298}^{\circ} = 6,632 \text{ ккал/моль}$ и $S_{298}^{\circ}(g) = -68,75 \text{ ккал/(моль}\cdot\text{°K)}$. Дункан и Янц [357] произвели отнесения основных частот и рассчитали термодинамические функции, приняв потенциальный барьер внутреннего вращения равным $5,2 \text{ ккал/моль}$. Вебер и Килпатрик [1583] сочли неправильной величину $S_{298}^{\circ}(g) = -67,81 \text{ ккал/(моль}\cdot\text{°K)}$, полученную Дунканом и Янцем, и дали свое значение $S_{298}^{\circ}(g) = 68,58 \text{ ккал/(моль}\cdot\text{°K)}$, основанное на использовании величин моментов инерции и потенциального барьера $3,05 \text{ ккал/моль}$, полученного Лернером и Дейли [856] и Лаури [849]. Проверка этих расчетов приводит к значению $S_{298}^{\circ}(g) = 67,61 \text{ ккал/(моль}\cdot\text{°K)}$, если пользоваться параметрами Дункана и Янца, и к значению $S_{298}^{\circ}(g) = 68,24 \text{ ккал/(моль}\cdot\text{°K)}$, если принять параметры Вебера и Килпатрика. Причина таких расхождений не выяснена. Для наших целей мы приняли значение $S_{298}^{\circ}(g) = 68,50 \text{ ккал/(моль}\cdot\text{°K)}$, которое получается при сочетании величины потенциального барьера 2500 ккал/моль с отнесениями Дункана и Янца. Теплоемкости рассчитаны также с учетом этих отнесений и указанной величины барьера.

Иванцов [675] измерял энтальпию испарения при различных температурах и получил, в частности, значение $\Delta H_{\nu} = 7,353 \text{ ккал/моль}$ при $T_b = 370,32^{\circ} \text{ K}$. Известно лишь одно значение энтальпии образования $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = 3,45 \text{ ккал/моль}$, вычисленное из энтальпии сгорания, указанной Карашем [744] и основанной на результатах Лемоулта. Учитывая, что работа Лемоулта по бутиронитрилу хорошо согласуется с современными определениями, это значение принято как достаточно достоверное. Полученная Вебером и Килпатриком [1583] энтальпия испарения приводит к значению $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -12,1 \text{ ккал/моль}$.

№ 620. Бутиронитрил, C_4H_7N (состояние идеального газа).

Мол. вес 69,104

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	23,19	77,78	77,78	0,00	8,14	25,97	-19,032
300	23,28	77,93	77,79	0,05	8,11	26,07	-18,994
400	28,39	85,34	78,76	2,64	6,94	32,25	-17,618
500	33,05	92,18	80,77	5,71	5,94	38,69	-16,912
600	37,07	98,57	83,21	9,22	5,14	45,32	-16,506
700	40,51	104,55	85,84	13,11	4,51	52,07	-16,256
800	43,48	110,16	88,53	17,31	4,03	58,89	-16,088
900	46,04	115,43	91,23	21,79	3,69	65,78	-15,972
1000	48,22	120,40	93,90	26,50	3,49	72,69	-15,886

По данным измерения энтальпии сгорания Эванс и Скиннер [388] вычислили $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -1,39 \text{ ккал/моль}$. Караш [744] на основании приводимых им данных пятидесятилетней давности, полученных Лемоулом, дает значение $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -2,0 \text{ ккал/моль}$, которое можно считать достаточно хорошо согласующимся с приведенным выше значением. Иванцов [675] определял энтальпию испарения в температурном интервале $85-116^{\circ} \text{ C}$ и установил, что $T_b = 390,47^{\circ} \text{ K}$ и при этой температуре $\Delta H_{\nu} = 8,13 \text{ ккал/моль}$. На основании экстраполяции результатов Иванцова выведены значения $\Delta H_{\nu}^{\circ} = 9,53 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 8,14 \text{ ккал/моль}$. Термодинамические функции оценены с использованием констант, приведенных в табл. XI.1, и значений для *n*-бутана.

Данные Хейма [582] по давлению пара превосходно согласуются с результатами Иванцова. Согласно экспериментальным данным Тиммерманса [1500], $T_m = 164^{\circ} \text{ K}$ и $\Delta H_m^{\circ} = 1,2 \text{ ккал/моль}$.

№ 621. Изобутиронитрил, C_4H_7N (состояние идеального газа).

Мол. вес 69,104

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	23,04	74,88	74,88	0,00	6,07	24,76	-18,149
300	23,13	75,03	74,89	0,05	6,04	24,87	-18,120
400	28,56	82,44	75,86	2,64	4,87	31,34	-17,121
500	33,33	89,34	77,87	5,74	3,90	38,07	-16,640
600	37,39	95,79	80,33	9,28	3,12	44,98	-16,382
700	40,81	101,81	82,97	13,19	2,52	52,01	-16,236
800	43,74	107,46	85,68	17,42	2,07	59,10	-16,145
900	46,25	112,76	88,40	21,93	1,76	66,25	-16,087
1000	48,40	117,75	91,09	26,66	1,57	73,44	-16,049

По данным измерения энтальпии сгорания Эванс и Скиннер [388] вычислили $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -2,92 \text{ ккал/моль}$. Более ранние данные неизвестны. Иванцов [675] определял энтальпию испарения в температурном интервале $70-102^{\circ} \text{ C}$ и установил, что $T_b = 376,76^{\circ} \text{ K}$; при этой температуре $\Delta H_{\nu} = 7,754 \text{ ккал/моль}$. Экстраполяция данных Иванцова приводит к значениям $\Delta H_{\nu}^{\circ} = 8,99 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 6,07 \text{ ккал/моль}$. Термодинамические функции для состояния идеального газа определены с использованием констант, приведенных в табл. XI.1, и значений для изобутана. Согласно Тиммермансу [1502], $T_m = 201,7^{\circ} \text{ K}$.

№ 622. Бензонитрил, C_7H_5N (состояние идеального газа).

Мол. вес 103,118

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	26,07	76,73	76,73	0,00	52,30	62,35	-45,702
300	26,21	76,90	76,74	0,05	52,28	62,41	-45,464
400	33,65	85,49	77,86	3,06	51,47	65,92	-36,015
500	39,85	93,68	80,21	6,74	50,83	69,61	-30,424
600	44,80	101,40	83,11	10,98	50,32	73,41	-26,737
700	48,79	108,62	86,24	15,67	49,93	77,30	-24,131
800	52,08	115,35	89,46	20,72	49,62	81,22	-22,187
900	54,80	121,65	92,69	26,06	49,39	85,18	-20,685
1000	57,08	127,54	95,89	31,66	49,28	89,17	-19,488

По данным измерения энтальпии сгорания Эванс и Скиппер [388] вычислили $\Delta H_f^\circ(л) = 39,0$ ккал/моль. Приводимое в работе Караша [744] более старое и менее надежное значение энтальпии сгорания дает 36,3 ккал/моль. По данным о давлении пара, опубликованным Джорданом [703], Эванс и Скиппер рассчитали $\Delta H_v^\circ = 13,26$ ккал/моль и $\Delta H_f^\circ(г) = 52,3$ ккал/моль. Грин [535] сделал отнесения частот колебаний и рассчитал термодинамические функции вплоть до 1000° K. По данным измерений Витшонке [1623], $T_m = 260,40^\circ$ K и $\Delta H_m^\circ = 2,60$ ккал/моль. Согласно Тиммермансу [1501], $T_m = 259,35^\circ$ K; это может указывать на существование второй кристаллической формы, поскольку данные Сталла [1432] согласуются с результатами, полученными Витшонке. Принято значение $T_b = 464,15^\circ$ K, которое является средней величиной результатов Тиммерманса [1501], Джордана [703] и Сталла [1432]. Филип и Уотертон [1141] экспериментально определили $\Delta H_v = 11,0$ ккал/моль при температуре кипения.

Нитроалканы. Таблицы для состояния идеального газа

№ 623. Нитрометан, CH_3NO_2 (состояние идеального газа).

Мол. вес 61,042

Джонс и Джонок [702] изучали низкотемпературные свойства нитрометана и установили, что $T_{tp} = 244,73^\circ$ K и $\Delta H_m^\circ = 2,319$ ккал/моль; по их расчетам $S_{298}^\circ(л) = 41,05$ кал/(моль·°K). На основании тщательного определения точки замерзания Тупс [1515] сооб-

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	13,70	65,73	65,73	0,00	-17,86	-1,66	1,217
300	13,76	65,82	65,74	0,03	-17,88	-1,56	1,137
400	16,80	70,20	66,31	1,56	-18,69	4,01	-2,191
500	19,56	74,25	67,50	3,38	-19,32	9,76	-4,267
600	21,92	78,03	68,94	5,46	-19,78	15,62	-5,691
700	23,90	81,57	70,50	7,75	-20,11	21,55	-6,728
800	25,56	84,87	72,09	10,23	-20,32	27,52	-7,517
900	26,97	87,96	73,68	12,86	-20,44	33,51	-8,136
1000	28,17	90,87	75,26	15,61	-20,48	39,51	-8,634

щил, что $T_m = 244,60^\circ$ K, т. е. более чем на $0,1^\circ$ ниже тройной точки, установленной Джонсом и Джонок. Причина такого расхождения не ясна. Мак-Каллох, Скотт, Пеннингтон, Хоссепплоп и Уаддингтон [964] измеряли теплоемкость пара, давление пара и энтальпию испарения в широком интервале температур. Полученные ими экспериментальные данные включают следующие значения: $T_b = 374,34^\circ$ K, при этой температуре $\Delta H_v = 8,120$ ккал/моль, $\Delta H_v^\circ = 9,17$ ккал/моль и $S_{298}^\circ(г) = 65,73$ кал/(моль·°K). Соответствие между значениями функций, установленными калориметрическим и спектроскопическим методами, достигнуто путем допущения вполне возможного влияния ангармоничности и свободного внутреннего вращения. Термодинамические функции при температурах вплоть до 1000° K рассчитаны на этой основе. Мак-Каллох и др. приводят ссылки на предшествующие работы, в том числе на работы Питцера и Гуинна [1161] и Де Вриса и Коллинса [324] по изучению теплоемкости пара, а также Метюса [940] по определению энтальпии испарения. Отнесение частот колебаний взяты из работы Смита, Пана и Нилсена [1379]. Свободное внутреннее вращение подтверждается результатами микроволновых спектроскопических исследований, выполненных Таппенбаумом, Джонсоном, Майерсом и Гуинном [1466].

Мак-Каллох и др. [964] приводят неопубликованные данные по калориметрии сгорания, полученные в лабораториях Национального бюро стандартов США; эти данные приводят к значению $\Delta H_f^\circ(л) = -27,03$ ккал/моль. Величины энтальпии сгорания, полученные Холкомбом и Дорсеєм [613], а также Кассом, Флетчером, Мортимером, Куинси и Спрингаллом [200], достаточно хорошо согласуются между собой, однако на 5–6 ккал/моль отличаются от неопубликованных значений. Если рассматривать результаты для всего ряда нитроалканов, то данные Мак-Каллоха и др. кажутся более точными, и поэтому они приняты здесь. Более старые данные, приводимые

в работе Виховского и Россини [125], хорошо согласуются с принятым значением.

Хаф, Мейсон и Сейдж [616] измеряли теплоемкость жидкого нитрометана при температурах 310–360° К. Их результаты удовлетворяют соотношению $C_p(l) = 18,70 + 0,023T$ [ккал/(моль·°К)]. Экстраполяция к более низким температурам показывает, что их результаты, возможно, завышены, так как данные Джонса и Дженко свидетельствуют о более медленном возрастании C_p с температурой.

№ 624. Нитроэтан, $C_2H_5NO_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 75,068

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	18,69	75,39	75,39	0,00	-24,20	-1,17	0,857
300	18,78	75,51	75,40	0,04	-24,23	-1,03	0,748
400	23,66	81,60	76,19	2,17	-25,39	6,89	-3,766
500	27,92	87,35	77,85	4,75	-26,27	15,07	-6,586
600	31,45	92,76	79,89	7,73	-26,91	23,40	-8,523
700	34,38	97,83	82,10	11,02	-27,36	31,82	-9,931
800	36,81	102,59	84,36	14,58	-27,65	40,29	-11,007
900	38,89	107,05	86,64	18,37	-27,81	48,80	-11,850
1000	40,67	111,24	88,89	22,35	-27,85	57,32	-12,527

Касс, Флетчер, Мортимер, Куинси и Спринголл [200] измеряли энтальпию сгорания, в их работе приведены более ранние результаты, полученные Холкомбом и Дорсеем [613], а также неопубликованные данные Национального бюро стандартов. Все три источника достаточно хорошо согласуются, однако предпочтение отдано данным Национального бюро стандартов и принято значение $\Delta H_{298}^\circ(l) = -33,9$ ккал/моль. Тщательные исследования, выполненные Тупсом [1515], позволили ему установить $T_m = 233,63^\circ$ К и $T_b = 387,22^\circ$ К, а также вывести уравнение для давления пара. Это уравнение использовано, наряду с уравнением Хаггенмахера [560] и оценками $T_c = 582^\circ$ К и $P_c = 37$ атм, для расчета $\Delta H_v = 8,4$ ккал/моль при температуре кипения, $\Delta H_{v,298} = 9,7$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^\circ(g) = -24,2$ ккал/моль. Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XI.1, и значений для пропана. Бирд [87] измерял теплоемкость нитроэтана и установил, что $C_p(l) = 32,9$ ккал/(моль·°К) при температурах 298–323° К.

№ 625. 1-Нитропропан, $C_3H_7NO_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 89,094

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	24,41	85,00	85,00	0,00	-29,80	0,08	-0,056
300	24,52	85,16	85,01	0,05	-29,83	0,26	-0,190
400	30,72	93,08	86,04	2,82	-31,29	10,53	-5,751
500	36,24	100,51	88,20	6,17	-32,42	21,12	-9,230
600	40,87	107,57	90,85	10,04	-33,25	31,91	-11,621
700	44,73	114,17	93,72	14,32	-33,84	42,81	-13,367
800	47,96	120,36	96,66	18,96	-34,22	53,79	-14,694
900	50,72	126,17	99,62	23,90	-34,42	64,81	-15,737
1000	53,06	131,64	102,55	29,09	-34,47	75,84	-16,575

Касс, Флетчер, Мортимер, Куинси и Спринголл [200] опубликовали результаты измерений энтальпии сгорания и привели более ранние значения Холкомба и Дорсея [613], а также неопубликованные данные Национального бюро стандартов. Все три источника хорошо согласуются, однако предпочтение отдано данным Национального бюро стандартов и принято значение $\Delta H_{298}^\circ(l) = -40,15$ ккал/моль. Тщательные исследования, выполненные Тупсом [1515], позволили ему установить $T_m = 169,16^\circ$ К и $T_b = 404,33^\circ$ К, а также вывести уравнение для давления пара. На основании уравнения Хаггенмахера [560] и оценок $T_c = 595^\circ$ К и $P_c = 36$ атм получено значение $\Delta H_v = 8,8$ ккал/моль при температуре кипения и $\Delta H_{v,298} = 10,3$ ккал/моль. По собственным данным измерения давления пара Холкомб и Дорсей рассчитали $\Delta H_{v,298} = 10,4$ ккал/моль, при этом они исследовали более широкий температурный интервал, нежели в работе Тупса. Усреднение дает $\Delta H_{298}^\circ(g) = -29,8$ ккал/моль.

Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XI.1, и значений для *n*-бутана. Бирд [87] измерял теплоемкость 1-нитропропана в температурном интервале 298–323° К. Полученные данные могут быть использованы с точностью $\pm 2\%$, если пользоваться уравнением $C_p(l) = 8,11 + 0,107T$ [кал/(моль·°К)].

№ 626. 2-Нитропропан, $C_3H_7NO_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 89,094

Энтальпия сгорания определена экспериментально Холкомбом и Дорсеем [613], а также Кассом, Флетчером, Мортимером, Куинси и Спринголлом [200]. В последней работе приводятся также неопубликованные данные Национального бюро стандартов. Все три источника хорошо согласуются, но предпочтение отдано значению Нацио-

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	24,26	83,10	83,10	0,00	-33,50	-3,06	2,240
300	24,37	83,26	83,11	0,05	-33,53	-2,87	2,090
400	30,89	91,18	84,14	2,82	-34,99	7,59	-4,146
500	36,52	98,70	86,31	6,20	-36,09	18,37	-8,027
600	41,19	105,78	88,97	10,09	-36,90	29,33	-10,685
700	45,03	112,43	91,85	14,41	-37,45	40,42	-12,619
800	48,22	118,65	94,82	19,07	-37,80	51,57	-14,087
900	50,93	124,49	97,79	24,04	-37,99	62,75	-15,238
1000	53,24	129,98	100,74	29,25	-38,02	73,96	-16,163

нального бюро стандартов при отборе $\Delta H_{f_{298}}^{\circ}(l) = -43,3$ ккал/моль. Тупс [1515] опубликовал результаты тщательных измерений, согласно которым $Tm = 181,83^{\circ}K$ и $Tb = 393,40^{\circ}K$, им выведено также уравнение для давления пара. Оно использовано, наряду с уравнением Хаггенмахера [560] и оценочными значениями $Tc = 595^{\circ}K$ и $Pc = 36$ атм, для расчета $\Delta Hv = 8,4$ ккал/моль при температуре кипения и $\Delta Hv_{298} = 9,76$ ккал/моль. На основании собственных результатов измерения давления пара Холкомб и Дорсей [613] рассчитали значение $\Delta Hv_{298} = 9,9$ ккал/моль, что хорошо согласуется с данными Тупса. Среднее значение использовано для расчета $\Delta H_{f_{298}}^{\circ}(g) = -33,5$ ккал/моль.

Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XI.1, и значений для изобутана.

№ 627. 1-Нитробутан, $C_4H_9NO_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 103,120

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	29,85	91,28	94,28	0,00	-34,40	2,42	-1,775
300	29,99	94,47	94,29	0,06	-34,44	2,65	-1,929
400	37,65	104,17	95,56	3,45	-36,22	15,30	-8,357
500	44,48	113,32	98,20	7,56	-37,60	28,34	-12,388
600	50,21	121,95	101,45	12,31	-38,63	41,63	-15,163
700	55,01	130,06	104,96	17,57	-39,36	55,07	-17,193
800	59,03	137,68	108,58	23,28	-39,84	68,59	-18,737
900	62,46	144,83	112,22	29,36	-40,10	82,17	-19,951
1000	65,39	151,57	115,82	35,76	-40,17	95,76	-20,928

По данным измерений энтальпии сгорания Холкомб и Дорсей [613] вычислили $\Delta H_{f_{298}}^{\circ}(l) = -46,03$ ккал/моль. Они измеряли также давление пара и по полученным данным определили $\Delta Hv_{298} = 11,6$ ккал/моль и $\Delta H_{f_{298}}^{\circ}(g) = -34,4$ ккал/моль. В результате тщательно выполненных исследований Тупс [1515] установил, что $Tm = 191,82^{\circ}K$ и $Tb = 425,92^{\circ}K$. Данные по давлению пара, полученные Тупсом, хорошо согласуются с результатами Холкомба и Дорсея в соответствующем температурном интервале. Они использованы, наряду с уравнением Хаггенмахера [560] и оценками $Tc = 600^{\circ}K$ и $Pc = 35$ атм, для расчета $\Delta Hv = 9,3$ ккал/моль при температуре кипения. Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XI.1, и значений для n-пентана.

№ 628. 2-Нитробутан, $C_4H_9NO_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 103,120

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	29,51	91,62	91,62	0,00	-39,10	-1,49	1,089
300	29,66	91,81	91,63	0,06	-39,14	-1,25	0,914
400	37,61	101,45	92,89	3,43	-40,94	11,66	-6,373
500	44,61	110,62	95,52	7,55	-42,32	24,98	-10,919
600	50,46	119,28	98,77	12,31	-43,33	38,54	-14,036
700	55,37	127,44	102,29	17,61	-44,02	52,24	-16,310
800	59,44	135,11	105,92	23,36	-44,47	66,02	-18,035
900	62,94	142,31	109,56	29,48	-44,68	79,85	-19,390
1000	65,96	149,11	113,18	35,93	-44,70	93,70	-20,477

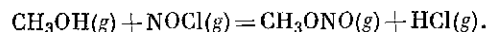
По данным измерений энтальпии сгорания Холкомб и Дорсей [613] вычислили $\Delta H_{f_{298}}^{\circ}(l) = -49,61$ ккал/моль. Они измеряли также давление пара и на основании полученных данных рассчитали $\Delta Hv_{298} = 10,48$ ккал/моль, из которого следует $\Delta H_{f_{298}}^{\circ}(g) = -39,1$ ккал/моль. Тупс [1515] не смог вызвать кристаллизацию, но ему удалось измерить давление пара и получить результаты, хорошо согласующиеся с данными Холкомба и Дорсея, и получить значение $Tb = 412,65^{\circ}K$. На основании данных Тупса по давлению пара, а также оценок $Tc = 600^{\circ}K$, $Pc = 35$ атм удалось с помощью уравнения Хаггенмахера [560] рассчитать значение $\Delta Hv = 8,8$ ккал/моль при температуре кипения. Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XI.1, и значений для 2-метилбутана.

Алкилнитриты и алкилнитраты. Таблицы для состояния идеального газа

№ 629. Метилнитрит, CH_3NO_2 (состояние идеального газа).
Мол. вес 61,042

T, °K	кал/(моль·°K)			кал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	15,11	67,95	67,95	0,00	-15,30	0,24	-0,174
300	15,17	68,05	67,96	0,03	-15,31	0,33	-0,243
400	18,24	72,84	68,59	1,71	-15,99	5,66	-3,093
500	21,01	77,22	69,88	3,67	-16,47	11,13	-4,865
600	23,35	81,26	71,45	5,89	-16,79	16,68	-6,077
700	25,32	85,11	73,12	8,33	-16,97	22,28	-6,955
800	26,97	88,50	74,83	10,95	-17,04	27,89	-7,619
900	28,36	91,76	76,53	13,71	-17,02	33,51	-8,136
1000	29,52	94,81	78,21	16,61	-16,92	39,12	-8,550

Лирмейкерс и Рамспергер [854] определяли при 25 и 50° С равновесные составы газовой системы



Полученные данные позволили на основании расчетов по второму закону термодинамики установить значение $\Delta H_{f,298}^{\circ}(g) = -16,28$ ккал/моль. Гейселер и Тирфельдер [464] сжигали метилнитрат в пламенном калориметре и определили $\Delta H_{f,298}^{\circ}(g) = -16,8 \pm 0,8$ ккал/моль. Уилер, Уитгейкер и Пайк [1601] получили данные по энтальпии взрыва газообразного метилнитрата, которые в сочетании с энтальпией реакции между азотным ангидридом и метилнитритом, найденной Реем и Отгом [1218], приводят к значению $\Delta H_{f,298}^{\circ}(g) = -14,46 \pm 0,9$ ккал/моль. Грей и Пратт [525] в своей работе приводят неопубликованное значение $\Delta H_{f,298}^{\circ}(g) = -14,93 \pm 0,26$ ккал/моль, основанное на энтальпии гидролиза, сообщенной Балдреем, Лотцгеселем и Стайлом. На основании данных, полученных при измерении энтальпии реакции между метанолом и нитрозилхлоридом, Рей и Гершон [1216] установили, что $\Delta H_{f,298}^{\circ}(g) = -15,64 \pm 0,20$ ккал/моль. Принято среднее значение $-15,3$ ккал/моль, основанное на предпочтительном отношении к результатам, полученным Греем и Праттом, а также Реем и Гершоном.

Кокс и Рей [293] измеряли константы равновесия реакции между метанолом и нитрозилхлоридом при 298° К и получили значительно меньшую величину, чем Лирмейкерс и Рамспергер. Принято значение Кокса и Рея и использовано для расчета $S_{298}^{\circ}(g) = 67,95$ кал/(моль·°K). Грей и Пратт [525] рассчитали энтропию, исходя из

структурных и спектроскопических данных для цис- и транс-изомеров. Небольшое различие в энергиях позволяет принять для данных целей допущение об одинаковом содержании каждого изомера в парах. Расчетное значение энтропии смеси составляет 74,17 кал/(моль·°K) в предположении свободного внутреннего вращения как для группы CH_3 , так и для группы NO . Грей и Ривс [527] установили, что барьер для группы NO равен 10,5 ккал/моль, что снижает энтропию до 71,17 кал/(моль·°K). Разность между этой величиной и экспериментальным значением 67,95 кал/(моль·°K) обусловлена очень высоким барьером внутреннего вращения метильной группы, и этой степени свободы приписана частота колебания 705 см⁻¹. Теплоемкость метилнитрита в состоянии идеального газа рассчитана с использованием этой частоты и отнесений колебаний по Грею и Пратту.

Томпсон и Дейнтон [1490] экспериментально определили $T_b = 255,8^{\circ}$ К и при этой температуре $\Delta H_v = 5,0$ ккал/моль. В работе Грея и Пратта дано более высокое значение $\Delta H_{v,298} = 5,4$ ккал/моль. Гейселер и Ретци [462] рассчитали термодинамические функции, принимая потенциальный барьер для нитрогруппы 9,00 ккал/моль и допуская свободное внутреннее вращение для метильной группы.

№ 630. Метилнитрат, CH_3NO_3 (состояние идеального газа).
Мол. вес 77,042

T, °K	кал/(моль·°K)			кал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	18,28	72,15	72,15	0,00	-28,80	-7,21	5,284
300	18,34	72,27	72,16	0,04	-28,82	-7,08	5,154
400	21,87	78,04	72,92	2,05	-29,50	0,29	-0,156
500	24,95	83,26	74,47	4,40	-29,97	7,79	-3,405
600	27,54	88,04	76,34	7,03	-30,26	15,37	-5,599
700	29,69	92,45	78,33	9,89	-30,40	22,99	-7,177
800	31,47	96,54	80,36	12,95	-30,43	30,62	-8,364
900	32,96	100,33	82,37	16,18	-30,36	38,25	-9,287
1000	34,19	103,87	84,34	19,53	-30,21	45,87	-10,024

Рей и Отг [1218] измеряли энтальпию реакции между азотным ангидридом и метилнитритом. Полученные ими результаты использованы в сочетании с отобранными нами значениями для метилнитрита и получена величина $\Delta H_{f,298}^{\circ}(g) = -28,2$ ккал/моль. Рей и Отг в своей работе приводят энтальпию взрыва жидкого метилнитрата, найденной Уилером, Уитгейкером и Пайком [1601], и энтальпии испарения, рассчитанной на основании данных о давлении пара Мак-Киллея-Мак-Ки Мелвин-Хьюза [977], получили значение $\Delta H_{f,298}^{\circ}(g) = -29,4$ ккал/

моль. Принято среднее значение $-28,8$ ккал/моль. Грей и Смит [528] изучали низкотемпературные свойства и получили следующие данные: $T_m = 190,2^\circ\text{K}$, $\Delta H_m^\circ = 1,97$ ккал/моль и $S_{298}^\circ(l) = 51,86$ кал/(моль $\cdot^\circ\text{K}$). Грей и Пратт [524] на основании данных о давлении пара, полученных Мак-Кинлелем-Мак-Ки и Мелвин-Хьюзом [977], рассчитали значение $\Delta H_v = 7,54$ ккал/моль при $T_b = 337,8^\circ\text{K}$, $\Delta H_{v298} = 8,1$ ккал/моль и $S_{298}^\circ(g) = 76,05$ кал/(моль $\cdot^\circ\text{K}$). Бранд и Коутон [159] сделали отнесения основных частот и рассчитали $S_{298}^\circ(g) = 75,97$ кал/(моль $\cdot^\circ\text{K}$), исходя из допущения о наличии двух видов свободного внутреннего вращения. Согласованность результатов хорошая, но явно случайная, поскольку данные микроволновой спектроскопии, опубликованные Диксоном и Уилсоном [330], могут быть интерпретированы только на основе предположения о наличии барьеров 9,10 и 2,32 ккал/моль соответственно для вращения нитро- и метильной групп. Если принять эти барьеры, то рассчитанное значение энтропии будет $72,15$ кал/(моль $\cdot^\circ\text{K}$). Данные, полученные на основе третьего закона термодинамики, оценить трудно. Стандартное вещество для сравнения не использовали, а пустой калориметр не проверяли. Грей и Смит [529] получили экспериментальные данные для этилнитрата и рассчитали $S_{298}^\circ(g) = 83,25$ кал/(моль $\cdot^\circ\text{K}$). Разность (инкремент) между значениями для метилнитрата и этилнитрата составляет всего лишь $7,2$ кал/(моль $\cdot^\circ\text{K}$), тогда как среднее значение инкремента для других классов соединений равно 10 кал/(моль $\cdot^\circ\text{K}$). Наиболее точным в данном случае признано значение, основанное на спектроскопических данных, и при расчетах термодинамических функций использовали отнесения колебаний по Бранду и Коутону, а также значения барьеров вращения и моментов инерции по Диксону и Уилсону.

№ 631. Этилнитрат, $\text{C}_2\text{H}_5\text{NO}_3$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 91,068

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	23,27	83,25	83,25	0,00	-36,80	-8,81	6,476
300	23,36	83,40	83,26	0,05	-36,82	-8,63	6,290
400	28,73	90,87	84,24	2,66	-37,85	0,93	-0,509
500	33,31	97,79	86,27	5,77	-38,58	10,72	-4,684
600	37,07	104,21	88,73	9,29	-39,05	20,62	-7,511
700	40,17	110,16	91,37	13,16	-39,31	30,59	-9,550
800	42,72	115,70	94,07	17,31	-39,42	40,58	-11,086
900	44,88	120,86	96,76	21,69	-39,39	50,58	-12,283
1000	46,69	125,68	99,42	26,27	-39,24	60,58	-13,239

При изучении свойств этилнитрата в условиях низких температур Грей и Смит [529] получили следующие данные: $T_m = 178,6^\circ\text{K}$, $\Delta H_m = 2,04$ ккал/моль и $S_{298}^\circ(l) = 59,08$ кал/(моль $\cdot^\circ\text{K}$). Эти данные нельзя считать весьма точными (ср. данные для метилнитрата), но тем не менее они здесь приняты. Фейрбразер, Скипнер и Эванс [405] по экспериментально найденному значению энтальпии сгорания рассчитали величину $\Delta H_{f298}^\circ(l) = -45,5$ ккал/моль. На основании данных о давлении пара, полученных Греем, Праттом и Ларкинсом [526], Грей и Пратт [524] рассчитали $\Delta H_v = 7,92$ ккал/моль при $T_b = 360,8^\circ\text{K}$ и $\Delta H_{v298} = 8,67$ ккал/моль. Эти значения позволили вычислить $\Delta H_{f298}^\circ(g) = -36,8$ ккал/моль и $S_{298}^\circ(g) = 83,25$ кал/(моль $\cdot^\circ\text{K}$). Значение теплоемкости для состояния идеального газа оценочное. Грей, Пратт и Ларкин [526] приводят обзор литературных данных по определению энтальпии образования.

№ 632. Пропилнитрат, $\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}_3$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 105,094

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	28,99	92,10	92,10	0,00	-41,60	-6,53	4,790
300	29,10	92,28	92,11	0,06	-41,63	-6,32	4,603
400	35,79	101,59	93,33	3,31	-42,96	5,67	-3,098
500	41,63	110,22	95,86	7,19	-43,93	17,95	-7,844
600	46,49	118,26	98,93	11,60	-44,59	30,38	-11,067
700	50,52	125,73	102,23	16,46	-44,99	42,91	-13,398
800	53,87	132,71	105,61	21,68	-45,19	55,49	-15,157
900	56,71	139,22	108,99	27,22	-45,21	68,08	-16,530
1000	59,08	145,32	112,32	33,01	-45,07	80,66	-17,628

По данным измерения энтальпии сгорания Фейрбразер, Скипнер и Эванс [405] вычислили $\Delta H_{f298}^\circ(l) = -51,27$ ккал/моль. Более ранние данные отсутствуют. Грей и Пратт [524] определили давление пара и рассчитали $\Delta H_v = 8,58$ ккал/моль при $T_b = 383,2^\circ\text{K}$ и $\Delta H_{v298} = 9,70$ ккал/моль. Дафф [355] вычислил $\Delta H_v = 7,6$ ккал/моль на основании собственных данных по давлению пара, которые совпадают с результатами Грея и Пратта при температурах вблизи нормальной точки кипения, но более высокие при 298°K . Принятые данные Грея и Пратта позволили рассчитать $\Delta H_{f298}^\circ(g) = -41,6$ ккал/моль. Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XI.1, и значений для *n*-бутана.

№ 633. Изопропилнитрат, $C_3H_7NO_3$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 105,094

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	28,84	89,20	89,20	0,00	-45,65	-9,72	7,125
300	28,95	89,38	89,21	0,06	-45,68	-9,50	6,919
400	35,96	98,70	90,43	3,31	-47,01	2,78	-1,519
500	41,91	107,38	92,96	7,22	-47,96	15,34	-6,706
600	46,81	115,47	96,05	11,66	-48,59	28,06	-10,222
700	50,82	122,99	99,36	16,55	-48,96	40,87	-12,760
800	54,13	130,00	102,76	21,80	-49,12	53,71	-14,673
900	56,92	136,54	106,16	27,35	-49,12	66,57	-16,165
1000	59,26	142,67	109,50	33,17	-48,96	79,43	-17,358

По данным измерения энтальпии сгорания изопропилнитрата Фейрбразер, Скипнер и Эванс [405] рассчитали $\Delta H_f^\circ_{298}(l) = -54,92$ ккал/моль. Более ранние данные отсутствуют. Грей и Пратт [524] определили давление пара и рассчитали $\Delta Hv = 8,35$ ккал/моль при $T_b = 375,2^\circ K$ и $\Delta Hv_{298} = 9,27$ ккал/моль. Дафф [355] также опубликовал результаты измерения давления пара, которые согласуются с данными Грея и Пратта вблизи нормальной точки кипения, но при $298^\circ K$ превосходят их на 10 мм рт. ст. и приводят к значению $\Delta Hv = 7,3$ ккал/моль. Приняты результаты Грея и Пратта, на основании которых получена величина $\Delta H_f^\circ_{298}(g) = -45,65$ ккал/моль. Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XI.1, и значений для изобутана.

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА ГАЛОГЕНСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ

Введение

Важность галогенсодержащих органических соединений со всей очевидностью была показана в недавнем обзоре [1655], согласно которому производство хлора в США должно было в 1967 г. составлять 7,5 млн. т, причем 70% общего количества хлора предназначалось для синтеза органических соединений. Предусматривалось, что значительная доля пойдет на производство поливинилхлорида — широко применяемого полимерного материала. Высокая термостойкость фторуглеродов и полифторуглеродов обуславливает их использование, несмотря на относительно высокую стоимость. Бромсодержащие и иодсодержащие соединения находят применение во многих специальных случаях, но используются они не столь широко.

Термохимия органических галогенсодержащих соединений находится все еще в неудовлетворительном состоянии. Обзор термохимии органических соединений фтора опубликован Патриком [1126, 1127]; он показал серьезную нехватку надежных данных по энтальпиям образования этих соединений. В настоящее время разработаны методы точных измерений [513], но они пока применялись лишь к сравнительно немногим соединениям. Лейчер и Скипнер [833] пересмотрели энтальпии образования органических соединений фтора на основании критического анализа имеющихся данных по водным растворам HF и газообразному CF_4 . На этой основе были произведены расчеты для всех соединений фтора, упоминающихся в этой главе и в гл. XIV (ср. табл. VIII.2 и № 704 для состояния идеального газа). Наши сведения о многих простых органических соединениях хлора получены благодаря работам, выполненным в Лундском университете (Швеция) с применением метода стационарной термодинамической бомбы. Смит, Бьеллерап, Крук и Уестермарк [1384] внесли значительные исправления в оригинальные данные, однако результаты остаются все еще довольно ненадежными. Выполненные Лейчером, Парком и их сотрудниками (Колорадский университет) измерения энтальпий реакций, а также более ранние работы Кистяковского и его учеников позволили установить энтальпии образования целого ряда соединений, содержащих фтор и хлор. Бьеллерап [139, 140] дает интересный исторический очерк развития калориметрии сжигания органических соединений брома. Как и в случае соединений фтора, хорошо разработанные методы

Таблица XII.1

Константы замещения для газообр

Тип соединения	$\Delta[\Delta H_f^{\circ}_{298}]$, ккал/моль	ΔS°_{298} , кал/(моль·°K)		
			298° K	
Монофториды				
$\text{CH}_3\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{F}$	-37,8	-5,16	-3,62	
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{F}$		-4,77	-3,46	
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{F}$	-36,5			
$\begin{array}{c} \text{H} & & \text{H} \\ & & \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CH}_3 & \rightarrow & \text{CH}_3-\text{C}-\text{CH}_3 \\ & & \\ \text{CH}_3 & & \text{F} \end{array}$	-36,3			
$\text{R}-\text{CH}_3 \rightarrow \text{R}-\text{F}$	-36,8	-4,97	-3,54	
Дифториды				
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{FCH}_2\text{F}$	-80,7	-9,98	-7,32	
$\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{CHF}_2$	-83,0	-9,44	-6,90	
$\text{RCH}(\text{CH}_3)_2 \rightarrow \text{RCHF}_2$	-81,9	-9,71	-7,11	
Трифториды				
$\text{HC}(\text{CH}_3)_3 \rightarrow \text{HCF}_3$	-130,5	-14,92	-10,94	
$\text{CH}_3\text{C}(\text{CH}_3)_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CF}_3$	-134,4	-13,87	-10,32	
$\text{RC}(\text{CH}_3)_3 \rightarrow \text{RCF}_3$	-132,5	-14,40	-10,63	
Ароматические фториды				
$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_5\text{F}$	-38,43	-6,27	-2,23	
$1,4-\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{F} \rightarrow 1,4-\text{C}_6\text{H}_4\text{F}_2$	-38,30	-6,64	-2,56	
$\text{R}-\text{C}_6\text{H}_5 \rightarrow \text{R}-\text{F}$	-38,37	-6,46	-2,40	

азных фторсодержащих соединений

ΔC_p , кал/(моль·°K)							
300° K	400° K	500° K	600° K	700° K	800° K	900° K	1000° K
-3,65	-5,12	-6,40	-7,52	-8,49	-9,38	-10,18	-10,89
-3,49	-4,97	-6,30	-7,44	-8,43	-9,32	-10,12	-10,85
-3,57	-5,05	-6,35	-7,48	-8,46	-9,35	-10,15	-10,87
-7,38	-10,32	-12,92	-15,16	-17,12	-18,86	-20,44	-21,85
-6,96	-9,84	-12,55	-14,94	-16,99	-18,80	-20,41	-21,84
-7,17	-10,08	-12,74	-15,05	-17,06	-18,83	-20,43	-21,85
-11,01	-14,89	-19,07	-22,49	-25,49	-28,16	-30,66	-32,66
-10,38	-14,80	-19,10	-22,83	-26,03	-28,80	-31,23	-33,35
-10,70	-14,85	-19,09	-22,66	-25,66	-28,48	-30,95	-33,01
-2,23	-3,26	-4,50	-5,72	-6,87	-7,89	-8,80	-9,61
-2,56	-3,27	-4,33	-5,46	-6,55	-7,54	-8,41	-9,18
-2,40	-3,27	-4,42	-5,59	-6,71	-7,72	-8,60	-9,40

Таблица XII.2

Константы замещения для газообра

Тип соединения	$\Delta[\Delta H_f^{\circ}_{298}]$, ккал/моль	ΔS°_{298} , кал/(моль·°K)		
			298° K	
Алифатические хлориды				
$\text{CH}_3\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{Cl}$	-0,39	-2,37		
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl}$	-1,88	-2,15		
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$	-0,95	1,39		
$\begin{array}{c} \text{H} & & \text{H} \\ & & \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CH}_3 & \rightarrow & \text{CH}_3-\text{C}-\text{CH}_3 \\ & & \\ \text{CH}_3 & & \text{Cl} \end{array}$	-2,85	-2,09		

азных хлорсодержащих соединений

ΔC_p , кал/(моль·°K)								
298° K	300° K	400° K	500° K	600° K	700° K	800° K	900° K	1000° K
-2,84	-2,87	-4,16	-5,47	-6,69	-7,79	-8,79	-9,68	-10,47
-2,58	-2,61	-3,98	-5,34	-6,57	-7,67	-8,66	-9,55	-10,35
-3,05	-3,06	-4,24	-5,61	-6,87	-7,98	-8,99	-9,87	-10,63
-2,27	-2,28	-3,78	-5,14	-6,42	-7,55	-8,55	-9,45	-10,24

Тип соединения	$\Delta[\Delta H]_{298}^{\circ}$, ккал/моль	ΔS_{298}° , кал/(моль·°K)	ΔC_p , кал/(моль·°K)								
			298° K	300° K	400° K	500° K	600° K	700° K	800° K	900° K	1000° K
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \qquad \qquad \text{CH}_3 \\ \qquad \qquad \quad \\ \text{CH}_3 - \text{C} - \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3 - \text{C} - \text{CH}_3 \\ \qquad \qquad \quad \\ \text{CH}_3 \qquad \qquad \text{Cl} \end{array}$	-4,13	-1,17	-1,17	-1,81	-3,55	-5,40	-7,01	-8,30	-9,28	-10,05	-10,80
$\frac{1}{2} \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \frac{1}{2} \text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$	-0,43	-2,41	-2,25	-2,20	-3,80	-5,32	-6,70	-7,88	-8,92	-9,82	-10,61
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{Cl}$	-0,20										
$\begin{array}{c} \text{H} \qquad \qquad \qquad \text{H} \\ \qquad \qquad \qquad \\ \text{CH}_3\text{CH}_2 - \text{C} - \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2 - \text{C} - \text{CH}_3 \\ \qquad \qquad \qquad \\ \text{CH}_3 \qquad \qquad \qquad \text{Cl} \end{array}$	-1,68										
$\begin{array}{c} \text{H} \qquad \qquad \qquad \text{H} \\ \qquad \qquad \qquad \\ \text{CH}_3\text{CH}_2 - \text{C} - \text{CH}_3 \rightarrow \text{ClCH}_2\text{CH}_2 - \text{C} - \text{CH}_3 \\ \qquad \qquad \qquad \\ \text{CH}_3 \qquad \qquad \qquad \text{CH}_3 \end{array}$	-1,18										
$\begin{array}{c} \text{H} \qquad \qquad \qquad \text{H} \\ \qquad \qquad \qquad \\ \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2 - \text{C} - \text{CH}_3 \rightarrow \text{ClCH}_2\text{CH}_2 - \text{C} - \text{CH}_3 \\ \qquad \qquad \qquad \\ \text{CH}_3 \qquad \qquad \qquad \text{CH}_3 \end{array}$	-1,44										
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \qquad \qquad \qquad \text{CH}_3 \\ \qquad \qquad \qquad \\ \text{CH}_3\text{CH}_2 - \text{C} - \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2 - \text{C} - \text{CH}_3 \\ \qquad \qquad \qquad \\ \text{CH}_3 \qquad \qquad \qquad \text{CH}_3 \end{array}$	-4,05										
$\begin{array}{c} \text{H} \qquad \qquad \qquad \text{H} \\ \qquad \qquad \qquad \\ \frac{1}{2} \text{CH}_3\text{CH}_2 - \text{C} - \text{CH}_3 \rightarrow \text{ClCH}_2 - \text{C} - \text{CH}_3 \\ \qquad \qquad \qquad \\ \text{CH}_3 \qquad \qquad \qquad \text{Cl} \end{array}$	-1,34										
$\frac{1}{2} \text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3 \rightarrow \frac{1}{2} \text{Cl}(\text{CH}_2)_3\text{Cl}$	-1,80										
$\begin{array}{c} \text{H} \qquad \qquad \qquad \text{H} \\ \qquad \qquad \qquad \\ \frac{1}{3} \text{CH}_3\text{CH}_2 - \text{C} - \text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \frac{1}{3} \text{ClCH}_2 - \text{C} - \text{CH}_2\text{Cl} \\ \qquad \qquad \qquad \\ \text{CH}_3 \qquad \qquad \qquad \text{Cl} \end{array}$	-1,07										
$\text{R} - \text{CH}_3 \rightarrow \text{R} - \text{Cl}$	-1,67	-1,93	-2,46	-2,47	-3,92	-5,38	-6,71	-7,86	-8,87	-9,74	-10,52
Ароматические хлориды											
$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$	0,44	-3,38	-1,37	-1,38	-2,63	-4,05	-5,42	-6,71	-7,83	-8,82	-9,71

Константы замещения для

газообразных бромосодержащих соединений

Тип соединения	$\Delta[\Delta H_{298}^\circ]$, ккал/моль	ΔS_{298}° , кал/(моль °K)	ΔC_p , кал/(моль °K)										
			298° K	300° K	400° K	500° K	600° K	700° K	800° K	900° K	1000° K		
Алифатические бромиды													
$\text{CH}_3\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{Br}$	11,24	0,34	-2,44	-2,47	-3,75	-5,10	-6,38	-7,53	-8,58	-9,50	-10,33		
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{Br}$	9,52	0,64	-2,09	-2,18	-3,61	-5,03	-6,32	-7,47	-8,50	-9,42	-10,24		
$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{Br} \end{array}$	8,95	0,74	-1,87	-1,94	-3,43	-4,86	-6,20	-7,36	-8,40	-9,33	-10,14		
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{Br} \end{array}$	7,67	1,17	-1,22	-1,23	-2,62	-4,16	-5,63	-6,97	-8,13	-9,16	-10,06		
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Br}$	9,15												
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_2)_3\text{Br}$	9,35												
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}_2\text{Br}$	9,09												
$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{CH}_3\text{CH}_2-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{CH}_3\text{CH}_2-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{Br} \end{array}$	8,22												
$\frac{1}{2} \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \frac{1}{2} \text{BrCH}_2\text{CH}_2\text{Br}$	10,43	0,17											
$\frac{1}{2} \begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{CH}_3\text{CH}_2-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array} \rightarrow \frac{1}{2} \begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{BrCH}_2-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{Br} \end{array}$	9,76												
$\frac{1}{2} \begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{CH}_3\text{CH}_2-\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array} \rightarrow \frac{1}{2} \begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{BrCH}_2-\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}_3 \\ \\ \text{Br} \end{array}$	8,75												
$\frac{1}{2} \begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \quad \\ \text{CH}_3 \quad \text{CH}_3 \end{array} \rightarrow \frac{1}{2} \begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \quad \\ \text{Br} \quad \text{Br} \end{array}$	9,05												
$\frac{1}{2} \begin{array}{c} \text{CH}_3 \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \quad \\ \text{CH}_3 \quad \text{CH}_3 \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \text{CH}_3 \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \quad \\ \text{Br} \quad \text{Br} \end{array}$	7,88												
$\text{R}-\text{CH}_3 \rightarrow \text{R}-\text{Br}$	9,20	0,61	-1,91	-1,96	-3,35	-4,79	-6,13	-7,33	-8,40	-9,37	-10,19		
Ароматические бромиды													
$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_5\text{Br}$	13,15	-1,07	-1,45	-1,46	-2,81	-4,24	-5,79	-6,83	-7,94	-8,92	-9,79		

Константы замещения для газооб

Тип соединения	$\Delta[\Delta H]_{298}^\circ$, ккал/моль	ΔS_{298}° , кал/(моль °К)
Алифатические иодиды		
$\text{CH}_3\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{I}$	23,6	2,30
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{I}$	22,8	2,75
$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{C}\text{I}_3-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{I} \end{array}$	22,2	2,76
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{I}$	22,9	
$\frac{1}{2} \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 \rightarrow \frac{1}{2} \text{ICH}_2\text{CH}_2\text{I}$	23,0	2,41
$\frac{1}{2} \text{CH}_3\text{CH}_2-\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array} \rightarrow \frac{1}{2} \text{ICH}_2-\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{I} \end{array}$	22,8	2,07
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{I} \end{array}$	22,1	3,62
$\text{R}-\text{CH}_3 \rightarrow \text{R}-\text{I}$	22,8	2,65
Ароматические иодиды		
$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_5\text{I}$		1,24

применялись лишь при изучении сравнительно немногих бромсодержащих соединений.

Термохимия и термодинамика галогенсодержащих органических соединений представляют интерес как с теоретической, так и с практической точки зрения. В своем обзоре Патрик [4126] указывает, что энергия связи $\text{C}-\text{F}$ возрастает с увеличением числа атомов фтора, присоединенных к данному атому углерода. Причины такой повышенной стабильности полностью не установлены. Богатая литература по вопросу об энтальпии образования радикала CF_2 и соответствующей энергии диссоциации C_2F_4 с разрывом связи $\text{C}=\text{C}$ пока еще не содержит точных значений этих величин. Барьеры внутреннего вращения в рассматриваемых соединениях свидетельствуют о необходимости дальнейших исследований. Несмотря на большое различие в электроотрицательностях и размерах атомов

Таблица XII 4

разных иодсодержащих соединений

ΔC_p , кал/(моль °К)								
298° К	300° К	400° К	500° К	600° К	700° К	800° К	900° К	1000° К
-2,03	-2,06	-3,32	-4,71	-6,04	-7,24	-8,32	-9,29	-10,13
-1,81	-1,84	-3,36	-4,89	-6,24	-7,40	-8,43	-9,36	-10,18
-1,61	-1,64	-3,18	-4,66	-6,04	-7,23	-8,28	-9,23	-10,06
-0,80	-0,81	-2,28	-3,88	-5,39	-6,79	-7,83	-8,97	-9,89
-1,56	-1,56	-3,05	-4,54	-5,93	-7,17	-8,22	-9,21	-10,07
-0,72	-0,73	-2,15	-3,68	-5,15	-6,49	-7,65	-8,67	-9,59

четырех галогенов, барьеры внутреннего вращения метильных групп изменяются лишь незначительно в таких рядах, как ряд этилгалогенидов. В ряду $\text{C}_2\text{F}_5\text{X}$ барьер повышается от 2 до 2,5 ккал/моль при переходе от $\text{X} = \text{Cl}$ до $\text{X} = \text{I}$ [1232]. Измерения теплоемкости веществ в конденсированной фазе при низких температурах и калориметрические измерения в паровой фазе помогут лучше выяснить эту тенденцию.

Из-за недостатка точных данных константы «метил»-замещения приведены в табл. XII.1—XII.4 только для монозамещенных соединений. В настоящее время не представляется возможным получить достаточно точные оценки энтальпий образования соединений с высокой степенью замещения галогенами. Исключением могут быть перфторалканы, для которых Брайант [178] и Гуд с сотр. [508] разработали соответствующие методы расчета.

Алифатические производные. Таблицы для состояния идеального газа

№ 701. Фторметан, CH_3F (состояние идеального газа).
Мол. вес 34,034

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	8,96	53,25	53,25	0,00	-55,90	-50,19	36,789
300	8,99	53,31	53,26	0,02	-55,91	-50,16	36,536
400	10,56	56,11	53,63	1,00	-56,61	-48,13	26,295
500	12,26	58,65	54,38	2,14	-57,24	-45,93	20,077
600	13,83	61,03	55,29	3,45	-57,78	-43,62	15,889
700	15,23	63,27	56,27	4,90	-58,22	-42,23	12,870
800	16,45	65,38	57,28	6,49	-58,59	-38,77	10,592
900	17,51	67,38	58,29	8,18	-58,88	-36,28	8,809
1000	18,44	69,28	59,30	9,98	-59,11	-33,76	7,378

По оценке Лейчера и Скиннера [833], $\Delta H_f^\circ = -55,9$ ккал/моль. Термодинамические функции рассчитаны на основании отобранных Смитом и Миллсом [1389] значений основных частот и моментов инерции, определенных по данным микроволновой спектроскопии Джиллиамом, Эдвардсом и Горди [485]. Джеллс и Питцер [465] провели хорошо согласующийся расчет функций, воспользовавшись частотами по Плайлеру и Бенедикту [1172] и приняв общий момент инерции $5,92 \cdot 10^{-117}$ г³·см⁶. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] приводят значения $T_m = 131,4^\circ \text{K}$ и $T_b = 194,8^\circ \text{K}$. Результаты PVT-измерений опубликованы в работе Мичелса, Висера, Ланбека и Уолкерса [998].

№ 702. Дифторметан, CH_2F_2 (состояние идеального газа).
Мол. вес 52,026

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(C^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	10,25	58,94	58,94	0,00	-108,24	-101,66	74,513
300	10,28	59,01	58,95	0,02	-108,25	-101,62	74,024
400	12,22	62,23	59,37	1,15	-108,84	-99,31	54,260
500	14,10	65,17	60,24	2,47	-109,34	-96,87	42,341
600	15,72	67,88	61,29	3,96	-109,76	-94,34	34,361
700	17,08	70,41	62,42	5,60	-110,09	-91,74	28,641
800	18,22	72,77	63,56	7,37	-110,36	-89,10	24,340
900	19,17	74,97	64,71	9,24	-110,56	-86,43	20,987
1000	19,98	77,04	65,84	11,20	-110,71	-83,76	18,304

Нейгебауер и Маргрейв [1061] измеряли энтальпию сгорания паров дифторметана. Их данные приводят к значению $\Delta H_f^\circ(g) = -108,24$ ккал/моль. Термодинамические функции рассчитаны на основании основных частот по Плайлеру и Бенедикту [1172] и величин моментов инерции, вычисленных Лайдом [865], исходя из данных микроволновой спектроскопии. Недавно выполненное Порто [1181] исследование тонкой структуры инфракрасных полос привело к результатам, прекрасно согласующимся с данными Лайда. Менее точные молекулярные данные использовали при расчете термодинамических функций Джеллс и Питцер [465], Мейстер, Доулинг и Вилецкий [990], Свердлин и Годнев [1453] и Глоклер и Эджелл [497, 498]. Согласно Россини, Вагману, Эвансу, Левину и Джаффе [1249], $T_b = 221^\circ \text{K}$.

№ 703. Трифторметан, CHF_3 (состояние идеального газа).
Мол. вес 70,018

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(C^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	12,20	62,04	62,04	0,00	-166,71	-158,48	116,165
300	12,24	62,12	62,05	0,03	-166,72	-158,43	115,412
400	14,88	66,03	62,56	1,39	-167,10	-155,61	85,015
500	16,55	69,53	63,61	2,96	-167,41	-152,70	66,740
600	18,13	72,69	64,86	4,70	-167,65	-149,73	54,536
700	19,36	75,58	66,19	6,58	-167,82	-146,73	45,808
800	20,33	78,23	67,53	8,56	-167,95	-143,71	39,257
900	20,99	80,66	68,86	10,63	-168,04	-140,67	34,158
1000	21,74	82,91	70,15	12,77	-168,09	-137,65	30,083

Нейгебауер и Маргрейв [1061] измеряли энтальпию сгорания паров трифторметана. Их данные приводят к значению $\Delta H_f^\circ(g) = -166,71$ ккал/моль. Принятые здесь термодинамические функции рассчитаны Джеллсом и Питцером [465] на основании отнесений колебаний по Плайлеру и Бенедикту [1172] и моментов инерции, вычисленных из оптических спектров Бернштейном и Герцбергом [118]. Сравнительно недавние микроволновые спектроскопические данные, полученные Гхошем, Трамбаруло и Горди [473], позволили установить структуру, прекрасно согласующуюся со структурой по Бернштейну и Герцбергу, отнесения колебаний подтверждены Декером, Мейстером и Клевелендом [316], которые рассчитали термодинамические функции, почти совпадающие с функциями, вычисленными Джеллсом и Питцером. Термодинамические функции рассчитаны также Свердлиным и Годневым [1453], а теплоемкости вы-

числены Глоклером и Эджеллом [497, 498]. Вандеркуи и Де Врис [1527] измеряли теплоемкость при 300° К и получили данные, хорошо согласующиеся с рассчитанными значениями. Низкотемпературные свойства изучали Валентайн, Бродале и Джиок [1526], которые получили следующие значения: $T_{tr} = 117,97^\circ \text{ К}$, $\Delta H_{tr} = 0,970 \text{ ккал/моль}$ и $T_b = 190,97^\circ \text{ К}$, при этом $\Delta H_v = 3,994 \text{ ккал/моль}$. Рассчитанное значение энтропии по методу, основанному на третьем законе термодинамики, превосходно согласуется со значением, вычисленным из спектроскопических данных, принятых здесь. Хоу и Мартин [615] экспериментально определяли PVT -данные и опубликовали таблицы термодинамических свойств в технической системе единиц. По их данным $T_c = 299^\circ \text{ К}$ и $P_c = 47,7 \text{ атм}$.

№ 704. Четырехфтористый углерод, CF_4 (состояние идеального газа).
Мол. вес 88,010

$T, ^\circ \text{ К}$	кал/(моль · °К)			ккал/моль			lg K_p
	C_p°	S°	$-(C^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	14,68	62,50	62,50	0,00	-223,00	-212,34	155,641
300	14,73	62,60	62,51	0,03	-223,00	-212,27	154,634
400	17,41	67,22	63,12	1,64	-223,18	-208,67	114,004
500	19,43	71,33	64,36	3,49	-223,26	-205,03	89,613
600	20,91	75,01	65,83	5,51	-223,29	-201,38	73,348
700	21,99	78,32	67,38	7,66	-223,26	-197,73	61,729
800	22,84	81,31	68,94	9,90	-223,21	-194,08	53,018
900	23,42	84,03	70,47	12,22	-223,14	-190,45	46,244
1000	23,91	86,53	71,95	14,58	-223,05	-186,85	40,835

На основании обзора термодинамических данных по CF_4 Лейчер и Скиннер [833] отобрали значения $\Delta H_f^\circ_{298}(\text{г}) = -223,0 \text{ ккал/моль}$. Недавно проведенное тщательное исследование Уолкера [1568] по определению энтальпии реакции между дицианом и трехфтористым азотом, а также работа Грипберга и Хаббарда [542] по изучению сгорания графита в атмосфере фтора подтверждают приведенное выше значение в пределах точности опыта. Целый ряд исследований не рассмотрен Лейчером и Скиннером, поскольку эти исследования выполнены с меньшей точностью, однако и они привели к результатам, согласующимся в пределах экспериментальных ошибок. Киркбридж и Дэвидсон [755] и Воробьев и Скуратов [1546] измеряли энтальпию реакции между CF_4 и щелочными металлами. В публикациях Дууса [360] и Нейгебауера и Маргрейва [1059] имеются данные по энтальпии разложения тетрафторэтилена на CF_4

и аморфный углерод. Джессап, Мак-Коски и Нелсон [691] определяли энтальпию сгорания метана во фторе, однако их данные не поддаются строгому исправлению на отклонение парообразного HF от идеального поведения. Бейбуц [59] применял метод «взрыва» и получил значение $\Delta H_f^\circ_{298}(\text{г}) = -220,1 \text{ ккал/моль}$. Представляет интерес определение энтальпии путем прямого соединения элементов, производившееся Вартенбергом и Шютте [1575], которое привело к сильно заниженному значению.

Олбрайт, Галегар и Инс [8] рассчитали термодинамические функции, воспользовавшись частотами по Клаассену [227] и приняв общий момент инерции равным $3,24 \cdot 10^{-116} \text{ г}^3 \text{ см}^6$; они учитывали также поправку на ангармоничность, основанную на данных по теплоемкости парообразного дифтордихлорметана по Мейси [935]. Принятые значения функций, рассчитанные Олбрайтом и др., за исключением небольшой поправки к значению энтропии, внесенной в связи с тем, что, согласно данным, полученным методом электронной дифракции Торнтоном [1498] и Хоффманом и Ливингстоном [611], общий момент инерции составляет $3,15 \cdot 10^{-115} \text{ г}^3 \text{ см}^6$. Другие расчеты, основанные на приближении гармонического осциллятора, выполнили Джеллс и Питцер [465], Нагараян [1043], Свердлов и Годнев [1453], Декер, Мейстер и Клевеледц [316], а также Кобе и Кобе [778]. Хванг и Мартин [669] измеряли теплоемкость пара при постоянном объеме и получили результаты, хорошо согласующиеся со спектроскопическими значениями. Эйкен и Шредер [384] изучали низкотемпературные свойства и получили следующие данные: $T_t = 76,23^\circ \text{ К}$, $\Delta H_t = 0,353 \text{ ккал/моль}$, $T_{tr} = 89,47^\circ \text{ К}$ и $\Delta H_{tr} = 0,167 \text{ ккал/моль}$. Экспериментально определенная энтропия согласуется с расчетным значением Олбрайта и др. Кострюков, Саморуков и Стрелков [801] также опубликовали низкотемпературные данные, находящиеся в удовлетворительном согласии, за исключением значения для ΔH_t , которое по их данным равно $0,415 \text{ ккал/моль}$.

Доуслин, Харрисон, Мур и Мак-Каллох [339] изучали PVT -свойства и вычислили виральные коэффициенты. Чейри [217] измерял давление пара и плотности, опубликовал расчетные таблицы и установил значения $T_c = 227,5^\circ \text{ К}$ и $P_c = 37 \text{ атм}$.

№ 705. Фторэтан, $\text{C}_2\text{H}_5\text{F}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 48,060

Термодинамические функции рассчитаны на основании отнесенной частот согласно Смитту, Саундеру, Нилсену и Фергюсону [1380], моментов инерции по Крейчману и Дейли [808], а также барьера внутреннего вращения, установленного Каталано и Питцером [205]. Значения, рассчитанные Каталано и Питцером при трех температурах, согласуются с данными, приведенными в этой работе. Энтальпия образования по оценке Лейчера и Скиннера [833] равна $-62,5 \text{ ккал/}$

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(C°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	14,11	63,32	63,32	0,00	-62,50	-50,08	36,709
300	14,17	63,41	63,33	0,03	-62,52	-50,01	36,427
400	17,57	67,96	63,92	1,62	-63,55	-45,67	24,953
500	20,72	72,23	65,16	3,54	-64,42	-41,10	17,964
600	23,44	76,25	66,68	5,75	-65,13	-36,37	13,247
700	25,77	80,04	68,32	8,21	-65,69	-31,53	9,843
800	27,76	83,62	70,01	10,89	-66,13	-26,62	7,273
900	29,49	86,99	71,71	13,76	-66,45	-21,66	5,260
1000	30,98	90,18	73,40	16,78	-66,67	-16,68	3,645

моль. Основываясь на обзорных данных по давлению пара, Ли и Россини [863] отобрали константы уравнения Антуана и рассчитали значение $T_b = 235,5^\circ \text{K}$.

№ 706. 1,1-Дифторэтан, $\text{C}_2\text{H}_4\text{F}_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 66,052

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(C°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	16,24	67,52	67,52	0,00	-118,00	-104,26	76,424
300	16,31	67,63	67,53	0,04	-118,02	-104,18	75,891
400	19,93	72,83	68,21	1,85	-118,85	-99,43	54,326
500	23,07	77,62	69,62	4,01	-119,54	-94,50	41,303
600	25,68	82,06	71,33	6,45	-120,09	-89,44	32,576
700	27,86	86,19	73,16	9,13	-120,51	-84,29	26,346
800	29,69	90,03	75,03	12,01	-120,83	-79,10	21,608
900	31,24	93,62	76,90	15,05	-121,05	-73,87	17,937
1000	32,56	96,98	78,74	18,25	-121,19	-68,63	14,999

Термодинамические функции рассчитаны на основании отнесенных колебаний согласно Смигу, Саундерсу, Нилсену и Фергюсону [1380], моментов инерции, взятых из работы Солимена и Дейли [1392], а также барьера внутреннего вращения, установленного Хиршбахом [586] и Фейтли и Миллером [407]. В хорошем согласии находятся и расчеты термодинамических функций, выполненные Мирсом, Сталом, Орфео, Шейром, Келлсом Томпсоном и Мак-Канном [979]; эти же исследователи определили плотности жидкости и пара, а также

давление пара и на основании полученных данных установили, что $T_b = 248,15^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 5,1 \text{ ккал/моль}$, $T_c = 386,7^\circ \text{K}$ и $P_c = 44,4 \text{ атм}$. Согласно Россини, Вагману, Эвансу, Левину и Джаффе [1249], $T_m = 156^\circ \text{K}$.

Лейчер и Скиппер [833], основываясь на неопубликованных данных по энтальпии гидрирования 1,1-дифторэтилена, получили значение $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -118,0 \text{ ккал/моль}$.

Лейчер, Киантур, Оттинг и Парк [827] измеряли энтальпию гидрирования 1,1-дифтор-2,2-дихлорэтилена до 1,1-дифторэтана. Энтальпию образования 1,1-дифтор-2,2-дихлорэтилена определена Вартебергом и Шифером [1574] по реакции с калием. Сочетание этих двух результатов дает $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -117,9 \text{ ккал/моль}$. Это значение не отличается высокой точностью, однако хорошо согласуется с принятой здесь величиной.

№ 707. 1,1,1-Трифторэтан, $\text{C}_2\text{H}_3\text{F}_3$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 84,044

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(C°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	18,75	68,66	68,66	0,00	-178,20	-162,23	118,915
300	18,83	68,78	68,67	0,04	-178,21	-162,14	118,110
400	22,75	74,75	69,45	2,13	-178,82	-156,68	85,601
500	25,90	80,18	71,06	4,56	-179,28	-151,09	66,038
600	28,38	85,13	73,00	7,28	-179,61	-145,42	52,967
700	30,37	89,66	75,06	10,22	-179,85	-139,70	43,614
800	31,98	93,82	77,15	13,34	-180,00	-133,96	36,594
900	33,32	97,67	79,22	16,61	-180,09	-128,19	31,128
1000	34,45	101,24	81,25	20,00	-180,12	-122,45	26,760

Колесов, Мартынов и Скуратов [793] измеряли энтальпию сгорания в атмосфере кислорода и определили $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -178,2 \text{ ккал/моль}$, Рассел, Голдинг и Иост [1270] опубликовали следующие низкотемпературные данные: $T_{tr} = 161,82^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 1,480 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 225,86^\circ \text{K}$ и $\Delta H_v = 4,583 \text{ ккал/моль}$ при $224,40^\circ \text{K}$. Эджел, Миллер и Эми [367], а также Томас, Хикс и Шеридап [1484] проводили исследование методом микроволновой спектроскопии и получили практически идентичные общие моменты инерции, хотя интерпретация этих авторов различается. Нилсен, Клаасен и Смит [1070] опубликовали общепринятые отнесения колебаний. На основании этих данных, а также величины энтропии, определенной по третьему закону термодинамики, был установлен барьер внутреннего вращения 3200 ккал/моль . Каталано и Питчер [204] по комбинационным инфра-

красным полосам рассчитали $V = 3040$ ккал/моль, а Вандеркоой и Де Врис [1527] измеряли теплоемкость пара при постоянной температуре и получили значение $V = 3370$ ккал/моль. Для расчета термодинамических функций использовано среднее значение 3200 ккал/моль.

Мирс, Стал, Орфео, Шейр, Киллс, Томсон и Мак-Канн [979] измеряли плотности жидкости и пара, а также давления пара и получили $T_c = 346,3^\circ \text{K}$ и $P_c = 37,1$ атм.

№ 708. Гексафторэтан, C_2F_6 (состояние идеального газа).
Мол. вес 138,020

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	25,43	79,37	79,37	0,00	-321,00	-300,52	220,275
300	25,53	79,53	79,38	0,05	-321,00	-300,39	218,825
400	29,99	87,52	80,43	2,84	-321,02	-293,51	160,360
500	33,26	94,58	82,37	6,01	-320,91	-286,65	125,288
600	35,54	100,85	85,10	9,45	-320,71	-279,81	101,917
700	37,15	106,46	87,76	13,09	-320,47	-273,01	85,234
800	38,32	111,50	90,42	16,87	-320,22	-266,25	72,734
900	39,17	116,06	93,02	20,75	-319,94	-259,53	63,018
1000	39,78	120,23	95,54	24,69	-319,66	-252,88	55,265

На основании результатов измерений энтальпии реакции между натрием и гексафторэтаном Киркбрайд и Дэвидсон [755] получили $\Delta H_f^\circ(g) = -311$ ккал/моль. Зинке [1354] по данным измерений энтальпии реакции между трехфтористым азотом и гексафторэтаном установил $\Delta H_f^\circ(g) = -321,0$ ккал/моль. Чуйков-Ру [1521] на основании обзора термохимических данных по C_2F_6 и по радикалам CF_3 пришел к выводу, что значение -311 ккал/моль, вероятно, занижено (по абсолютному значению). Принят результат, полученный Зинке.

Пейс и Астон [1097] опубликовали следующие низкотемпературные данные: $T_t = 103,98^\circ \text{K}$, $\Delta H_t = 0,893$ ккал/моль, $T_{tr} = 173,10^\circ \text{K}$, $\Delta H_{tr} = 0,642$ ккал/моль и $T_b = 194,87^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v = 3,860$ ккал/моль. Установлено, что энтропия идеального газа при $194,87^\circ \text{K}$ должна быть равна $69,88$ кал/(моль · °K). Использование этой величины и данных по электронной дифракции, полученных Свиком и Карлом [1459], а также отнесение колебаний по Карни, Пиотровскому, Мейстеру, Брауну и Клевеленду [192] позволило определить барьер внутреннего вращения $3,96$ ккал/моль. Термодинамические функции рассчитаны с учетом именно этого значения барьера.

№ 709. 1-Фторпропан, $\text{C}_3\text{H}_7\text{F}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 62,086

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	19,75	72,71	72,71	0,00	-67,20	-47,87	35,087
300	19,83	72,84	72,72	0,04	-67,23	-47,75	34,785
400	24,55	79,20	73,55	2,26	-68,56	-41,05	22,427
500	28,99	85,16	75,28	4,95	-69,68	-34,04	14,877
600	32,82	90,79	77,40	8,04	-70,59	-26,82	9,770
700	36,09	96,11	79,70	11,49	-71,29	-19,47	6,078
800	38,88	101,11	82,07	15,24	-71,82	-12,03	3,287
900	41,29	105,83	84,45	19,25	-72,20	-4,53	1,100
1000	43,37	110,29	86,81	23,49	-72,43	3,00	-0,655

Термодинамические функции для состояния идеального газа являются оценочными. Лейчер, Квантур и Парк [828] измеряли энтальпию гидрирования 1-фторпропана до пропана и фтористого водорода при 248°C . Приведение к температуре 298°K и использование энтальпий образования пропана и фтористого водорода, принятых в этой книге, приводит к значению $\Delta H_f^\circ(g) = -67,2$ ккал/моль. Ли и Россини [863] отобрали данные по давлению пара, на основании которых получили значение $T_b = 270,7^\circ \text{K}$. Хирота [607] опубликовал данные по моментам инерции и барьерам внутреннего вращения, основанные на результатах исследования по методу микроволновой спектроскопии.

№ 710. 2-Фторпропан, $\text{C}_3\text{H}_7\text{F}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 62,086

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	19,60	69,82	69,82	0,00	-69,00	-48,81	35,775
300	19,68	69,95	69,83	0,04	-69,03	-48,68	35,465
400	24,72	76,31	70,66	2,27	-70,36	-41,69	22,779
500	29,27	82,33	72,40	4,97	-71,46	-34,40	15,033
600	33,14	88,02	74,53	8,10	-72,33	-26,90	9,798
700	36,39	93,37	76,84	11,58	-73,00	-19,27	6,016
800	39,14	98,42	79,23	15,36	-73,51	-11,56	3,159
900	41,50	103,17	81,63	19,39	-73,86	-3,79	0,921
1000	43,55	107,65	84,01	23,65	-74,08	4,00	-0,874

Термодинамические функции для состояния идеального газа являются оцепочными. Лейчер, Кианпур и Парк [828] измеряли энтальпию гидрирования 2-фторпропана до пропана и фтористого водорода при 248° С. Приведение к температуре 298° К и использование энтальпий образования пропана и фтористого водорода, принятых в этой книге, приводит к значению $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -69,0$ ккал/моль. Согласно Россини [1250], $T_m = 139,8^{\circ}$ К и $T_b = 263,8$ К.

№ 711. Октафторциклобутан, C_4F_8 (состояние идеального газа).
Мол. вес 200,040

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	37,32	95,69	95,69	0,00	-365,20	-334,33	245,057
300	37,45	95,93	95,70	0,07	-365,20	-334,14	243,408
400	44,50	107,70	97,25	4,18	-365,16	-323,78	176,895
500	50,10	118,27	100,42	8,93	-364,92	-313,46	137,007
600	53,85	127,75	104,20	14,14	-364,55	-303,20	100,437
700	56,55	136,26	108,18	19,66	-364,12	-293,01	91,477
800	58,65	143,95	112,18	25,42	-363,66	-282,89	77,277
900	60,25	150,96	116,10	31,37	-363,17	-272,82	66,246
1000	61,50	157,37	119,91	37,46	-362,64	-262,88	57,450

Дуус [360] измерял энтальпию сгорания C_2F_4 и C_4F_8 , при этом продуктом сгорания была смесь CF_4 , CO_2 и CF_2O . Допущение о том, что все систематические ошибки в основном взаимно компенсируются, позволяет получить энтальпию димеризации тетрафторэтилена, равную $-49,4$ ккал/моль. Аткинсон и Тренвит [51] рассчитали константу равновесия реакции димеризации C_2F_4 при 500° С. Их данные приводят к значению энтальпии димеризации $-50,4$ ккал/моль. На основании энтальпии образования C_2F_4 , принятой в этой книге, можно рассчитать энтальпию образования C_4F_8 соответственно равной $-364,2$ и $-365,2$ ккал/моль. Колесов, Талакин и Скуратов [795] измеряли энтальпию реакции между натрием и C_4F_8 , протекающей с образованием фтористого натрия и аморфного углерода, и получили значение $-714,5$ ккал/моль. Калориметрическим методом они установили, что энтальпия образования аморфного углерода составляет $0,700$ ккал/г-атом. Энтальпия образования фтористого натрия, указанная в работе Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе [1249], приведена в соответствие с принятым здесь значением для HF (водн.) и это позволило рассчитать для C_4F_8 энтальпию образования $-356,7$ ккал/моль. Наиболее точным значением признана энтальпия образования $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -365,2$ ккал/моль, рассчитанная на основании данных Аткинсона и Тренвита.

Фурукава, Мак-Коски и Рейли [457] приводят следующие низкотемпературные данные: $T_{tr} = 232,96^{\circ}$ К, $\Delta H_m = 0,662$ ккал/моль и $T_b = 267,17^{\circ}$ К, при этом $\Delta H_v = 5,58$ ккал/моль. Наблюдалось четыре перехода в твердом состоянии, однако получение точных характеристик твердого состояния при низких температурах затруднено из-за тенденции к стеклообразованию. Мейси [936] опубликовал результаты измерения теплоемкости пара при трех температурах. Отнесения колебаний по Эджелу [365] приводят к более низкому расчетному значению теплоемкости, нежели экспериментальные величины Мейси, а в то же время отнесения по Клаассепу [226] дают слишком высокие расчетные значения теплоемкости. Поэтому кривая теплоемкости была построена на основе усреднения экспериментальных данных Мейси и расчетных значений при 800, 900 и 1000° К. Значение энтропии, определенное Фурукавой, Мак-Коски и Рейли [457] на основании третьего закона термодинамики, может быть ненадежным вследствие стеклообразования, однако оно, вероятно, определено с точностью до энтропийной единицы. Расчетное значение энтропии при 298° К равно $95,69$ кал/(моль·°К).

PVT-данные опубликованы в работах Доуслина, Мура и Уаддингтона [344], Бамбаха [68] и Мартина [934]. В последней из этих работ дан обзор опубликованных результатов и выведены уравнения. Критические константы из этих трех работ хорошо согласуются при $T_c = 388,5^{\circ}$ К и $P_c = 27,5$ атм. Де Певерс и Мартин [322] определили C_v между 26 и 90% критической плотности.

№ 712. 1,1-Дифторэтилен, $C_2H_2F_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 64,036

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	14,14	63,38	63,38	0,00	-82,50	-76,84	56,319
300	14,18	63,47	63,39	0,03	-82,51	-76,80	55,947
400	17,16	67,98	63,98	1,60	-82,89	-74,83	40,886
500	19,51	72,07	65,19	3,44	-83,20	-72,78	31,812
600	21,32	75,79	66,65	5,49	-83,44	-70,68	25,744
700	22,77	79,19	68,21	7,69	-83,63	-68,53	21,396
800	23,95	82,31	69,78	10,03	-83,79	-66,37	18,130
900	24,93	85,19	71,33	12,48	-83,91	-64,18	15,585
1000	25,74	87,86	72,85	15,01	-83,98	-62,00	13,550

Лейчер и Скиннер [833], проанализировав работы Нейгебауера Маргрэйва [1059] и Колесова, Мартынова, Штехера и Скуратова [792] по определению энтальпии сгорания, отобрали значение

$\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -82,5$ ккал/моль. Термодинамические функции основаны на моментах инерции, определенных Эйджеллом, Кипси и Эми [366] по методу микроволновой спектроскопии, и отнесенных основных частот по Эджеллу и Юлти [368]. Мирс, Стал, Орфео, Шейр, Келлс, Томпсон и Мак-Канн [979] измеряли плотности жидкости и пара, а также давление пара и получили следующие данные: $T_b = 187,5^{\circ}\text{K}$, $T_c = 303,2^{\circ}\text{K}$ и $P_c = 43,7$ атм. Эти исследователи рассчитали термодинамические функции на основании полученных Карле и Карле [717] данных по дифракции электронов и отнесений колебаний по Смигу, Нилсену и Клаассену [1378]. Их значения несколько выше представленных здесь расчетных величин главным образом из-за более низкого значения частоты крутильного колебания.

№ 713. Трифторэтилен, C_2HF_3 (состояние идеального газа).
Мол. вес 82,028

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	16,54	69,94	69,94	0,00	-118,50	-112,22	82,257
300	16,60	70,05	69,95	0,04	-118,50	-112,18	81,721
400	19,39	75,22	70,63	1,84	-118,70	-110,04	60,122
500	21,59	79,79	72,02	3,89	-118,84	-107,86	47,145
600	23,30	83,88	73,66	6,14	-118,95	-105,66	38,484
700	24,63	87,58	75,39	8,54	-119,02	-103,44	32,292
800	25,69	90,94	77,12	11,06	-119,07	-101,21	27,648
900	26,54	94,02	78,83	13,67	-119,11	-98,97	23,033
1000	27,23	96,85	80,50	16,36	-119,11	-96,76	21,146

Колесов, Мартышов, Штехер и Скуратов [792] измеряли энтальпию сгорания. Согласно их результатам, $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -118,5$ ккал/моль. Хотя это значение и не отличается высокой точностью, но является обоснованным и принято здесь. Манн, Аквиста и Плайлер [919] произвели отнесения основных частот, сделали оценку структурных постоянных и рассчитали термодинамические функции. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] приводят $T_b = 221^{\circ}\text{K}$.

№ 714. Тетрафторэтилен, C_2F_4 (состояние идеального газа).
Мол. вес 100,020

Фурукава, Мак-Коски и Рейли [456] изучали низкотемпературные свойства и установили, что $T_{tr} = 142,00^{\circ}\text{K}$, $\Delta H_m = 1,844$ ккал/моль и $T_b = 197,53^{\circ}\text{K}$, при этом $\Delta H_v = 4,020$ ккал/моль. Энтропия, определенная калориметрическим

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(C^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	19,24	71,69	71,69	0,00	-157,40	-149,07	103,269
300	19,29	71,81	71,70	0,04	-157,40	-149,02	108,558
400	21,97	77,75	72,49	2,11	-157,37	-146,23	79,893
500	23,99	82,87	74,06	4,41	-157,31	-143,46	62,701
600	25,53	87,39	75,91	6,89	-157,25	-140,69	51,244
700	26,71	91,42	77,85	9,50	-157,19	-137,93	43,062
800	27,61	95,05	79,77	12,22	-157,12	-135,19	36,930
900	28,31	98,34	81,66	15,02	-157,05	-132,45	32,162
1000	28,86	101,35	83,48	17,88	-156,97	-129,76	28,357

методом, прекрасно согласуется с расчетным значением Манна, Аквиста и Плайлера [920], полученным на основании собственных отнесений колебаний и данных по дифракции электронов, опубликованных Карле и Карле [717]. Приняты термодинамические функции Манна Аквиста и Плайлера, поскольку отнесения колебаний подтверждены в работах Манна, Мила и Плайлера [923], а также Манна, Фано, Мила и Симанути [922].

Лейчер и Скикнер [833] приняли значение $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -157,4$ ккал/моль, основываясь на энтальпии реакции с водородом и энтальпии взрыва с образованием CF_4 и углерода, согласно данным Нейтебауера и Маргрейва [1059]. Аналогичные определения выполнил Дуус [360] и получил хорошо согласующиеся результаты, но они отличаются меньшей точностью. В работах Киркбрайда и Дэвидсона [755], Вартенберга и Шифера [1574], а также Колесова, Зенкова и Скуратова [796] опубликованы данные измерения энтальпии реакции тетрафторэтилена со щелочными металлами, однако эти данные характеризуются меньшей точностью. Киркбрайд и Дэвидсон [755] определяют также энтальпию образования 1,1,2,2-тетрафтор-1,2-дихлорэтана по реакции с калием. Сочетание полученной ими величины с энтальпией присоединения хлора к тетрафторэтилену, опубликованной в работе Лейчера, Мак-Кипли, Споу, Мичела, Нелсона и Парка [831], дает $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -162$ ккал/моль, что плохо согласуется с отобранным значением.

Вуд, Лагоу и Маргрейв [1625] измеряли энтальпию сгорания политетрафторэтилена в атмосфере фтора и получили результаты, хорошо согласующиеся с более ранними данными. Их результаты приводят к значению для мономера $\Delta H_{298}^{\circ}(s) = -199,2$ ккал/моль. Данные по теплоемкости политетрафторэтилена при низких температурах опубликованы в работе Фурукавы, Мак-Коски и Кинга [455].

Ароматические фторпроизводные. Таблицы
для состояния идеального газа

№ 715. Фторбензол, C_6H_5F (состояние идеального газа).
Мол. вес 96,100

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ^o ₂₉₈)/T	H ^o -H ^o ₂₉₈	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	22,57	72,33	72,33	0,00	-27,86	-16,50	12,097
300	22,72	72,48	72,34	0,05	-27,88	-16,44	11,973
400	29,99	80,04	73,32	2,69	-28,84	-12,46	6,810
500	36,04	87,40	75,40	6,00	-29,59	-8,28	3,620
600	40,86	94,41	77,99	9,86	-30,17	-3,97	1,446
700	44,70	101,01	80,81	14,14	-30,60	0,44	-0,137
800	47,83	107,19	83,73	18,77	-30,93	4,89	-1,336
900	50,42	112,98	86,66	23,69	-31,15	9,38	-2,278
1000	52,58	118,40	89,57	28,84	-31,27	13,89	-3,035

Термодинамические свойства фторбензола достаточно полно изучены Скоттом, Мак-Каллохом, Гудом, Мессерли, Пенингтоном, Кинчелое, Хоссенлоппом, Доуслином и Уаддингтоном [1318]. По данным этих исследователей $T_{tp} = 230,94^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 2,702 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 357,89^\circ \text{K}$, при этом $\Delta H_v^\circ = 7,457 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}^\circ(l) = 49,22 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$, $S_{298}^\circ(g) = 72,33 \text{ кал/(моль} \cdot \text{°K)}$, $\Delta H_v^\circ = 8,27 \text{ ккал/моль}$ и $C_p(l) = 16,39 + 0,0623T \text{ [кал/(моль} \cdot \text{°K)}$, $290-350^\circ \text{K}$]. Результаты более ранних низкотемпературных исследований Сталла [1431] по определению теплоемкости, а также результаты Монтгомери и Де Вриса [1021] по определению теплоемкости пара хорошо согласуются с приведенными выше данными. Скотт и др. использовали результаты исследований строения методом микроволновой спектроскопии Мак-Каллоха и Полноу [945] и немного исправленные отнесения колебаний по Смиту, Фергюсону, Хадсону и Нилсену [1377] для расчета термодинамических функций и при этом получили значения, хорошо согласующиеся с экспериментальными данными. Пересмотренные отнесения находятся в хорошем соответствии с независимо установленными отнесениями Уиффена [1603].

Гуд, Скотт и Уаддингтон [514] определили энтальпию сгорания фторбензола и на основании полученных данных рассчитали $\Delta H_{298}^\circ(l) = -36,13 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{298}^\circ(g) = -27,86 \text{ ккал/моль}$. Более ранние данные Сварта [1458] представляют лишь исторический интерес.

№ 716. м-Дифторбензол, $C_6H_4F_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 114,092

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(C ^o -H ^o ₂₉₈)/T	H ^o -H ^o ₂₉₈	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	25,40	76,57	76,57	0,00	-74,09	-61,43	45,026
300	25,54	76,73	76,58	0,05	-74,11	-61,35	44,693
400	32,72	85,10	77,67	2,98	-74,82	-56,98	31,132
500	38,55	93,05	79,96	6,55	-75,36	-52,46	22,928
600	43,13	100,49	82,77	10,64	-75,77	-47,84	17,425
700	46,74	107,42	85,80	15,14	-76,06	-43,15	13,473
800	49,67	113,86	88,91	19,97	-76,28	-38,45	10,502
900	51,99	119,85	92,02	25,05	-76,41	-33,71	8,185
1000	53,94	125,43	95,08	30,35	-76,47	-28,97	6,332

Грин, Кайнастон и Пейсли [541] сделали отнесение колебаний, оценили структурные постоянные и рассчитали термодинамические функции. Данные по дифракции электронов, полученные Оосака, Секине и Сайто [1088], подтверждают принятую оценку структуры в пределах ошибки опыта. Гуд, Лейцина, Скотт и Мак-Каллох [512] измеряли энтальпию сгорания с помощью вращающегося бомбового калориметра и установили значения $\Delta H_{298}^\circ(l) = -82,38 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{298}^\circ(g) = -74,09 \text{ ккал/моль}$. Данные о переходах в литературе не найдены.

№ 717. о-Дифторбензол, $C_6H_4F_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 114,092

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ^o ₂₉₈)/T	H ^o -H ^o ₂₉₈	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	25,46	76,94	76,94	0,00	-70,39	-57,84	42,395
300	25,60	77,10	76,95	0,05	-70,41	-57,76	42,078
400	32,76	85,48	78,04	2,98	-71,12	-53,43	29,192
500	38,65	93,44	80,33	6,56	-71,65	-48,94	21,393
600	43,33	100,92	83,15	10,67	-72,04	-44,37	16,161
700	47,08	107,89	86,19	15,19	-72,31	-39,73	12,403
800	50,12	114,38	89,31	20,06	-72,48	-35,07	9,580
900	52,62	120,43	92,44	25,20	-72,57	-30,38	7,378
1000	54,72	126,09	95,52	30,57	-72,55	-25,71	5,619

Скотт, Мессерли, Тодд, Хоссенлопп, Осборн и Мак-Каллох [1322] тщательно изучили термодинамические свойства этого соединения

и опубликовали следующие данные $T_{tr} = 226,01^\circ \text{K}$, $\Delta H_{tr} = 2,640 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 367,07^\circ \text{K}$ и при этой температуре $\Delta H_v = 7,699 \text{ ккал/моль}$, $\Delta H_{v,298} = 8,65 \text{ ккал/моль}$. $S_{298}^\circ(g) = 76,94 \text{ кал/(моль} \cdot ^\circ \text{K)}$ и $C_p(l) = 19,52 + 0,062 T [\text{кал/(моль} \cdot ^\circ \text{K)}]$, $280-360^\circ \text{K}$. Эти исследователи оценили структурные постоянные на основании данных для фторбензола, поскольку значения, полученные Оосака [1087] методом дифракции электронов, кажутся менее правдоподобными. После этого были сделаны отнесения колебаний, позволившие рассчитать значения в хорошем соответствии с результатами экспериментальной работы. Независимо выполненное отнесение Грина, Кайнастона и Пейсли [541] приводит к энтропии при 298°K более чем на $0,3 \text{ кал/(моль} \cdot ^\circ \text{K)}$ завышенной главным образом в результате использования основной частоты 196 см^{-1} вместо 240 см^{-1} .

Гуд, Лейцина, Скотт и Мак-Каллох [512] измеряли энтальпию сгорания с помощью вращающегося бомбового калориметра и установили значения $\Delta H_{f,298}^\circ(l) = -79,04 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{f,298}^\circ(g) = -70,39 \text{ ккал/моль}$. Работа Свартса [1458], выполненная более 50 лет назад, представляет лишь исторический интерес.

№ 718. *m*-Дифторбензол, $\text{C}_6\text{H}_4\text{F}_2$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 114,092

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p °	S°	-(C°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔH _f °	ΔG _f °	
298	25,55	75,43	75,43	0,00	-73,43	-60,43	44,294
300	25,70	75,59	75,44	0,05	-73,45	-60,35	43,963
400	32,84	84,00	76,53	2,99	-74,15	-55,87	30,523
500	38,64	91,97	78,83	6,57	-74,68	-51,23	22,393
600	43,20	99,43	81,65	10,67	-75,08	-46,51	16,941
700	46,80	106,37	84,69	15,18	-75,36	-41,72	13,025
800	49,68	112,82	87,81	20,01	-75,57	-36,91	10,082
900	52,04	118,81	90,93	25,10	-75,71	-32,06	7,786
1000	53,99	124,39	94,00	30,40	-75,75	-27,23	5,950

Термодинамические функции рассчитаны на основании отнесения частот по Стоильковичу и Уиффену [1426] с дополнениями Грина, Кайнастона и Пейсли [541], а также Скотта, Мессерли, Тодда, Хоссенлоппа, Доуслина и Мак-Каллоха [1321]. Полученные результаты лишь немного отличаются от значений, приводимых Грином, Кайнастоном и Пейсли [541]. Молекулярная структура, установленная Оосакой, Секине и Сайто [1088], подтверждает оценочные значения, использованные Грином и др.

Гуд, Лейцина, Скотт и Мак-Каллох [512] измеряли энтальпию сгорания с помощью вращающегося бомбового калориметра и установили значения $\Delta H_{f,298}^\circ(l) = -81,98 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{f,298}^\circ(g) = -73,43 \text{ ккал/моль}$. Согласно Тиммермансу [1501], $T_m = 249,5^\circ \text{K}$ и $T_b = 362,0^\circ \text{K}$.

№ 719. Гексафторбензол, C_6F_6 (состояние идеального газа).

Мол. вес 186,060

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p °	S°	-(C°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔH _f °	ΔG _f °	
298	37,43	91,59	91,59	0,00	-228,64	-210,18	154,058
300	37,56	91,83	91,60	0,07	-228,64	-210,07	153,026
400	43,88	103,53	93,15	4,16	-228,34	-203,91	111,407
500	48,78	113,87	96,28	8,80	-228,03	-197,84	86,473
600	52,55	123,11	100,00	13,87	-227,72	-191,84	69,874
700	55,43	131,44	103,90	19,28	-227,41	-185,88	58,030
800	57,62	138,99	107,82	24,94	-227,11	-179,97	49,163
900	59,32	145,88	111,67	30,79	-226,81	-174,10	42,274
1000	60,63	152,20	115,41	36,79	-226,50	-168,31	36,782

Коунсел, Грин, Хейлс и Мартин [279] всесторонне изучили термодинамические свойства и получили следующие данные: $T_{tr} = 278,25^\circ \text{K}$, $\Delta H_{tr} = 2,770 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 353,41^\circ \text{K}$ и при этой температуре $\Delta H_v = 7,571 \text{ ккал/моль}$, $\Delta H_{v,298} = 8,61 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}^\circ(l) = 66,90 \text{ кал/(моль} \cdot ^\circ \text{K)}$ и $C_p(l) = 39,54 + 0,045 T [\text{кал/(моль} \cdot ^\circ \text{K)}]$, $280-310^\circ \text{K}$. Отнесение колебаний, предложенное Стилом и Уиффеном [1409], изменено по отношению к одной низкой частоте для приведения в соответствие с экспериментальным значением энтропии и теплоемкости пара. Кокс, Гандри и Хед [290] по данным измерения энтальпии сгорания получили значение $\Delta H_{f,298}^\circ(l) = -237,25 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{f,298}^\circ(g) = -228,64 \text{ ккал/моль}$. Коунсел и др. установили также $T_c = 516,72^\circ \text{K}$ и $P_c = 32,61 \text{ атм}$. Значения критических температур, установленные Ченгом и Мак-Коубри [219], а также Патриком и Проссером [1128], находятся в удовлетворительном соответствии.

№ 720. *α,α,α*-Трифтортолуол, $\text{C}_7\text{H}_5\text{F}_3$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 146,110

Скотт, Доуслин, Мессерли, Тодд, Хоссенлопп, Кинчелое и Мак-Каллох [1301] получили полные термодинамические данные, в том числе следующие значения: $T_{tr} = 244,14^\circ \text{K}$, $\Delta H_{tr} = 3,294 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 375,20^\circ \text{K}$ и при этой температуре $\Delta H_v =$

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	31,17	89,05	89,05	0,00	-143,42	-122,20	89,570
300	31,35	89,25	89,06	0,06	-143,44	-122,07	88,923
400	40,59	99,57	90,40	3,67	-144,45	-114,78	62,708
500	48,20	109,48	93,23	8,13	-145,18	-107,27	46,886
600	54,20	118,81	96,73	13,26	-145,70	-99,64	36,293
700	58,94	127,54	100,51	18,92	-146,02	-91,93	28,701
800	62,75	135,66	104,40	25,01	-146,22	-84,20	23,001
900	65,86	143,24	108,30	31,45	-146,29	-76,44	18,561
1000	68,45	150,32	112,16	38,17	-146,23	-68,70	15,014

= 7,800 ккал/моль, $\Delta H_{298}^\circ = 8,98$ ккал/моль и $S_{298}^\circ(l) = 64,89$ кал/(моль·°K). Термодинамические функции, хорошо согласующиеся с экспериментальными значениями, были рассчитаны в предположении свободного вращения группы CF₃ и достаточно обоснованных отнесений колебаний, опубликованных в работе Нарасимхамы, Нилсена и Теймера [1047].

Гуд, Скотт и Уаддингтон [514] измеряли энтальпию сгорания с помощью вращающегося бомбового калориметра и установили значения $\Delta H_{298}^\circ(l) = -152,40$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^\circ(g) = -143,42$ ккал/моль.

№ 721. *n*-Фтортолуол, C₇H₇F (состояние идеального газа).
Мол. вес 110,126

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	27,76	81,15	81,15	0,00	-35,38	-16,94	12,419
300	27,93	81,33	81,16	0,06	-35,41	-16,83	12,261
400	36,43	90,55	82,36	3,28	-36,72	-10,43	5,696
500	43,73	99,49	84,90	7,30	-37,78	-3,72	1,628
600	49,70	108,01	88,04	11,98	-38,61	3,16	-1,151
700	54,57	116,05	91,48	17,20	-39,24	10,18	-3,179
800	58,60	123,61	95,03	22,87	-39,70	17,27	-4,717
900	61,98	130,71	98,60	28,90	-40,00	24,41	-5,927
1000	64,84	134,39	102,15	35,25	-40,15	31,57	-6,900

Полные термодинамические данные для *n*-фтортолуола приведены в работе Скотта, Мессерли, Тодда, Хоссенлоппа, Доуслина и Мак-

Каллоха [1321]: $T_{tr} = 216,49^\circ$ K, $\Delta H_{tr} = 2,235$ ккал/моль, $T_b = 389,79^\circ$ K и при этой температуре $\Delta H_v = 8,144$ ккал/моль, $S_{298}^\circ(l) = 56,67$ кал/(моль·°K), $C_p(l) = 20,53 + 0,0685T$ [кал/(моль·°K), 300—360° K] и $\Delta H_{v,298}^\circ = 9,42$ ккал/моль. Рассчитанные значения термодинамических функций, находящиеся в прекрасном соответствии с экспериментальными данными, получены на основании оценок структурных постоянных, отнесений колебаний по сопоставлению с *n*-дифторбензолом и *n*-ксилолом, а также в предположении свободного вращения метильной группы.

Гуд, Лейпина, Скотт и Мак-Каллох [512] измеряли энтальпию сгорания с помощью вращающегося бомбового калориметра и установили значения $\Delta H_{298}^\circ(l) = -44,80$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^\circ(g) = -35,38$ ккал/моль. Опубликованная свыше 50 лет назад работа Сварта отличается низкой точностью.

Алифатические хлорпроизводные. Таблицы
для состояния идеального газа

№ 722. Хлорметан, CH₃Cl (состояние идеального газа).
Мол. вес 50,491

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	9,74	56,04	56,04	0,00	-20,63	-15,03	11,017
300	9,77	56,11	56,05	0,02	-20,64	-15,00	10,924
400	11,52	59,16	56,45	1,09	-21,28	-13,01	7,110
500	13,19	61,91	57,27	2,33	-21,84	-10,88	4,756
600	14,66	64,45	58,26	3,72	-22,30	-8,65	3,149
700	15,93	66,81	59,31	5,25	-22,69	-6,34	1,979
800	17,04	69,01	60,39	6,90	-23,00	-3,98	1,088
900	18,01	71,07	61,46	8,65	-23,25	-1,59	0,386
1000	18,86	73,01	62,52	10,50	-23,43	0,83	-0,182

Лейчер, Эмери, Бомфолк и Парк [824] измеряли энтальпию гидрирования хлорметана до метана и хлористого водорода и вычислили значение $\Delta H_{298}^\circ(g) = -20,63$ ккал/моль, которое и принято здесь. Россини, Вагман, Эванс, Левин, и Джаффе [1249] приводят значение $\Delta H_{298}^\circ(g) = -19,6$ ккал/моль, основанное на старых результатах Томсена [1495]. На основе масс-спектрометрических данных Маргрэйв [929] рассчитал $\Delta H_{298}^\circ(g) = -18,0$ ккал/моль. Мессерли и Астон [991] изучали низкотемпературные свойства и получили следующие данные: $T_{tr} = 175,43^\circ$ K, $\Delta H_{tr} = 1,537$ ккал/моль, $T_b = 248,93^\circ$ K при этой температуре $\Delta H_v = 5,147$ ккал/моль, $S_{298}^\circ(g) =$

$= 55,94 \text{ ккал/(моль} \cdot \text{°K)}$. Приведенные здесь термодинамические функции рассчитаны Черни и Эрдосом [207] с использованием микроволновых структурных постоянных, установленных Миллером, Аамодтом, Доусманисом, Тоунесом и Крэйтчаном [1008], и частот, указанных Герцбергом [589]. Рассчитанное значение $S_{298}^{\circ}(g) = 56,04 \text{ ккал/(моль} \cdot \text{°K)}$ превосходно согласуется с величиной, полученной на основании третьего закона термодинамики. Бартелл и Броквей [79] определили длины связей и углы, воспользовавшись методом дифракции электронов, и получили данные, хорошо согласующиеся со значениями, установленными методом микроволновой спектроскопии.

Термодинамические функции были недавно рассчитаны также Джеллесом и Питцером [465], Свердлиным [1451] и Кобе и Крауфордом [772]. Уайтло-Грей, Ривс и Боттомли [1606] измеряли давления пара и опубликовали расчеты вириальных коэффициентов. В работе Хсу и Мак-Кетта [624] приведены таблицы термодинамических свойств в технических единицах.

№ 723. Дихлорметан, CH_2Cl_2 (состояние идеального газа).
Мол. вес 84,940

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	12,22	64,59	64,59	0,00	-22,80	-16,46	12,06
300	12,26	64,67	64,60	0,03	-22,81	-16,42	11,961
400	14,69	68,56	65,11	1,39	-23,22	-14,22	7,770
500	15,87	71,96	66,15	2,91	-23,57	-11,93	5,215
600	17,36	74,99	67,37	4,58	-23,85	-9,58	3,489
700	18,47	77,75	68,66	6,37	-24,06	-7,18	2,242
800	19,38	80,28	69,96	8,26	-24,22	-4,76	1,301
900	20,15	82,61	71,24	10,24	-24,33	-2,32	0,563
1000	20,80	84,77	72,48	12,29	-24,40	0,13	-0,028

Джеллес и Питцер [465] рассчитали термодинамические функции, используя отнесения колебаний по Плайлеру и Бенедикту [1172] и моменты инерции, полученные микроволновым методом Майерсом и Гуинном [1042]. В работе Джеллеса и Питцера даны ссылки на более ранние расчеты, а в работе Свердлина [1451] приведены соответствующие значения, опубликованные позже. Данные Перлика [1138] и Ридела [1228, 1229] по определению теплоемкости дихлорметана в жидком состоянии удовлетворительно согласуются, если принять $C_p(l) = 17,16 + 0,023T$ [ккал/(моль·°K), 270–320° K]. Курбатов [814] также измерял теплоемкость жидкости, однако его данные

слишком завышены. Метюс [940] экспериментально установил значение $\Delta H_v = 6,69 \text{ ккал/моль}$ при 313,7° K. На основании указанных выше величин теплоемкости дихлорметана в жидком и газообразном состояниях вычислено $\Delta H_v_{298}^{\circ} = 6,87 \text{ ккал/моль}$.

Согласно Дрейсбаху [352], $T_m = 178,01^{\circ} \text{K}$. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] приводят значения $\Delta H_m = 1,1 \text{ ккал/моль}$. Перез Масиа и Диаз Пенья [1137] измерили молярные объемы пара в температурном интервале 323–423° K. В работе Дрейсбах [352] приведено значение $T_b = 312,90^{\circ} \text{K}$ и даны константы для уравнения Антуана, которые в сочетании с данными Перез Масиа и Диаз Пенья по молярным объемам пара позволили рассчитать на основании точного уравнения Клапейрона величину $\Delta H_v_{298}^{\circ} = 6,89 \text{ ккал/моль}$. Эта величина прекрасно согласуется с обсуждаемыми выше калориметрическими данными.

На основании энергии сгорания, установленной Смитом, Бьеллером, Круком и Уестермарком [1384], а затем исправленной с учетом новой величины энтальпии окисления мышьяковистого гидрида [142] и приведенной к ΔH_{298}° , получено значение $H_f^{\circ}(l) = -29,2 \text{ ккал/моль}$. Величина $\Delta H_v_{298}^{\circ}$, рассчитанная выше, дает $\Delta H_f^{\circ}(g) = -22,3 \text{ ккал/моль}$. Амадор, Лейчер и Парк [11] определили энтальпию гидрирования дихлорметана до метана и хлористого водорода при 250° C, равную $-40,07 \text{ ккал/моль}$. Приведение к температуре 298° K на основании ΔC_p реакции, равного $-5 \text{ ккал/(моль} \cdot \text{°K)}$, приводит к значению $\Delta H_f^{\circ}(g) = -23,05 \text{ ккал/моль}$. Здесь принято среднее взвешенное значение $-22,8 \text{ ккал/моль}$.

№ 724. Хлороформ, CHCl_3 (состояние идеального газа).
Мол. вес 119,389

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	15,71	70,66	70,66	0,00	-24,20	-16,38	12,004
300	15,76	70,76	70,67	0,03	-24,20	-16,33	11,895
400	17,83	75,59	71,31	1,72	-24,36	-13,68	7,472
500	19,34	79,74	72,59	3,58	-24,44	-10,99	4,806
600	20,44	83,37	74,09	5,57	-24,48	-8,30	3,024
700	21,27	86,58	75,65	7,66	-24,49	-5,60	1,749
800	21,91	89,47	77,20	9,82	-24,47	-2,91	0,795
900	22,43	92,08	78,71	12,04	-24,43	-0,21	0,052
1000	22,86	94,47	80,17	14,30	-24,37	2,47	-0,540

Термодинамические функции рассчитаны Джеллесом и Питцером [465] на основании колебаний по Плайлеру и Бенедикту [1172] и моментов инерции, полученных аппроксимированием значений, уста-

новленных Дженом и Лайдом [684] микроволновым методом. Черни и Эрдос [207], Мадиган и Клевеленд [912] и Свердлин [1451] опубликовали данные, почти идентичные с результатами Джеллеса и Питцера. Удовлетворительно согласуются и результаты измерений теплоемкости жидкого хлороформа, полученные Стейвели, Тапманом и Хартом [1407], Харрисоном и Мелвин-Хьюзом [572], а также Ричардсом и Уолласом [1225]. Их результаты для интервала 240—330° К описываются уравнением $C_p(l) = 21,86 + 0,018 T$ [кал/(моль·°К)]. Теплоемкость жидкого хлороформа измерял также Курбатов [814], однако его результаты недостаточно точны. По сообщению Дрейсбаха [352] $T_m = 209,56^\circ \text{К}$ и $T_b = 334,88^\circ \text{К}$; согласно Метюсу [940], $\Delta H_{v, 334,4} = 7,02$ ккал/моль. Указанные выше принятые данные по теплоемкости приводят к результату $\Delta H_{v, 298}^\circ = 7,44$ ккал/моль. Опубликованные Колосовским и Алимовым [799], а также Кусано [816] данные по энтальпии испарения, по-видимому, завышены.

Смит, Бьеллерап, Крук и Уестермарк [1384] опубликовали данные по энергии сгорания, которые после исправления с учетом нового значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] и приведения к $\Delta H_{c, 298}$ позволили получить $\Delta H_{f, 298}^\circ(l) = -32,3$ ккал/моль. Киркбрайд [754] измерял энтальпию реакции между хлороформом и хлором с образованием четыреххлористого углерода и хлористого водорода. Сочетание результатов, полученных этим исследователем, с другими данными по четыреххлористому углероду привело к значению $\Delta H_{f, 298}^\circ(l) = -30,5$ ккал/моль. Принято среднее взвешенное значение $\Delta H_{f, 298}^\circ(l) = -31,6$ ккал/моль. Эта величина, а также обсуждавшаяся выше энтальпия испарения, найденная Метюсом, привели к значению $\Delta H_{v, 298}^\circ(g) = -24,2$ ккал/моль.

№ 725. Четыреххлористый углерод, CCl_4 (состояние идеального газа).
Мол. вес 153,838

T°, К	кал/(моль °К)			кал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_{f°	ΔG_{f°	
298	20,02	74,12	74,12	0,00	-24,00	-13,92	10,201
300	20,08	74,25	74,13	0,04	-24,00	-13,85	10,093
400	22,04	80,31	74,94	2,15	-23,79	-10,50	5,738
500	23,28	85,37	76,53	4,42	-23,55	-7,21	3,150
600	24,07	89,69	78,37	6,79	-23,29	-3,96	1,444
700	24,61	93,44	80,27	9,23	-23,04	-0,76	0,238
800	25,00	96,75	82,12	11,71	-22,79	2,40	-0,656
900	25,29	99,72	83,92	14,23	-22,54	5,53	-1,344
1000	25,52	102,39	85,63	16,77	-22,29	8,64	-1,888

Смит, Бьеллерап, Крук и Уестермарк [1384] опубликовали данные по энтальпии сгорания, которые после исправления с учетом нового значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] и приведения к $\Delta H_{c, 298}$ дают $\Delta H_{f, 298}^\circ(l) = -29,9$ ккал/моль. В каждом эксперименте только 4% величины измеряемой энтальпии относилось за счет сгорания четыреххлористого углерода; остальная часть обуславливалась вспомогательными веществами. Смит и др. опубликовали также данные для хлороформа, которые после аналогичных исправлений позволили получить $\Delta H_{f, 298}^\circ(l) = -32,3$ ккал/моль; согласно Киркбрайду, энтальпия реакции между хлором и хлороформом с образованием четыреххлористого углерода и хлористого водорода составляет $-22,3$ ккал/моль; сочетание этих данных дает для четыреххлористого углерода $\Delta H_{f, 298}^\circ(l) = -32,5$ ккал/моль. Энтальпия испарения при 298° К, о которой речь идет ниже, дает соответственно $\Delta H_{f, 298}^\circ(g) = -22,2$ и $-24,8$ ккал/моль.

Боденштейн, Гюнтер и Хофмейстер [144] измеряли энтальпию взрыва смеси паров четыреххлористого углерода, хлора и водорода; они получили значение $\Delta H_r = -62,6$ ккал/моль для реакции между четыреххлористым углеродом и водородом с образованием углерода и хлористого водорода. Если принять, что в данном случае энтальпия образования углерода составляет 1—2 ккал/моль [1059], то для CCl_4 $\Delta H_{f, 298}^\circ(g)$ будет находиться в пределах от $-23,9$ до $-24,9$ ккал/моль. Принято округленное среднее значение $\Delta H_{f, 298}^\circ(g) = -24,0$ ккал/моль.

Хикс, Хулей и Стефенсон [594] изучали низкотемпературные свойства и получили следующие данные: $T_t = 225,3^\circ \text{К}$, $\Delta H_t = 1,095$ ккал/моль, $T_{tr} = 250,3^\circ \text{К}$, $\Delta H_m = 0,601$ ккал/моль. Более ранняя работа Лорда и Бланчарда [884] хорошо согласуется с работой Сталла [1431]. Хилденбранд и Мак-Доналд [598] проверили расчеты Хикса и др. по экстраполяции от 15 до 0° К и установили значение $\Delta H_{v, 298}^\circ = 7,75$ ккал/моль, позволившие им рассчитать энтропию $S_{298}^\circ(g) = 73,92$ кал/(моль·°К), согласующуюся в пределах ошибки опыта с величинами, основанными на спектроскопических данных. В результате тщательных исследований Данлоп [359] установил $T_m = 250,4^\circ \text{К}$. Тиммерманс [1501] указывает целый ряд источников, в которых приводятся данные, прекрасно согласующиеся при $T_b = 349,9^\circ \text{К}$. Теплоемкости пара измерял Питцер [1154], который определил также $\Delta H_v = 7,17$ ккал/моль при $349,8^\circ \text{К}$. Согласно Метюсу [940], $\Delta H_v = 7,16$ ккал/моль при $349,5^\circ \text{К}$, что хорошо согласуется с данными Питцера. Результат Кусано [816] $\Delta H_{v, 303} = 7,72$ ккал/моль хорошо согласуется со значениями Хилденбранда и Мак-Доналда. Энтальпии испарения находятся в соответствии с теплоемкостями четыреххлористого углерода в жидком и парообразном состояниях. Данные по теплоемкостям жидкости, полученные Стейвели, Тапманом и Хартом [1407], Харрисоном и Мелвин-Хью-

зом [572], а также Ричардсом и Уоллесом [1225], хорошо согласуются между собой и с результатами, полученными Хиксом, Хулеем и Стефенсоном [594]. Экспериментальные точки в интервале от 250 до 340° К описываются с точностью до 1% уравнением $C_p(l) = 27,65 + 0,013T$ [кал/(моль·°К)].

Из многочисленных расчетов термодинамических функций по спектроскопическим данным можно упомянуть следующие: Стевенсона и Бича [1419], Волда [1545], Черни и Эрдоса [207], Свердлина [1451], Джеллеса и Питцера [465], а также Мадигана и Клевеленда [912]. Принятые здесь значения взяты из работы Олбрайта, Джекелгара и Иппеса [8], в которой вносились исправления в приближении ангармоничности на основе теплоемкостей дифтордихлорметана в паробразном состоянии, опубликованных Мейси [935].

№ 726. Хлорэтан, C_2H_5Cl (состояние идеального газа).
Мол. вес 64,517

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	14,99	65,93	65,93	0,00	-26,70	-14,34	10,509
300	15,05	66,03	65,94	0,03	-26,72	-14,26	10,389
400	18,56	70,85	66,57	1,72	-27,68	-9,96	5,440
500	21,68	75,33	67,88	3,73	-28,47	-5,43	2,374
600	24,31	79,52	69,47	6,04	-29,11	-0,76	0,278
700	26,53	83,44	71,19	8,58	-29,61	4,00	-1,250
800	28,42	87,11	72,96	11,33	-29,99	8,83	-2,411
900	30,06	90,56	74,72	14,26	-30,26	13,70	-3,327
1000	31,48	93,80	76,47	17,33	-30,43	18,60	-4,064

Гордон и Джок [518] изучали низкотемпературные свойства и установили, что $T_{tr} = 134,8^\circ K$, $\Delta H_{tr} = 1,064$ ккал/моль и $T_b = 285,4^\circ K$, при этом $\Delta H_v = 5,892$ ккал/моль. Теплоемкость хлорэтана в жидком состоянии изменяется в температурном интервале 260—290° К в соответствии с уравнением $C_p(l) = 16,57 + 0,28 T$ [кал/(моль·°К)]. Экспериментальное значение энтропии при 285,4° К равно $S^\circ(g) = 65,31$ кал/(моль·°К). Швендеман и Джакобс [1296] рассчитали моменты инерции на основании данных микроволновой спектроскопии и вычислили барьер внутреннего вращения 3685 ккал/моль из результатов измерения Лайда [867]. На основании спектров в далекой инфракрасной области Фейтели и Миллер [410] установили величину барьера, хорошо согласующуюся с результатом Швендемана и Джакобса. Эти значения в сочетании с отнесениями колебаний по Даашу, Лиангу и Нилсену [302] использованы для

расчета термодинамических функций, в том числе величины $S^\circ(g) = 65,25$ кал/(моль·°К) при 285,4° К, которая превосходно согласуется со значением, установленным на основании третьего закона термодинамики. Немного отличающиеся значения функций рассчитаны Гринном и Холденом [540] на основании более ранних микроволновых данных, опубликованных Вагнером и Дейли [1565], и тех же отнесенных колебаний.

Лейчер, Эмери, Бомфолк и Парк [824] измеряли энтальпию реакции между хлорэтаном и водородом с образованием этана и хлористого водорода; ими получено значение $\Delta H_f^\circ(g) = -25,8$ ккал/моль. Кейси и Фордхам [199] на основании результатов измерения энтальпии сгорания получили значение $\Delta H_f^\circ(g) = -23,6$ ккал/моль. Константы равновесия реакции между этиленом и хлористым водородом, опубликованные Лейном, Линнеттом и Освиным [845], Хоулеттом [620], а также Рудковским, Трифелем и Фростом [1262], приводят соответственно к значениям $\Delta H_f^\circ(g)$, равным -26,7, -26,9 и -27,0 ккал/моль. Из данных по равновесию отобрано значение -26,7 ккал/моль.

Эйкен и Франк [383] измеряли теплоемкость пара и получили данные, хорошо согласующиеся с рассчитанными значениями. Кобе и Харрисон [776], а также Кобе и Крауфорд [772] рассчитали термодинамические свойства на основании отнесенных колебаний и барьера 4700 ккал/моль, согласно работе Дааша, Лианга и Нилсена [302].

№ 727. 1,1-Дихлорэтан, $C_2H_4Cl_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 98,966

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	18,22	72,89	72,89	0,00	-31,05	-17,47	12,806
300	18,29	73,01	72,90	0,04	-31,07	-17,39	12,667
400	21,85	78,77	73,66	2,05	-31,77	-12,72	6,948
500	24,82	83,98	75,21	4,39	-32,31	-7,89	3,448
600	27,24	88,72	77,07	7,00	-32,73	-2,96	1,080
700	29,21	93,07	79,05	9,82	-33,04	2,02	-0,632
800	30,85	97,08	81,06	12,83	-33,25	7,04	-1,924
900	32,25	100,80	83,05	15,98	-33,38	12,09	-2,936
1000	33,45	104,26	85,00	19,27	-33,43	17,15	-3,748

Ли и Питцер [862] опубликовали низкотемпературные данные, включающие значения $T_{tr} = 176,18^\circ K$, $\Delta H_{tr} = 1,881$ ккал/моль и $\Delta H_v = 7,409$ ккал/моль. Сглаженные значения теплоемкостей, полученные этими исследователями в интервале 270—300° К,

описываются уравнением $C_p(l) = 24,22 + 0,020T$ [кал/моль·°К)]. Значение энтропии $S_{298}^{\circ}(g) = 72,89$ кал/(моль·°К), вычисленное на основании третьего закона, точно соответствует рассчитанной нами величине, основанной на отнесениях колебаний по Даашу, Лиангу и Нилсену [302] с учетом молекулярной структуры, установленной Данфордом и Ливенгстоном [305] в работе по изучению дифракции электронов. Частота крутильных колебаний, принятая Даашем и др., указывает на наличие барьера внутреннего вращения 3750 кал/моль.

Россини, Вагман, Эванс, Левип и Джаффе [1249] приводят значение $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -36,4$ ккал/моль, основанное на очень старых данных по энтальпиям сгорания. Смит, Бьеллерап, Крук и Уестермарк [1384] установили энтальпию сгорания, которая после исправления, связанного с новой величиной энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142], и приведения к давлению 1 атм и 298° К дает $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -38,37$ ккал/моль. Энтальпия испарения, измеренная Ли и Питцером и приведенная к 298° К, дает $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -31,0$ ккал/моль.

Амадор, Лейчер и Парк [11] измеряли энтальпию гидрирования дихлорэтана до этана и хлористого водорода при 250° С и получили $-34,65$ ккал/моль. Приведение к 298° К дает $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -31,09$ ккал/моль, что прекрасно согласуется с результатами измерения энтальпии сгорания. Принято среднее значение $-31,05$ ккал/моль. Тиммерманс [1501] опубликовал данные по температуре кипения, согласно которым среднее значение $T_b = 330,4^{\circ}$ К. Приведенные Ли и Питцером [862] данные по энтальпии испарения экстраполированы, в результате чего рассчитано значение $\Delta H_v = 6,97$ ккал/моль при температуре кипения.

№ 728. 1,2-Дихлорэтан, $C_2H_4Cl_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 98,966

T, °K	кал/(моль·°К)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	18,80	73,66	73,66	0,00	-31,00	-17,65	12,938
300	19,00	73,78	73,67	0,04	-31,01	-17,57	12,799
400	22,00	79,67	74,45	2,09	-31,67	-12,98	7,093
500	24,70	84,87	76,02	4,43	-32,22	-8,25	3,604
600	26,90	89,58	77,89	7,01	-32,66	-3,41	1,242
700	28,80	93,87	79,87	9,80	-33,00	1,50	-0,467
800	30,40	97,82	81,87	12,76	-33,26	6,44	-1,759
900	31,80	101,49	83,85	15,87	-33,44	11,42	-2,772
1000	33,00	104,90	85,79	19,12	-33,53	16,41	-3,586

Конн, Кистяковский и Смит [259] измеряли энтальпию присоединения хлора к этилену при 355° К и установили, что она равна $-43,65$ ккал/моль. Для этой реакции $\Delta C_p = 0,5$ кал/(моль·°К) и при 298° К $\Delta H_r = -43,68$ ккал/моль. Сочетание этих значений с величиной энтальпии образования этилена, указанной Россини, Вагманом, Эвансом, Левиным и Джаффе [1249], дает $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -31,18$ ккал/моль. Зинке и Сталл [1359] опубликовали данные по энтальпии сгорания 1,2-дихлорэтана в жидком состоянии и рассчитали $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -39,57$ ккал/моль; они ввели также поправки к величине ΔE_s , установленной Смитом, Бьеллерапом, Круком и Уестермарком [1384], и получили $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -38,52$ ккал/моль. Указываемая Гуином и Питцером [556] энтальпия испарения при 298° К, равная 8,44 ккал/моль, близка к величине 8,47 ккал/моль, даваемой Зинке и Сталлом; она использована здесь, поскольку обеспечивает сопоставимость данных. Энтальпия образования идеального газа равна $-30,08$ ккал/моль по данным Смита и др. и $-31,13$ ккал/моль, согласно Зинке и Сталлу. Энтальпия реакции с водородом, приводящей к образованию этана и хлористого водорода, по результатам измерения Сталла, Амадора, Лейчера и Парка [11] при 250° С равна $-35,32$ ккал/моль. После приведения к 298° К вычислено $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -30,47$ ккал/моль. Принято среднее взвешенное значение $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -31,0$ ккал/моль.

В результате изучения низкотемпературных свойств Питцер [1151] установил, что $T_{tr} = 237,2^{\circ}$ К, $\Delta H_{tr} = 2,112$ ккал/моль и $S_{298}^{\circ}(l) = 49,84$ кал/(моль·°К). Для сравнения Питцер указывает также менее надежные значения Рейлинга [1240]. Согласно расчетам Гуина и Питцера [556] на основании низкотемпературных данных $S_{298}^{\circ}(g) = 73,66$ кал/(моль·°К); эти исследователи опубликовали также результаты измерения теплоемкости пара. Теплоемкость идеального газа рассчитана для ряда температур из спектроскопических данных с использованием потенциальной функции для внутреннего вращения, подобранной таким образом, чтобы соответствовать экспериментальным результатам. Сглаженная кривая, проведенная на основании как экспериментальных, так и расчетных точек, использована для определения приведенных здесь значений.

Теплоемкость жидкости измеряли Питцер [1151], Стэйвели, Тапман и Харт [1407] и Рюйтер [1268]; в интервале 280–350° К она описывается уравнением $C_p(l) = 21,05 + 0,033T$ [кал/(моль·°К)]. Дрейсбах [352] приводит значение $T_b = 356,62^{\circ}$ К; согласно измерениям Метюса [940], $\Delta H_v = 7,65$ ккал/моль.

№ 729. 1,1,2-Трихлорэтан, $C_2H_3Cl_3$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 133,415

Зинке [1354] измерял энтальпию сгорания по методу, описанному Зинке и Сталлом [1359], и получил $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -42,7$ ккал/моль. По сообщению Киркбрайда [754] энтальпия хлорирования 1,2-ди-

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	21,27	80,57	80,57	0,00	-33,10	-18,52	13,575
300	21,34	80,71	80,58	0,04	-33,11	-18,43	13,426
400	25,03	87,37	81,46	2,37	-33,57	-13,46	7,355
500	27,92	93,28	83,24	5,02	-33,88	-8,40	3,670
600	30,13	98,57	85,36	7,93	-34,08	-3,28	1,196
700	31,87	103,35	87,60	11,03	-34,19	1,86	-0,581
800	33,28	107,70	89,84	14,29	-34,24	7,01	-1,915
900	34,44	111,69	92,05	17,68	-34,23	12,17	-2,955
1000	35,42	115,37	94,20	21,17	-34,16	17,32	-3,786

хлорэтана до 1,1,2-трихлорэтана с образованием хлористого водорода равно $-27,8$ ккал/моль; эта величина в сочетании с надежно установленными величинами для 1,2-дихлорэтана и хлористого водорода приводит к значению $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -45,3$ ккал/моль. Киркбрайд подчеркивает, что его результат кажется завышенным, поскольку приводит к слишком большой теплоте присоединения хлора к винилхлориду по сравнению с другими аналогичными реакциями. Исходя из этого, приняты результаты измерения энтальпии сгорания. Уильямсон и Харрисон [1617] сообщили данные по энтальпии испарения в температурном интервале $57-85^{\circ}\text{C}$; экстраполяция дает значения $\Delta H_{298}^{\circ} = 9,57$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -33,1$ ккал/моль. Уильямсон и Харрисон опубликовали также данные по теплоемкости пара которые были использованы Харрисоном и Кобе [574] для удовлетворительных отнесений колебаний и установления барьера внутреннего вращения, поскольку это необходимо для расчета термодинамических функций. Тиммерманс и Роланд [1505] определили $T_m = 236,5^{\circ}\text{K}$ и $T_b = 387,2^{\circ}\text{K}$; согласно измерениям Кроу и Смита [296], $\Delta H_m = 2,7$ ккал/моль. Экстраполяция данных Уильямсона и Харрисона приводит к значению $\Delta H_v = 8,3$ ккал/моль при температуре кипения.

№ 730. 1,1,2,2-Тетрахлорэтан, $\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_4$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 167,864

Смит, Бьеллеран, Крук и Уестермарк [1384] опубликовали данные по энтальпии сгорания, которые после исправления с учетом нового значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] и приведения к ΔH_{298}° позволили получить $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -47,2$ ккал/моль. Дрейбах [353] приводит значение $\Delta H_{298}^{\circ} =$

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	24,09	86,69	86,69	0,00	-36,50	-20,45	14,992
300	24,16	86,84	86,70	0,05	-36,51	-20,35	14,827
400	27,90	94,33	87,69	2,66	-36,74	-14,93	8,157
500	30,77	100,88	89,69	5,60	-36,85	-9,46	4,135
600	32,91	106,68	92,04	8,79	-36,85	-3,98	1,451
700	34,55	111,88	94,51	12,16	-36,78	1,49	-0,466
800	35,85	116,58	96,98	15,69	-36,66	6,95	-1,898
900	36,90	120,87	99,40	19,32	-36,48	12,39	-3,008
1000	37,76	124,80	101,75	23,06	-36,26	17,81	-3,892

$= 10,7$ ккал/моль, из которого следует $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -36,5$ ккал/моль. Согласно Дрейбаху, $T_m = 229,4^{\circ}\text{K}$ и $T_b = 419,4^{\circ}\text{K}$; по измерениям Метюса [940] $\Delta H_v = 9,24$ ккал/моль при 419°K . Кобе и Харрисон [776] рассчитали термодинамические функции, допуская, что вращательные изомеры имеют одинаковую энергию. Эти функции не очень надежны, поскольку в действительности вращательные изомеры имеют различную энергию, что подтверждается результатами спектроскопических исследований, выполненных Наито, Накагавай, Куратапи, Итисимой и Мидзусимой [1044], Симапоути [1345], и Злегом, Клевелендом и Мейстером [1645].

№ 731. Пентахлорэтан, C_2HCl_5 (состояние идеального газа).
Мол. вес 202,313

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	28,14	90,95	90,95	0,00	-34,00	-15,93	11,678
300	28,23	91,13	90,96	0,06	-34,00	-15,82	11,525
400	31,77	99,76	92,11	3,06	-33,91	-9,77	5,338
500	34,42	107,15	94,39	6,38	-33,71	-3,76	1,641
600	36,22	113,59	97,07	9,92	-33,45	2,21	-0,805
700	37,53	119,27	99,84	13,61	-33,15	8,13	-2,539
800	38,52	124,35	102,59	17,41	-32,84	14,01	-3,826
900	39,26	128,93	105,27	21,30	-32,50	19,84	-4,818
1000	39,88	133,10	107,85	25,26	-32,15	25,64	-5,603

Нилсен, Лианг и Дааш [4071] изучали спектр пентахлорэтана, произвели отнесение колебаний и рассчитали термодинамические функции при определенных температурах. Кобе и Харрисон [776] опубликовали более полные расчеты на основании тех же отнесений. Смит, Бьеллерап, Крук и Уестермарк [1384] получили данные по энергии сгорания, которые после исправления с учетом нового значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] и приведения к $\Delta H_{C_{298}}^{\circ}$ дали $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -45,3$ ккал/моль. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] приводят значения $T_m = 244,2^{\circ}\text{K}$, $\Delta H_m = 2,7$ ккал/моль, $T_b = 432,5^{\circ}\text{K}$ и $\Delta H_v = 9,7$ ккал/моль при температуре кипения. Если принять оценку ΔC_p испарения равной -12 кал/(моль $\cdot^{\circ}\text{K}$), то $\Delta H_v^{\circ}_{298} = 11,3$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -34,0$ ккал/моль. Киркбрайд [754] измерял энтальпию присоединения хлора к трихлорэтилену. Его данные в пределах ошибки эксперимента соответствуют результатам, полученным при изучении энтальпии сгорания. Курбатов [814] опубликовал данные по теплоемкости жидкости, которые, очевидно, слишком завышены.

№ 732. Гексахлорэтан, C_2Cl_6 (состояние идеального газа).
Мол. вес 236,762

T, °K	кал/(моль $\cdot^{\circ}\text{K}$)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	32,59	94,77	94,77	0,00	-33,80	-13,58	9,954
300	32,67	94,98	94,78	0,07	-33,79	-13,45	9,801
400	36,11	104,88	96,10	3,51	-33,33	-6,74	3,684
500	38,29	113,18	98,71	7,24	-32,80	-0,15	0,068
600	39,69	120,29	101,73	11,14	-32,26	6,32	-2,302
700	40,63	126,49	104,83	15,16	-31,72	12,71	-3,968
800	41,29	131,96	107,89	19,26	-31,20	19,02	-5,195
900	41,76	136,85	110,84	23,41	-30,69	25,26	-6,135
1000	42,11	141,27	113,67	27,61	-30,19	31,45	-6,873

Карни, Пиотровский, Мейстер, Браун и Клевеленд [192] на основании собственных отнесений колебательных частот и данных изучения дифракции электронов, полученных Свиком Карле и Карле [1460], рассчитали термодинамические функции. Кобе и Харрисон [776] опубликовали расчеты, хорошо согласующиеся с расчетами, приведенными в работе [192]. Смит, Бьеллерап, Крук и Уестермарк [1384] получили данные по энергии сгорания, которые после исправления с учетом нового значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] и приведения к $\Delta H_{C_{298}}^{\circ}$ позволили получить $\Delta H_{298}^{\circ}(s) = -49,3$ ккал/моль. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] приводят следующие значения: $T_m = 344,4^{\circ}\text{K}$, $\Delta H_m =$

$= 1,9$ ккал/моль, $T_m = 459,9^{\circ}\text{K}$, $\Delta H_m = 2,33$ ккал/моль и $T_s = 457,6^{\circ}\text{K}$, при этой температуре $\Delta H_s = 12,2$ ккал/моль. Если принять ΔC_p сублимации -9 кал/(моль $\cdot^{\circ}\text{K}$), то расчетное значение $\Delta H_{298}^{\circ} = 15,5$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -33,8$ ккал/моль. Киркбрайд [754] измерял энтальпию присоединения хлора к тетрахлорэтилену. Его данные соответствуют энтальпии сгорания этих соединений.

№ 733. 1-Хлорпропан, $\text{C}_3\text{H}_7\text{Cl}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 78,543

T, °K	кал/(моль $\cdot^{\circ}\text{K}$)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	20,24	76,27	76,27	0,00	-31,10	-12,11	8,876
300	20,34	76,40	76,28	0,04	-31,13	-11,99	8,736
400	25,36	82,96	77,14	2,33	-32,42	-5,41	2,956
500	29,73	89,10	78,92	5,09	-33,49	1,47	-0,643
600	33,43	94,85	81,10	8,26	-34,34	8,54	-3,111
700	36,57	100,25	83,45	11,76	-35,01	15,75	-4,917
800	39,24	105,31	85,87	15,55	-35,51	23,03	-6,291
900	41,57	110,07	88,30	19,60	-35,86	30,37	-7,375
1000	43,59	114,55	90,70	23,86	-36,07	37,75	-8,250

Грин и Холден [540] рассчитали термодинамические свойства на основании вполне допустимых отнесений колебаний, принятых для связи и углов, метильного и скелетного барьеров внутреннего вращения, равных соответственно 3100 и 2900 кал/моль, и разности энергии между *транс*- и *гаиш*-вращательными изомерами, равной 50 кал/моль. Данные, полученные Сарахманом [1276] методом микроволновой спектроскопии, а также данные Морино и Кухитцу [1026], полученные методом дифракции электронов, подтверждают приведенные выше оценки; на этом основании приняты значения Грина и Холдена.

Смит, Бьеллерап, Крук и Уестермарк [1384] неправильно цитировали энтальпию сгорания, полученную Эфtringом [370]. Результат, исправленный с учетом нового значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] и приведенный к значению $\Delta H_{C_{298}}^{\circ}$, дает $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -37,5$ ккал/моль. По данным измерений Метюса и Фелланта [941] $\Delta H_v = 6,62$ ккал/моль при 319°K . Если принять оценку ΔC_p испарения -12 кал/(моль $\cdot^{\circ}\text{K}$), то $\Delta H_v^{\circ}_{298} = 6,9$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -30,6$ ккал/моль. Дэвис, Лейчер и Парк [308] измеряли энтальпию реакции между 1-хлорпропаном и водородом с образованием пропана и хлористого водорода и по этим данным рассчитали

значение $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -31,54$ ккал/моль. Принято среднее значение $-31,1$ ккал/моль.

Данные Тиммерманса [1501] по температурам перехода не отличаются согласованностью. В лаборатории Тиммерманса получены следующие значения: $T_m = 150,35^{\circ}\text{K}$ и $T_b = 319,75^{\circ}\text{K}$. Перез Масиа и Диаз Пенья [1137] опубликовали значения вторых вириальных коэффициентов для пара в температурном интервале $323-398^{\circ}\text{K}$.

№ 734. 2-Хлорпропан, $\text{C}_3\text{H}_7\text{Cl}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 78,543

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	20,87	72,70	72,70	0,00	-35,00	-14,94	10,954
300	20,97	72,83	72,71	0,04	-35,03	-14,82	10,797
400	25,99	79,57	73,59	2,40	-36,26	-7,89	4,312
500	30,48	85,86	75,42	5,23	-37,26	-0,68	0,297
600	34,20	91,76	77,66	8,47	-38,04	6,71	-2,443
700	37,30	97,27	80,07	12,04	-38,62	14,22	-4,439
800	39,94	102,43	82,55	15,91	-39,05	21,79	-5,952
900	42,20	107,26	85,03	20,02	-39,33	29,42	-7,143
1000	44,16	111,81	87,48	24,34	-39,49	37,07	-8,102

Термодинамические функции рассчитаны на основании предложенных Шеплердом [1344] отнесенной колебаний; средние длины связей рекомендованы Саттоном [1449]; согласно оценке, барьер внутреннего вращения составляет $4,0$ ккал/моль. Данные Ямаха [1637] по дифракции электронов согласуются в пределах экспериментальной ошибки с величинами длин связей по Саттону. Расчетные значения термодинамических функций использовали в сочетании с константами равновесия реакции дегидрохлорирования, экспериментально установленными Хоулеттом [620], и таким образом было рассчитано значение $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -35,2$ ккал/моль. Менее точные данные по равновесиям, полученные Энтелсом и Чирковым [379], приводят к значению $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -34,6$ ккал/моль. Смит, Бьеллерап, Крук и Уестермарк [1384] опубликовали данные по энергии сгорания, которые после исправления с учетом нового значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] и приведения к ΔH_{298}° дают $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -42,3$ ккал/моль. Метюс и Феландт [941] определили $\Delta H_v = 6,34$ ккал/моль при 309°K . Если принять оценку ΔC_p испарения -12 ккал/(моль·°K), то $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 6,47$ ккал/моль. Сочетание этих значений с результатами Смита и др. дает $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -35,8$ ккал/моль, что хорошо согласуется с экспериментальными

величинами. Девис, Лейчер и Парк [308] определили энтальпию реакции с водородом, приводящей к образованию пропана и хлористого водорода, на основании чего рассчитали $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -32,93$ ккал/моль, которая кажется слишком положительной. Принято среднее взвешенное значение, равное $-35,0$ ккал/моль.

Тиммерманс [1501] приводит $T_m = 156,2^{\circ}\text{K}$ и $T_b = 308,0^{\circ}\text{K}$. Перез Масиа и Диаз Пенья [1137] измеряли молярные объемы пара в температурном интервале $313-398^{\circ}\text{K}$.

№ 735. 1,2-Дихлорпропан, $\text{C}_3\text{H}_6\text{Cl}_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 112,992

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	23,47	84,80	84,80	0,00	-39,60	-19,86	14,558
300	23,60	84,95	84,81	0,05	-39,62	-19,74	14,380
400	28,60	92,44	85,79	2,66	-40,66	-12,95	7,074
500	32,95	99,30	87,82	5,75	-41,48	-5,92	2,588
600	36,47	105,63	90,27	9,22	-42,11	1,25	-0,455
700	39,47	111,48	92,89	13,02	-42,56	8,52	-2,659
800	41,97	116,92	95,55	17,10	-42,87	15,83	-4,325
900	44,18	122,00	98,21	21,41	-43,04	23,18	-5,630
1000	46,08	126,75	100,83	25,92	-43,09	30,55	-6,676

Согласно Амадору, Лейчеру и Парку [11], энтальпия реакции 1,2-дихлорпропана с водородом при 250°C , которая приводит к образованию пропана и хлористого водорода, равна $-31,215$ ккал/моль; приведение к 298°K дает $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -39,08$ ккал/моль. По сообщению Смита, Бьеллерапа, Крука и Уестермарка [1384] результаты измерения энергии сгорания, исправленные с учетом нового значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] и приведенные к ΔH_{298}° дают $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -48,7$ ккал/моль. Согласно Дрейсбаху [353], $\Delta H_{298}^{\circ} = 8,68$ ккал/моль, что дает $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -40,0$ ккал/моль. Принято среднее значение $-39,6$ ккал/моль.

Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XII.2. По данным Дрейсбаха $T_m = 172,71^{\circ}\text{K}$, $T_b = 369,52^{\circ}\text{K}$ и $\Delta H_v = 7,59$ ккал/моль при точке кипения. В работе Курбатова [814] приводятся приближенные данные по теплоемкости жидкости. Изучены структура и барьеры внутреннего вращения на основании данных по дипольным моментам [1090], спектрам комбинационного рассеяния [1027], теплоемкости при низких температурах [296] и дифракции электронов [1627].

№ 736. 1,3-Дихлорпропан, $C_3H_6Cl_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 112,992

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	23,81	87,76	87,76	0,00	-38,60	-19,74	14,472
300	23,93	87,91	87,77	0,05	-38,62	-19,63	14,298
400	28,69	95,46	88,76	2,69	-39,64	-13,14	7,176
500	32,82	102,32	90,80	5,77	-40,46	-6,41	2,802
600	36,22	108,62	93,25	9,22	-41,11	0,46	-0,167
700	39,11	114,42	95,87	12,99	-41,59	7,43	-2,320
800	41,56	119,81	98,53	17,03	-41,94	14,45	-3,948
900	43,70	124,83	101,17	21,30	-42,16	21,52	-5,226
1000	45,50	129,53	103,78	25,76	-42,26	28,61	-6,251

Пересчет энергии сгорания по Смигу, Бьеллеру, Круку и Уестермарку [1384] с учетом нового значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] и приведение к ΔHc_{298}° дают $\Delta Hf_{298}^\circ(l) = -48,3$ ккал/моль. Согласно Дрейсбаху [353], $\Delta Hv_{298}^\circ = 9,66$ ккал/моль, что дает $\Delta Hf_{298}^\circ(l) = -38,6$ ккал/моль. Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XII.2. По данным Дрейсбаху [353] $Tm = 173,7^\circ K$, $Tb = 393,6^\circ K$ и при этой температуре $\Delta Hv = 8,10$ ккал/моль..

№ 737. 2,2-Дихлорпропан, $C_3H_6Cl_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 112,992

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	25,30	77,92	77,92	0,00	-42,00	-20,21	14,813
300	25,40	78,08	77,93	0,05	-42,02	-20,08	14,625
400	30,56	86,12	78,99	2,86	-42,87	-12,62	6,897
500	34,75	93,40	81,15	6,13	-43,50	-4,99	2,180
600	38,06	100,04	83,76	9,78	-43,95	2,76	-1,004
700	40,75	106,12	86,52	13,72	-44,26	10,57	-3,300
800	43,00	111,74	89,33	17,91	-44,46	18,41	-5,030
900	44,91	116,89	92,10	22,31	-44,54	26,28	-6,382
1000	46,56	121,71	94,83	26,88	-44,53	34,16	-7,464

Опубликованные Смитом, Бьеллером, Круком и Уестермарком [1384] данные по энергии сгорания, исправленные с учетом нового

значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142], позволили получить значение ΔHc_{298}° и соответственно $\Delta Hf_{298}^\circ(l) = -49,65$ ккал/моль. Согласно Дрейсбаху [353], $\Delta Hv_{298}^\circ = 7,64$ ккал/моль, что дает $\Delta Hf_{298}^\circ(g) = -42,0$ ккал/моль. Отнесение колебательных частот проведено Тобином [1509]; структурные данные получены Коутсом и Ливингстоном [281]. Эти данные использованы в сочетании с оценочным значением барьера внутреннего вращения 4,0 ккал/моль для расчета термодинамических свойств идеального газа. По данным Дрейсбаху [353] $Tm = 239,4^\circ K$, $Tb = 343,7^\circ K$ и $\Delta Hv = 7,0$ ккал/моль при точке кипения.

№ 738. 1,2,3-Трихлорпропан, $C_3H_5Cl_3$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 147,441

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	26,82	91,52	91,52	0,00	-44,40	-23,37	17,132
300	26,96	91,69	91,53	0,05	-44,42	-23,24	16,933
400	31,71	100,12	92,64	2,99	-45,20	-16,06	8,775
500	35,69	107,63	94,90	6,37	-45,80	-8,70	3,804
600	38,87	114,43	97,60	10,10	-46,26	-1,24	0,452
700	41,52	120,63	100,45	14,13	-46,58	6,29	-1,964
800	43,79	126,32	103,34	18,40	-46,78	13,85	-3,784
900	45,68	131,59	106,19	22,87	-46,88	21,44	-5,207
1000	47,34	136,49	108,97	27,52	-46,88	29,04	-6,346

Бьеллер и Смит [141] измеряли энергию сгорания в калориметре с вращающейся бомбой, а Смит, Бьеллер, Крук и Уестермарк [1384] опубликовали данные, полученные методом стационарной калориметрической бомбы. Метод вращающейся калориметрической бомбы считается более точным; данные, полученные этим методом, исправлены с учетом нового значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] и приведены к ΔHc_{298} ; они позволили получить значение $\Delta Hf_{298}^\circ(l) = -55,65$ ккал/моль. Согласно Дрейсбаху [353], $\Delta Hv_{298}^\circ = 11,22$ ккал/моль, что дает $\Delta Hf_{298}^\circ(g) = 44,4$ ккал/моль. Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XII.2. Дрейсбах [353] приводит значения $Tm = 258,5^\circ K$ и $Tb = 430,0^\circ K$ (при этой температуре $\Delta Hv = 8,87$ ккал/моль). Нелсон и Ньютон [1051] экспериментально определили $Cp(l) = 34,3 + 0,032T$ [ккал/(моль °K)], 270—350° K]. В работе Курбатова [814] также приведены данные о теплоемкостях жидкости, однако они недостаточно точны.

№ 739. 1-Хлорбутан, C_4H_9Cl (состояние идеального газа).
Мол. вес 92,569

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	25,71	85,58	85,58	0,00	-35,20	-9,27	6,797
300	25,84	85,74	85,59	0,05	-35,23	-9,11	6,640
400	32,30	94,08	86,68	2,97	-36,85	-0,15	0,084
500	37,98	101,92	88,95	6,49	-38,17	9,18	-4,042
600	42,77	109,27	91,73	10,53	-39,22	18,75	-6,828
700	46,85	116,18	94,74	15,02	-40,03	28,48	-8,891
800	50,31	122,67	97,83	19,88	-40,62	38,30	-10,463
900	53,32	128,77	100,93	25,06	-41,03	48,20	-11,703
1000	55,92	134,53	104,00	30,53	-41,26	58,13	-12,704

Грип и Холден [540] рассчитали термодинамические свойства на основании собственных значений для 1-хлорпропана и метиленовых инкрементов Персона и Пиментела [1140]. Смит, Бьеллерап, Крук и Уестермарк [1384] приводят данные по энергии сгорания, которые после исправления с учетом нового значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] и приведения к ΔH_{298} дают $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -43,2$ ккал/моль. Метюс и Феландт [941] экспериментально получили значение $\Delta H_v = 7,38$ ккал/моль при 349,7° K. Если принять оценку ΔC_p испарения -13 кал/(моль·°K), то $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 8,0$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -35,2$ ккал/моль. По согласующимся данным Дрейсбаха [352] и Тиммерманса [1501] $T_m = 150,0^{\circ}$ K и $T_b = 351,6^{\circ}$ K. Перез Масиа и Диаз Пенья [1137] определили второй вириальный коэффициент в температурном интервале 358—423° K. Укайи и Бонам [1525] определили скелетную структуру и сделали некоторые выводы об относительной стабильности вращательных изомеров на основании изучения дифракции электронов.

№ 740. 2-Хлорбутан, C_4H_9Cl (состояние идеального газа).
Мол. вес 92,569

Энергия сгорания по данным Смита, Бьеллерапа, Крука и Уестермарка [1384], приведенная к ΔH_{298} и исправленная с учетом нового значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142], дает $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -46,2$ ккал/моль. Дрейсбах [353] приводит значения $\Delta H_v = 6,98$ ккал/моль при $T_m = 141,9^{\circ}$ K и $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 7,60$ ккал/моль, откуда $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -38,6$ ккал/моль. Приведены оценки термодинамических функций для состояния идеального газа. Укайи и Бонам [1525] установили структуру и сделали некоторые

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	25,93	85,94	85,94	0,00	-38,60	-12,78	9,368
300	26,07	86,11	85,95	0,05	-38,63	-12,62	9,195
400	32,52	94,50	87,05	2,99	-40,23	-3,70	2,022
500	38,33	102,40	89,34	6,54	-41,52	5,59	-2,441
600	43,18	109,83	92,14	10,62	-42,53	15,10	-5,500
700	47,33	116,81	95,17	15,15	-43,29	24,78	-7,735
800	50,84	123,36	98,29	20,06	-43,84	34,53	-9,433
900	53,92	129,53	101,42	25,30	-44,19	44,36	-10,770
1000	56,60	135,35	104,53	30,83	-44,36	54,21	-11,847

выводы относительно стабильности вращательных изомеров на основании данных, полученных при изучении дифракции электронов.

№ 741. 1-Хлор-2-метилпропан, C_4H_9Cl (состояние идеального газа).
Мол. вес 92,569

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	25,93	84,56	84,56	0,00	-38,10	-11,87	8,700
300	26,07	84,73	84,57	0,05	-38,13	-11,71	8,530
400	32,52	93,12	85,67	2,99	-39,73	-2,65	1,447
500	38,33	101,02	87,96	6,54	-41,02	6,78	-2,962
600	43,18	108,45	90,76	10,62	-42,03	16,43	-5,984
700	47,33	115,43	93,79	15,15	-42,79	26,24	-8,192
800	50,84	121,98	96,91	20,06	-43,34	36,13	-9,871
900	53,92	128,15	100,04	25,30	-43,69	46,10	-11,193
1000	56,60	133,97	103,15	30,83	-43,86	56,09	-12,258

Энергия сгорания по данным Смита, Бьеллерапа, Крука и Уестермарка [1384] исправлена с учетом нового значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] и приведена к ΔH_{298} , что дает $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -45,8$ ккал/моль. Согласно Тиммермансу [1501], $T_m = 142,0^{\circ}$ K и $T_b = 342,0^{\circ}$ K. Энтальпия испарения при 298° K оценена на основании сопоставления с аналогичными соединениями признана равной 7,7 ккал/моль, что дает $\Delta H_{298}^{\circ}(g) =$

= -38,1 ккал/моль. Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XII.2.

№ 742. 2-Хлор-2-метилпропан, C_4H_9Cl (состояние идеального газа).
Мол. вес 92,569

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° _{298°})/T	H°-H° _{298°}	ΔHf°	ΔGf°	
298	27,30	77,00	77,00	0,00	-43,80	-45,32	41,226
300	27,40	77,17	77,01	0,06	-43,83	-45,14	41,030
400	34,00	85,98	78,16	3,13	-45,28	-5,35	2,921
500	39,60	94,19	80,56	6,82	-46,43	4,78	-2,087
600	44,20	101,83	83,47	11,02	-47,34	15,10	-5,500
700	48,10	108,94	86,61	15,64	-48,01	25,57	-7,982
800	51,50	115,59	89,82	20,62	-48,48	36,10	-9,863
900	54,50	121,83	93,03	25,92	-48,77	46,70	-11,340
1000	57,00	127,71	96,21	31,50	-48,89	57,33	-12,528

Величина ΔEs по данным Смита, Бьеллерапа, Крука и Уестермарка [1384] исправлена с учетом нового значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] и приведена к ΔHс₂₉₈, что дает ΔHf₂₉₈^o(l) = -50,1 ккал/моль. Согласно Дрейсбаху [353], ΔHv₂₉₈^o = 7,0 ккал/моль, откуда следует, что ΔHf₂₉₈^o(g) = -43,1 ккал/моль. Хаулетт [619, 620] рассчитал термодинамические функции на основании отнесений колебаний, почти полностью соответствующих отнесениям Шеппарда [1343] и Тобина [1509], а также величинам моментов инерции, согласно Уильямсу и Горди [1615], и значению барьера внутреннего вращения, равному 3600 кал/моль. Хаулетт [619], Кистяковский и Штауффер [763], а также Леванова и Андриевский [857] опубликовали данные о равновесных константах реакции между 2-метилпропаном и хлористым водородом. Эти данные хорошо согласуются и приводят к среднему значению ΔHf₂₉₈^o(g) = -43,8 ккал/моль. Признано, что данные о равновесиях более точны, чем результаты измерения энтальпии сгорания, и поэтому принято значение -43,8 ккал/моль.

Кушнер, Кроу и Смит [817] экспериментально определили Tt = 183,1° K при ΔHt = 0,41 ккал/моль, Tt = 219,6° K при ΔHt = 1,39 ккал/моль и ΔHm = 0,48 ккал/моль. Согласно Дрейсбаху [353], Tm = 247,8° K, Tb = 323,9° K и ΔHv = 6,6 ккал/моль при температуре кипения.

Недавно опубликованные работы по изучению структуры полутвердают данные Уильямса и Горди (об этом говорят результаты

микроволновых спектроскопических исследований Лайда и Джена [868] и Зейла, Винневиссера и Мюллера [1642], а также результаты работ по дифракции электронов Боуена, Джилкриста и Саттона [152] Бастиансена и Смедвика [81]).

№ 743. 1-Хлорпентан, $C_5H_{11}Cl$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 106,595

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° _{298°})/T	H°-H° _{298°}	ΔHf°	ΔGf°	
298	31,18	94,89	94,89	0,00	-41,80	-8,94	6,551
300	31,34	95,09	94,90	0,06	-41,84	-8,74	6,364
400	39,24	105,21	96,22	3,60	-43,77	2,60	-1,423
500	46,23	114,74	98,98	7,88	-45,35	14,39	-6,288
600	52,11	123,70	102,36	12,81	-46,60	26,45	-9,634
700	57,13	132,12	106,02	18,27	-47,55	38,71	-12,085
800	61,38	140,03	109,78	24,20	-48,24	51,07	-13,952
900	65,07	147,48	113,56	30,53	-48,71	63,52	-15,425
1000	68,25	154,50	117,30	37,20	-48,96	76,02	-16,613

Грин и Холден [540] рассчитали термодинамические свойства на основании собственных значений для 1-хлорпропана и метиленовых инкрементов Персона и Пиментела [1140]. Бьеллерап и Смит [141] измеряли энтальпию сгорания с помощью калориметра с вращающейся бомбой. Их значения, исправленные с учетом нового значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] и приведенные к давлению 1 атм и 298° K, дают ΔHf₂₉₈^o = -50,8 ккал/моль. Более ранние работы, проводившиеся с неподвижной бомбой, обсуждались Смитом, Бьеллерапом, Круком и Уестермарком [1384]; после внесения соответствующих исправлений эти более ранние результаты приводят к значению ΔHf₂₉₈^o(l) = -51,1 ккал/моль, что хорошо согласуется с величиной, полученной позже. Мегос и Феладт [941] экспериментально определили ΔHv = 7,93 ккал/моль при 381° K. Если принять оценку ΔСр испарения -14 кал/(моль·°K), то ΔHv₂₉₈^o = 9,1 ккал/моль. Отобрано ΔHf₂₉₈^o(g) = -41,8 ккал/моль, поскольку предпочтение отдано результатам, полученным в работах с вращающейся калориметрической бомбой. Согласно Дрейсбаху [353], Tm = 174,2° K и Tb = 380,9° K.

№ 744. 1-Хлор-3-метилбутан, $C_5H_{11}Cl$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 106,595

Энергия сгорания по данным Смита, Бьеллерапа, Крука и Уестермарка [1384] исправлена с учетом нового значения энтальпии окисле-

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	32,00	95,56	95,56	0,00	-43,10	-10,44	7,651
300	32,16	95,76	95,57	0,06	-43,14	-10,24	7,458
400	40,10	106,13	96,92	3,69	-44,99	1,02	-0,579
500	47,10	115,85	99,75	8,06	-46,48	12,70	-5,572
600	52,90	124,96	103,20	13,06	-47,64	24,65	-8,978
700	57,80	133,49	106,92	18,60	-48,52	36,78	-11,481
800	61,90	141,48	110,75	24,59	-49,15	49,00	-13,384
900	65,60	148,99	114,59	30,97	-49,56	61,30	-14,885
1000	68,70	156,07	118,38	37,69	-49,77	73,64	-16,092

ния мышьяковистого ангидрида [142] и приведена к ΔH_{298} , что дает $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -51,86$ ккал/моль. По данным России и сотр. [1250] $T_m = 168,8^{\circ}\text{K}$ и $T_b = 371,4^{\circ}\text{K}$. Энтальпия испарения при 298°K по оценке равна $8,72$ ккал/моль; это значение, полученное путем сравнения с аналогичными соединениями, дает $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -43,1$ ккал/моль. Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XII.2. Курбатов [814] приводит недостаточно точные данные по теплоемкости 1-хлор-3-метилбутана в жидком состоянии.

Энергия сгорания по данным Смита, Бьеллерапа, Крука и Устермарка [1384] исправлена с учетом нового значения энтальпии окисле-

№ 745. 2-Хлор-2-метилбутан, $\text{C}_5\text{H}_{11}\text{Cl}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 106,595

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	31,45	88,06	88,06	0,00	-48,40	-13,50	9,886
300	31,62	88,26	88,07	0,06	-48,44	-13,29	9,687
400	39,80	98,50	89,41	3,64	-50,33	-1,27	0,694
500	47,10	108,18	92,20	8,00	-51,84	11,18	-4,887
600	53,30	117,34	95,64	13,03	-52,98	23,89	-8,700
700	58,20	125,93	99,36	18,61	-53,81	36,77	-11,480
800	62,50	133,99	103,19	24,65	-54,40	49,75	-13,589
900	65,90	141,55	107,03	31,07	-54,77	62,79	-15,243
1000	69,20	148,67	110,85	37,83	-54,93	75,88	-16,582

ния мышьяковистого ангидрида [142] и приведена к ΔH_{298} , что дает $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -56,6$ ккал/моль. Метус и Феландт [941] экспериментально определили, что при $356,4^{\circ}\text{K}$ $\Delta H_v = 7,34$ ккал/моль. Если принять оценку ΔC_p испарения -14 кал/(моль·°K), то $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -48,4$ ккал/моль. Согласно Дрейсбаху [353], $T_m = 199,7^{\circ}\text{K}$ и $T_b = 358,8^{\circ}\text{K}$. Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XII.2.

№ 746. Хлорэтилен, $\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 62,501

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	12,84	63,08	63,08	0,00	8,40	12,31	-9,021
300	12,89	63,16	63,09	0,03	8,39	12,33	-8,982
400	15,56	67,25	63,62	1,45	7,86	13,73	-7,500
500	17,80	70,97	64,73	3,13	7,43	15,24	-6,663
600	19,61	74,38	66,06	5,00	7,06	16,84	-6,134
700	21,10	77,52	67,47	7,04	6,76	18,50	-5,776
800	22,35	80,42	68,91	9,21	6,51	20,19	-5,516
900	23,43	83,11	70,34	11,50	6,31	21,92	-5,322
1000	24,35	85,63	71,75	13,89	6,17	23,66	-5,170

Приведенные здесь термодинамические функции рассчитаны на основании данных об основных частотах, указанных в работе Галликсона и Нилсена [546], а также структурных констант, полученных микроволновым методом Кайвелсоном, Уилсоном и Лайдом [764]. Результаты, недавно полученные при изучении дифракции электронов Капланом [714] и Акишиным, Вилковым и Весниным [7], удовлетворительно согласуются с микроволновыми данными. Ричардс [1224] рассчитал почти идентичные значения термодинамических функций, основываясь на отпесениях Томпсона и Торкинтона [1494] с использованием более ранних данных по электронной дифракции, полученных Броквеем, Вичем и Полингом [171]. Лейчер, Готтлиб и Парк [825] рассчитали значение $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 8,072$ ккал/моль на основании величины энтальпии присоединения хлористого водорода к ацетилену. Более ранняя работа Лейчера, Эмери, Бомфалка и Парка [824] по определению энтальпии гидрирования хлорэтилена до этана и хлористого водорода приводит к значению $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 8,889$ ккал/моль. Отобрано значение $8,40$ ккал/моль. Гхош и Гуха [471] изучали равновесный состав при пиролизе 1,2-дихлорэтана. Полученные ими констан-

ты равновесия дают $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 13,54$ ккал/моль, а это значение наверняка можно считать завышенным. Кобе и Крауфорд [772] опубликовали данные по термодинамическим свойствам, основанные на значении $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 7,5$ ккал/моль, отобранном Россини, Вагманом, Эвансом, Левином и Джаффе [1249] на основании более ранней работы Томсена [1495]. Мак-Доналд, Шрейдер и Сталл [969] экспериментально определил $T_m = 94,43^{\circ}\text{K}$ и $T_b = 259,35^{\circ}\text{K}$. Зинке и Сталл [1359] опубликовали данные по энтальпии сгорания поливинилхлорида и рассчитали значение $\Delta H_{298}^{\circ}(s)$, равное $-22,6$ ккал на 1 моль мономера. Согласно расчетам, энтальпия полимеризации газа составляет $-31,0$ ккал на 1 моль мономера.

№ 747. 1,1-Дихлорэтилен, $\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 96,950

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	16,02	68,85	68,85	0,00	0,30	5,78	-4,235
300	16,08	68,95	68,86	0,03	0,29	5,81	-4,233
400	18,80	73,97	69,52	1,78	0,03	7,69	-4,204
500	20,86	78,39	70,86	3,77	-0,18	9,64	-4,212
600	22,44	82,34	72,45	5,94	-0,33	11,61	-4,229
700	23,69	85,90	74,12	8,25	-0,45	13,61	-4,250
800	24,71	89,13	75,80	10,67	-0,54	15,63	-4,269
900	25,57	92,09	77,45	13,18	-0,60	17,65	-4,287
1000	26,29	94,82	79,05	15,78	-0,63	19,68	-4,302

Хилденбранд, Мак-Доналд, Крамер и Сталл [599] изучали низкотемпературные свойства и опубликовали данные, включающие $T_m = -150,59^{\circ}\text{K}$, $\Delta H_m = 1,557$ ккал/моль, $\Delta H_{298}^{\circ} = 6,328$ ккал/моль и $S_{298}^{\circ}(l) = 48,17$ кал/(моль·°K) и $S_{298}^{\circ}(g) = 69,04$ кал/(моль·°K). Экспериментально установленное значение энтропии согласуется в пределах ошибки опыта с величиной $S_{298}^{\circ}(g) = 68,85$ кал/(моль·°K), основанной на отношении колебаний, рекомендованном Эвансом [390], и структурных констант, полученных Секино и Нисикава [1330] микроволновым методом. Хилденбранд и др. рассчитали термодинамические функции вплоть до 1500°K ; эти функции приняты здесь. Данные по электронной дифракции, полученные Ливингстоном, Рао Капраном и Роксом [879], хорошо согласуются с результатами Секино и Нисикава.

Зинке и Сталл [1359] измеряли энтальпию сгорания и получили значение $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -6,0$ ккал/моль. Сочетание этого значения с энтальпией испарения, полученной Хилденбрандом и др., дает

$\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 0,3$ ккал/моль. Зинке и Сталл измеряли также энтальпию сгорания полимера и получили $\Delta H_p = -18,0$ ккал на 1 моль мономера. Согласно Йоши [704], $\Delta H_p = -17,5$ ккал на 1 моль мономера, а по данным Тонга и Кеньона [1514] $\Delta H_p = -14,4$ ккал на 1 моль мономера.

Хилденбранд и др. [599] измеряли давление пара и установили, что $T_b = 304,71^{\circ}\text{K}$, $\Delta H_v = 6,26$ ккал/моль. Их значения для теплоемкостей удовлетворяют уравнению $C_p(l) = 15,55 + 0,037T$ [кал/(моль·°K), 270–305°K]. Татевский и Фрост [1469], а также Кобе и Харрисон [774] установили термодинамические свойства, основанные на оценках и менее точных спектроскопических данных, нежели данные, доступные в настоящее время.

№ 748. 1,2-Дихлорэтилен, *цис*, $\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 96,950

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	15,55	69,20	69,20	0,00	0,45	5,82	-4,268
300	15,61	69,30	69,21	0,03	0,44	5,86	-4,266
400	18,41	74,19	69,85	1,74	0,13	7,71	-4,213
500	20,57	78,54	71,16	3,69	-0,10	9,64	-4,211
600	22,23	82,44	72,72	5,84	-0,29	11,60	-4,225
700	23,54	85,97	74,37	8,13	-0,42	13,59	-4,244
800	24,60	89,19	76,02	10,54	-0,52	15,60	-4,261
900	25,48	92,14	77,65	13,04	-0,60	17,62	-4,279
1000	26,23	94,86	79,24	15,63	-0,63	19,65	-4,294

Питцер и Холленберг [1163] изучали инфракрасный спектр и подтвердили отношения колебаний, сделанные Берстейном и Рамсеем [119]. Длины связей и углы между ними определены Флайгаром и Хоуе [434] методом микроволновой спектроскопии, а также Хоффманом [610] методом дифракции электронов; полученные в обоих работах данные хорошо согласуются между собой. Эти данные использованы для расчета термодинамических функций. Броерс, Кетелаар и Ван Фелден [172] экспериментально установили $T_m = 193,1^{\circ}\text{K}$ и $\Delta H_m = 1,72$ ккал/моль. Кетелаар, Ван Фелден и Цалм [743] измеряли давление пара в температурном интервале от 240 до 372°K и установили, что $T_b = 333,8^{\circ}\text{K}$. Их данные, относящиеся к интервалу $273-328^{\circ}\text{K}$ удовлетворяют уравнению, используемому в методе Прозена [1192], и оценочному значению ΔC_p испарения, равному -12 кал/(моль·°K), основанному на единственном значении для теплоемкости жидкости, полученном Мелем [988]. Это уравнение для давления пара, оценка T_c , равная 500°K , и оценка P_c , равная 50 атм, использованы

для расчета $\Delta H_{298}^{\circ} = 7,43$ ккал/моль на основании соотношения Хаггенмахера [560]. Оцененное таким образом значение ΔC_p испарения приводит к величине $\Delta H_{333,8}^{\circ} = 7,0$ ккал/моль.

Смит, Бьеллерап, Крук и Уестермарк [1384] опубликовали данные измерения энергии сгорания, которые после приведения к ΔH_{298}° и исправления с учетом нового значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] дают $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -6,7$ ккал/моль. Смит и др. опубликовали также данные по энергии сгорания 1,1,2,2-тетрахлорэтана, которые после аналогичного исправления приводят в сочетании с энтальпией присоединения хлора к 1,2-дихлорэтилену (*цис*), полученной Киркбрайдом [754], к величине $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -6,8$ ккал/моль. Согласно расчетам, основанным на результатах изучения равновесия, полученных Маронеем [932], а также Вудом и Стевенсоном [1626], энтальпия измеризации при 298° К 1,2-дихлорэтилена (*цис*) в 1,2-дихлорэтилен (*транс*) составляет 0,55 ккал/моль. При рассмотрении данных, относящихся к *цис*- и *транс*-измерам, отобрано значение для 1,2-дихлорэтилена (*цис*) $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 0,45$ ккал/моль.

№ 749. 1,2-Дихлорэтилен, *транс*, $C_2H_2Cl_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 96,950

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	15,93	69,29	69,29	0,00	1,00	6,35	-4,652
300	15,99	69,39	69,30	0,03	0,99	6,38	-4,647
400	18,58	74,36	69,96	1,77	0,71	8,22	-4,491
500	20,65	78,74	71,28	3,73	0,49	10,13	-4,426
600	22,28	82,65	72,86	5,88	0,31	12,07	-4,396
700	23,57	86,19	74,51	8,18	0,18	14,04	-4,384
800	24,62	89,40	76,18	10,59	0,08	16,03	-4,378
900	25,50	92,36	77,81	13,09	0,01	18,03	-4,377
1000	26,24	95,08	79,40	15,68	-0,03	20,03	-4,377

Питцер и Холленберг [1163] изучали спектр в далекой инфракрасной области и пересмотрели отнесения двух низких частот, сделанные ранее Бернштейном и Рамсеем [119]. Питцер и Холленберг рассчитали приняты здесь термодинамические функции на основании структурных констант Броквея, Бича и Полинга [171]. Данные Каппала [714] по дифракции электронов дают другие значения длин связей, но в то же время приводит почти к той же величине суммарного момента инерции. Броерс, Кетелаар и Ван Фелден [172] экспериментально определили $T_m = 193,1^{\circ}$ К и $\Delta H_m = 1,72$ ккал/моль. Кетелаар, Ван Фелден и Цалм [743] измеряли давление пара в темпе-

ратурном интервале 273—358° К и установили, что $T_b = 320,8^{\circ}$ К. Их данные для интервала 273—358° К удовлетворяют уравнению, используемому в методе Прозена [1192], и оценочному значению ΔC_p испарения, равному -12 ккал/(моль·°K), основанному на единственном значении для теплоемкости жидкости, полученном Мелом [988]. Это уравнение для давления пара и оценки $T_c = 500^{\circ}$ К и $P_c = 50$ атм использованы для расчета $\Delta H_{298}^{\circ} = 6,92$ ккал/моль на основании соотношения Хаггенмахера [560]. Оцененное таким образом значение ΔC_p испарения приводит к величине $\Delta H_{320,8}^{\circ} = 6,65$ ккал/моль.

Смит, Бьеллерап, Крук и Уестермарк [1384] опубликовали данные, полученные в результате измерений энергии сгорания, которые после приведения к ΔH_{298}° и исправления с учетом нового значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] дают $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -6,1$ ккал/моль. Энтальпия изомеризации 1,2-дихлорэтилена (*цис*) в 1,2-дихлорэтилен (*транс*), согласно расчетам на основании данных о равновесии, полученных Маронеем [932] и Вудом и Стевенсоном [1626], составляет 0,55 ккал/моль. При рассмотрении данных, относящихся к *цис* и *транс*-изомерам, для *транс*-формы 1,2-дихлорэтилена отобрано значение 1,00 ккал/моль.

№ 750. Трихлорэтилен, C_2HCl_3 (состояние идеального газа).
Мол. вес 131,399

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	19,17	77,63	77,63	0,00	-1,40	4,75	-3,482
300	19,25	77,75	77,64	0,04	-1,40	4,79	-3,488
400	21,80	83,66	78,42	2,10	-1,43	6,86	-3,747
500	23,67	88,73	79,99	4,38	-1,42	8,93	-3,904
600	25,06	93,17	81,82	6,82	-1,39	11,00	-4,005
700	26,12	97,12	83,73	9,38	-1,34	13,06	-4,077
800	26,94	100,66	85,63	12,03	-1,29	15,11	-4,127
900	27,61	103,88	87,48	14,76	-1,23	17,16	-4,166
1000	28,15	106,81	89,27	17,55	-1,15	19,19	-4,195

Данные по энергии сгорания, полученные Смитом, Бьеллерапом, Круком и Уестермарком [1384], после приведения к ΔH_{298}° и исправления с учетом нового значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] дают $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -9,6$ ккал/моль. Киркбрайд [754] измерил энтальпию присоединения хлора к трихлорэтилену и энтальпию дегидрохлорирования 1,1,2,2-тетрахлорэтана. Используя полученные значения в сочетании с энергией сгорания по данным Смита и др. для пентахлорэтана и для 1,1,2,2-тетрахлорэтана, мы

рассчитали значения $\Delta Hf_{298}^{\circ}(l) = -9,3$ ккал/моль и $\Delta Hf_{298}^{\circ}(l) = -10,8$ ккал/моль соответственно, что хорошо согласуется в пределах точности эксперимента. Согласно Метюсу [940], при $358,8^{\circ}\text{K}$ $\Delta Hv = 7,52$ ккал/моль. Оценочное значение ΔCp испарения, равное -11 ккал/(моль $\cdot^{\circ}\text{K}$), дает $\Delta Hv_{298}^{\circ} = 8,2$ ккал/моль и $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = -1,4$ ккал/моль. Как-Доналд [967] измерял давление пара, а также плотности трихлорэтилена в жидком и парообразном состояниях; рассчитанные им энтальпии испарения оказались слишком завышенными по сравнению с соответствующими величинами, опубликованными Метюсом. Курбатов [814] опубликовал данные по теплоемкости жидкости, однако его результаты для других соединений, по-видимому, свидетельствуют о невысокой точности измерений. Тиммерманс и Роланд [1505] экспериментально установили $Tm = 188,4^{\circ}\text{K}$ и $Tb = 360,1^{\circ}\text{K}$.

Аллен и Бернштейн [9] изучали спектр, произвели отнесения основных частот, сделали оценку длин связей и углов между ними, а также рассчитали термодинамические функции, которые и приняты здесь. Кобе и Харрисон [774] также предложили отнесения колебаний, но их расчетные значения теплоемкостей, по-видимому, слишком завышены по сравнению с величинами для других хлорзамещенных этилена.

№ 751. Тетрахлорэтилен, C_2Cl_4 (состояние идеального газа).
Мол. вес 165,848

T, °K	кал/(моль $\cdot^{\circ}\text{K}$)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔHf°	ΔGf°	
298	22,69	81,46	81,46	0,00	-3,40	4,90	-3,592
300	22,73	81,64	81,47	0,05	-3,40	4,95	-3,607
400	25,10	88,49	82,39	2,44	-3,15	7,70	-4,206
500	26,73	94,27	84,20	5,04	-2,90	10,38	-4,539
600	27,86	99,25	86,30	7,77	-2,66	13,02	-4,741
700	28,68	103,61	88,47	10,60	-2,43	15,61	-4,874
800	29,29	107,48	90,61	13,50	-2,23	18,17	-4,964
900	29,73	110,96	92,68	16,45	-2,03	20,71	-5,029
1000	30,07	114,11	94,67	19,44	-1,84	23,23	-5,076

Результаты измерения энергии сгорания, полученные Смитом, Бьеллераном, Круком и Уестермарком [1384], после исправления с учетом полого значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] и приведения к ΔH_{298}° дают $\Delta Hf_{298}^{\circ}(l) = -12,8$ ккал/моль. Смит и др. опубликовали также значение для гексахлорэтана, которое после аналогичного исправления позволяет получить в сочетании с результатами Киркбрайда [754] для энтальпии

присоединения хлора к тетрачлорэтилену величину $\Delta Hf_{298}^{\circ}(l) = -12,3$ ккал/моль, что хорошо согласуется с ранее указанным значением. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] отобрали $Tm = 250,8^{\circ}\text{K}$, $\Delta Hm = 2,5$ ккал/моль и $Tb = 394,2^{\circ}\text{K}$, при этом $\Delta Hv = 8,3$ ккал/моль. Если принять оценку ΔCp испарения -11 ккал/(моль $\cdot^{\circ}\text{K}$), то $\Delta Hv_{298}^{\circ} = 9,4$ ккал/моль и $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = -3,4$ ккал/моль. Курбатов [814] измерял теплоемкость тетрачлорэтилена в жидком состоянии, однако его результаты, полученные для других соединений, по-видимому, свидетельствуют о невысокой точности работы. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] приводят значение $\Delta Hf_{298}^{\circ}(l) = -3$ ккал/моль, основанное на старых данных по энтальпии сгорания, полученных Томсоном [1495].

Мани, Мил и Плайлер [923] пересмотрели отнесения колебаний, предложенные Манном, Аквистой и Плайлером [920], и использовали структурные константы, приведенные в работе Карле И. и Карле Дж. [718], для расчета термодинамических функций, принятых здесь. Кобе и Харрисон [774] рассчитали теплоемкости по отнесению Торкингтона [1516]. Их значения существуют также соответствующих величин, полученных Манном, Милом и Плайлером.

№ 752. 3-Хлорпропен-1, $\text{C}_3\text{H}_5\text{Cl}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 76,527

T, °K	кал/(моль $\cdot^{\circ}\text{K}$)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔHf°	ΔGf°	
298	18,01	73,29	73,29	0,00	-0,15	10,42	-7,644
300	18,10	73,41	73,30	0,04	-0,17	10,49	-7,640
400	22,12	79,18	74,06	2,05	-1,04	14,18	-7,747
500	25,55	84,49	75,62	4,44	-1,78	18,07	-7,899
600	28,43	89,41	77,51	7,15	-2,40	22,10	-8,050
700	30,85	93,98	79,54	10,11	-2,90	26,23	-8,188
800	32,93	98,24	81,62	13,30	-3,29	30,41	-8,307
900	34,75	102,23	83,69	16,69	-3,59	34,65	-8,413
1000	36,30	105,97	85,73	20,24	-3,79	38,91	-8,503

Работы Лоссинга, Инголда и Хендерсона [887] по дифракции электронов имеют отношение к энтальпиям образования аллилоксида и аллилхлорида. Результаты Геллнера и Скиппера [466] для аллилоксида приводят к значению $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = 0,0$ для аллилхлорида. Результаты измерения энтальпии сгорания, полученные Томсоном и скорректированные Карашем [744], приводят к значению $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = -0,3$ ккал/моль. Принято среднее значение $-0,15$ ккал/моль. Термодинамические функции оценены с использованием констант, приведенных в табл. XII.2, при этом в качестве

исходного углеводорода был взят бутен-1, Боуен, Джилкрист и Саттон [152] опубликовали структурные константы, определенные по методу дифракции электронов. Согласно Тиммермансу [1501], $T_m = 138,7^\circ \text{K}$ и $T_b = 318,3^\circ \text{K}$.

**Ароматические хлорпроизводные. Таблицы
для состояния идеального газа**

№ 753. Хлорбензол, $\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 112,557

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	23,43	74,92	74,92	0,00	12,39	23,70	-17,368
300	23,57	75,07	74,93	0,05	12,37	23,76	-17,311
400	30,62	82,84	75,94	2,77	11,46	27,71	-15,139
500	36,49	90,33	78,07	6,13	10,74	31,86	-13,925
600	41,16	97,41	80,71	10,02	10,18	36,13	-13,161
700	44,86	104,04	83,58	14,33	9,75	40,50	-12,644
800	47,89	110,24	86,53	18,97	9,43	44,91	-12,268
900	50,40	116,03	89,49	23,89	9,20	49,36	-11,986
1000	52,48	121,45	92,41	29,04	9,07	53,83	-11,765

Смит, Бьеллерап, Крук и Уестермарк [1384] внесли исправления в результаты измерений ΔE_s , первоначально полученные Карлссоном [719]. Их окончательное значение, исправленное с учетом нового значения энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] и приведенное к ΔH_{s298} , дает $\Delta H_{f298}^\circ(l) = 2,74$ ккал/моль. Хаббард, Ноултон и Хаффман [635] также измеряли энтальпию сгорания. Их результаты приводят к значению $\Delta H_{f298}^\circ(l) = 2,43$ ккал/моль. Принято среднее значение 2,58 ккал/моль. Хилденбранд [595] определил величину $\Delta H_{v298}^\circ = 9,81$ ккал/моль, откуда следует, что $\Delta H_{f298}^\circ(g) = 12,39$ ккал/моль. Киркбрайд [754] измерял энтальпию хлорирования бензола. Его результат дает $\Delta H_{f298}^\circ(l) = 1,8$ ккал/моль, что хорошо согласуется с данными по энтальпии сгорания в пределах экспериментальной ошибки, равной 1 ккал/моль. Хаббард и др. [635] приводят ссылки на более ранние работы по определению энтальпии сгорания.

Уиффен [1603] произвел отнесение основных частот и использовал моменты инерции, найденные Эрландссоном [381], для расчета термодинамических функций, приведенных здесь. Шерер и Эванс [1284] подтвердили отнесение частот колебаний, а Пойшгер [1184] подтвердил результаты, полученные микроволновым методом. Годиев, Свердлов и Савогина [502] также сделали отнесение частот и рассчи-

тали термодинамические функции в хорошем соответствии с результатами Уиффена.

По данным измерений Хилденбранда [595] $T_m = 227,81^\circ \text{K}$ и $\Delta H_m = 2,43$ ккал/моль. Согласно Дрейсбаху [351], $T_m = 227,57^\circ \text{K}$ и по Тиммермансу [1501] $T_m = 228,0^\circ \text{K}$; Сталл [1431] установил, что $T_m = 227,9^\circ \text{K}$ и $\Delta H_m = 2,28$ ккал/моль. Сталл [1431] измерял теплоемкость в температурном интервале $90-320^\circ \text{K}$, однако из полученных данных нельзя рассчитать энтропию ввиду слишком значительной экстраполяции. Дрейсбах [351] указывает значение $T_b = 404,85^\circ \text{K}$, хорошо согласующееся с данными, приведенными Тиммермансом [1501]. Метьюс [940] экспериментально определил $\Delta H_v = 8,73$ ккал/моль при 405°K . Теплоемкости хлорбензола в жидком состоянии, приведенные Сталлом [1431] и Хилденбрандом [595], удовлетворяют соотношению $C_p(l) = 19,50 + 0,055 T$ [кал/(моль · °K)], $290-350^\circ \text{K}$.

№ 754. o-Дихлорбензол, $\text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 147,006

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	27,12	81,61	81,61	0,00	7,16	19,76	-14,485
300	27,26	81,78	81,62	0,06	7,15	19,84	-14,452
400	34,12	90,60	82,77	3,14	6,53	24,17	-13,207
500	39,69	98,83	85,17	6,84	6,07	28,64	-12,518
600	44,07	106,47	88,09	11,03	5,73	33,18	-12,086
700	47,51	113,53	91,23	15,62	5,49	37,79	-11,797
800	50,28	120,06	94,43	20,51	5,33	42,41	-11,584
900	52,54	126,11	97,62	25,65	5,23	47,05	-11,424
1000	54,42	131,75	100,75	31,00	5,22	51,70	-11,298

Зинке и Сталл [1359] измеряли энтальпию сгорания в статической калориметрической бомбе, стенки которой изнутри покрыты стеклотканью, пропитанной водным раствором мышьяковистого ангидрида; расчет на основе полученных результатов дает $\Delta H_{f298}^\circ(l) = -4,43$ ккал/моль. Хаббард, Ноултон и Хаффман [635], проводя аналогичные измерения, использовали в качестве восстанавливающего агента водный раствор дихлоргидрата гидразина; из полученных результатов рассчитано значение $\Delta H_{f298}^\circ(l) = -4,41$ ккал/моль. Бьеллерап и Смит [144] работали с вращающимся бомбовым калориметром и использовали водный раствор мышьяковистого ангидрида. Смит, Бьеллерап, Крук и Уестермарк [1384] уточнили энтальпии сгорания, полученные по «кварц-спиральному» методу Карлссоном [719] и Бьеллерапом [134]. Эти значения были дополнительно исправ-

лены с учетом новой величины энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] и привели к значениям $\Delta H_f^{\circ}_{298}(l)$, соответственно $-4,19$ $-5,49$ и $-4,28$ ккал/моль. Все эти величины хорошо согласуются между собой (исключение составляет значение, полученное Карлссоном, пользовавшимся тиглем с целлофановым покрытием). Другие исследователи применяли стеклянные ампулы. Принято среднее взвешенное значение, равное $-4,40$ ккал/моль. Мак-Доналд, Шрейдер и Сталл [969] опубликовали данные по давлению пара в температурном интервале $400-450^{\circ}\text{K}$, а также значение $T_m = 256,15^{\circ}\text{K}$ и $T_b = 453,57^{\circ}\text{K}$. Согласно уравнению, полученному этими исследователями для давления пара, и оценочному значению коэффициента сжатия, равному $0,98$, было рассчитано $\Delta H_v = 10,0$ ккал/моль при средней температуре 428°K . Принятая оценка ΔC_p испарения, равная -12 ккал/(моль $\cdot^{\circ}\text{K}$), приводит тогда к величине $\Delta H_v = 9,7$ ккал/моль для точки кипения и $\Delta H_v^{\circ}_{298} = 11,56$ ккал/моль откуда следует, что $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = 7,16$ ккал/моль. Согласно Дрейсбаху [351], $\Delta H_m = 3,19$ ккал/моль.

Отнесение основных частот, предложенное Шерером и Эвансом [1281], использовали в сочетании с межатомами расстояниями по Саттону [1449] для расчета термодинамических функций. Годнев и Свердлин [501] также произвели отнесение основных частот и рассчитали функции, прекрасно согласующиеся с данными упомянутых выше авторов.

№ 755. *m*-Дихлорбензол, $\text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 147,006

T, °K	кал/(моль $\cdot^{\circ}\text{K}$)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H^{\circ}_{298})/T$	$H^{\circ}-H^{\circ}_{298}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	27,20	82,09	82,09	0,00	6,32	18,78	-13,765
300	27,34	82,26	82,10	0,06	6,31	18,85	-13,735
400	34,18	91,10	83,25	3,14	5,69	23,14	-12,612
500	39,74	99,34	85,66	6,85	5,24	27,56	-12,015
600	44,09	106,99	88,58	11,05	4,90	32,05	-11,673
700	47,53	114,05	91,72	15,63	4,67	36,60	-11,426
800	50,29	120,58	94,93	20,53	4,51	41,17	-11,245
900	52,55	126,64	98,12	25,67	4,41	45,76	-11,110
1000	54,42	132,28	101,26	31,03	4,40	50,35	-11,004

Хаббард, Ноултон и Хаффман [635] измеряли энтальпию сгорания в статической калориметрической бомбе, стенки которой изнутри покрыты стеклотканью, пропитанной водным раствором хлоргидрата гидразина; расчет на основе полученных результатов дает $\Delta H_f^{\circ}_{298}(l) = -5,12$ ккал/моль. Смит, Беллерац, Крук и Уестермарк

[1384] пересчитали энергию сгорания, экспериментально определенную Карлссоном [719], который пользовался статической калориметрической бомбой, стенки которой изнутри покрыты кварцевым волокном, пропитанным водным раствором мышьяковистого ангидрида. Полученная таким образом энтальпия образования приблизительно на 1 ккал/моль более отрицательна по сравнению с величиной, рассчитанной Хаббардом и др., при этом исправление с учетом новой энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] увеличивает расхождение. Как уже указывалось при обсуждении результатов для *o*-дихлорбензола, метод Карлссона, предусматривающий завертывание образца в целлофан, систематически приводит к более низким результатам для летучих соединений. Хаббард и др. помещали образец в стеклянные ампулы; здесь приняты результаты этих исследователей.

Дрейсбах [351] приводит значения $T_m = 248,39^{\circ}\text{K}$ и $T_b = 446,23^{\circ}\text{K}$, а также константы уравнения Антуана для давления пара. Это уравнение и оценочную величину коэффициента сжатия использовали для расчета $\Delta H_v^{\circ}_{298} = 11,44$ ккал/моль, откуда следует $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = 6,32$ ккал/моль.

Отнесение основных частот, предложенное Шерером и Эвансом [1281], использовали в сочетании со структурными константами по Саттону [1449] для расчета термодинамических функций, которые хорошо согласуются с соответствующими функциями, вычисленными Годневым и Свердлиным [501].

№ 756. *p*-Дихлорбензол, $\text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 147,006

T, °K	кал/(моль $\cdot^{\circ}\text{K}$)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H^{\circ}_{298})/T$	$H^{\circ}-H^{\circ}_{298}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	27,22	80,47	80,47	0,00	5,50	18,44	-13,518
300	27,36	80,64	80,48	0,06	5,49	18,52	-13,492
400	34,24	89,49	81,63	3,15	4,88	22,97	-12,548
500	39,80	97,75	84,04	6,86	4,43	27,54	-12,039
600	44,16	105,40	86,97	11,06	4,10	32,19	-11,726
700	47,60	112,48	90,12	15,66	3,87	36,90	-11,521
800	50,35	119,02	93,33	20,56	3,72	41,63	-11,371
900	52,60	125,08	96,52	25,71	3,63	46,37	-11,260
1000	54,46	130,73	99,66	31,07	3,62	51,12	-11,173

Хаббард, Ноултон и Хаффман [635] измеряли энтальпию сгорания в статической калориметрической бомбе, стенки которой изнутри покрыты стеклотканью, пропитанной водным раствором хлоргидрата гидразина; расчет на основе полученных результатов дает

$\Delta H_{298}^{\circ}(s) = -10,35$ ккал/моль. Хаббард и др. приводят также результаты трех предшествующих определений, выполненных в Университете в Лунде (Швеция), с использованием в качестве восстанавливающего агента мышьяковистого ангидрида. Результат Карлссона [719], полученный при работе со статической калориметрической бомбой, футерованной кварцевым волокном, был пересчитан Смитом, Бьеллерасом, Круком и Уестермарком [1384]. Смит и Саннер [1385] опубликовали результаты, полученные при работе с «встряхиваемой» и вращающейся калориметрическими бомбами. Упомянутые ранее три значения, полученные в Лунде, приводят после исправления их с учетом новой энтальпии окисления мышьяковистого ангидрида [142] и к величине $\Delta H_{298}^{\circ}(s)$, равной соответственно $-9,72$, $-10,16$ и $-9,87$ ккал/моль. Эти три значения получены в результате опытов с образцом, завернутым в целлофан. Для жидкости этот метод дает систематически заниженные результаты (см. о-дихлорбензол), однако для твердого кристаллического вещества результаты оказываются правильными, поэтому здесь принято общее среднее значение $\Delta H_{298}^{\circ}(s) = -10,0$ ккал/моль.

Мак-Дональд, Шрейдер и Сталл [969] опубликовали значения $T_m = 326,14^{\circ}\text{K}$, $T_b = 447,21^{\circ}\text{K}$ и константы уравнения Антуана для давления пара. На основании уравнения, полученного этими исследователями, и оценочного значения коэффициента сжатия была получена величина $\Delta H_v = 9,5$ ккал/моль при 447°K . Уолш и Смит [1569] измеряли давление пара *n*-дихлорбензола в твердом состоянии и вычислили $\Delta H_{s_{298}} = 15,5$ ккал/моль, а это даст $\Delta f_{298}^{\circ}(g) = 5,5$ ккал/моль. Уолш и Смит приводят обзорные данные, согласно которым переход происходит при $313 \pm 5^{\circ}\text{K}$. Хринаковский и Смочквичева [623] приводят значение $\Delta H_m = 4,4$ ккал/моль, а Уберрейтер и Ортманн [1524] $\Delta H_m = 4,34$ ккал/моль. Данные по теплоемкости, полученные Уберрейтером и Ортманном [1524], а также Хилденбрандом [595], удовлетворяют уравнению $C_p(s) = -3,9 + 0,13T$ [кал/(моль·°K)], $290-340^{\circ}\text{K}$.

Шеррер и Эванс [1281] произвели отнесения основных частот: структурные молекулярные параметры установлены Саттоном [1449]. Термодинамические функции, полученные на основании этих данных, хорошо согласуются с результатами аналогичных расчетов Годнева и Свердлина [501].

№ 757. Гексахлорбензол, C_6Cl_6 (состояние идеального газа).
Мол. вес 284,802

На основании данных, полученных при измерении энтальпии сгорания, Зинке и Сталл [1359] рассчитали величину $\Delta H_{298}^{\circ}(s) = -31,3$ ккал/моль. По результатам измерения теплоемкостей при низких температурах Хилденбранд, Крамер и Сталл [597] вычислили $S_{298}^{\circ}(s) = 62,20$ кал/(моль·°K) Шеррер и Эванс [1281] предложили отнесения частот колебаний, эти отнесения использованы для расче-

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	41,90	105,45	105,45	0,00	-8,10	10,56	-7,740
300	42,03	105,71	105,46	0,08	-8,09	10,67	-7,776
400	48,08	118,67	107,18	4,60	-7,54	16,85	-9,207
500	52,52	129,90	110,63	9,64	-6,97	22,89	-10,003
600	55,78	139,78	114,68	15,06	-6,42	28,80	-10,490
700	58,18	148,56	118,90	20,77	-5,89	34,64	-10,813
800	59,96	156,45	123,11	26,68	-5,40	40,39	-11,032
900	61,31	163,60	127,22	32,74	-4,93	46,08	-11,189
1000	62,34	170,11	131,19	38,93	-4,46	51,72	-11,303

тов термодинамических функций для состояния идеального газа в предположении плоской гексагональной структуры молекулы межатомных расстояний C—Cl и C—C, равных соответственно 1,70 и 1,397 Å. Давление сублимации при температуре $370-400^{\circ}\text{K}$ измеряли Сирс и Хонке [1328]. Их результаты были экстраполированы к 298°K и использованы в сочетании с величинами энтропий гексахлорбензола в твердом и парообразном состояниях для расчета энтальпии сублимации, оказавшейся равной $23,2$ ккал/моль, что приводит к величине $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -8,1$ ккал/моль. Хилденбранд [595] определил $T_m = 501,7^{\circ}\text{K}$ и $\Delta H_m = 6,1$ ккал/моль.

Ацилхлориды. Таблица для состояния идеального газа

№ 758. Ацетилхлорид, $\text{C}_2\text{H}_3\text{ClO}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 78,501

°K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	16,21	70,47	70,47	0,00	-58,30	-49,29	36,130
300	16,26	70,58	70,48	0,04	-58,31	-49,24	35,867
400	18,86	75,62	71,14	1,79	-58,86	-46,12	25,200
500	21,19	80,08	72,49	3,80	-59,33	-42,88	18,744
600	23,18	84,12	74,10	6,02	-59,73	-39,56	14,409
700	24,86	87,83	75,80	8,42	-60,05	-36,17	11,292
800	26,30	91,24	77,52	10,98	-60,31	-32,74	8,945
900	27,54	94,41	79,22	13,68	-60,51	-29,28	7,111
1000	28,60	97,37	80,89	16,49	-60,65	-25,80	5,639

Оверенд, Найквист, Эванс и Поттс [1095] сделали отнесения основных частот колебаний и рассчитали термодинамические функции с использованием предварительных значений структурных констант и потенциального барьера внутреннего вращения, установленных Синнотом микроволновым методом. Окончательные значения, опубликованные Синнотом [1360], лишь незначительно отличаются от предварительных. Карсон и Скиннер [198] измеряли энтальпию гидролиза ацетилхлорида. Питчард и Скиннер [1187] повторили эти измерения и пересчитали результаты Карсона и Скиннера. Оба значения согласуются в пределах ошибки эксперимента; в сочетании с данными Эванса и Скинера [389] для энтальпии образования уксусной кислоты эти величины позволили рассчитать энтальпию образования ацетилхлорида $\Delta H_f^{\circ}_{298}(l) = -65,5$ ккал/моль. Метюс и Феландт [941] измеряли энтальпию испарения при температуре кипения и установили, что она равна $6,93$ ккал/моль. Если принять оценку ΔC_p испарения -11 ккал/(моль \cdot °K), то, согласно расчетам, $\Delta H_v^{\circ}_{298} = 7,2$ ккал/моль. Мак-Доналд, Шрейдер и Сталл [969] измеряли давление пара и рассчитали константы уравнения Антуана. Сочетание с оценками критических констант для 500° K и 50 атм, а также уравнение Хаггенмахера [560] позволяет получить такое же значение $\Delta H_v^{\circ}_{298} = 7,2$ ккал/моль. Энтальпия образования ацетилхлорида в состоянии идеального газа $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -58,3$ ккал/моль. Согласно Мак-Доналду, Шрейдеру и Сталлу [969], $T_m = 160,3^{\circ}$ K и $T_b = 323,9^{\circ}$ K.

**Алифатические бромпроизводные. Таблицы
для состояния идеального газа**

№ 759. Бромметан, CH_3Br (состояние идеального газа).
Мол. вес 94,950

T, °K	кал/(моль \cdot °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H^{\circ}_{298})/T$	$H^{\circ}-H^{\circ}_{298}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	10,14	58,75	58,75	0,00	-9,00	-6,73	4,932
300	10,17	58,82	58,76	0,02	-9,02	-6,71	4,891
400	11,93	61,99	59,18	1,13	-13,32	-5,09	2,783
500	13,56	64,83	60,03	2,41	-13,85	-2,97	1,299
600	14,97	67,43	61,05	3,83	-14,30	-0,75	0,275
700	16,19	69,83	62,13	5,39	-14,66	1,53	-0,479
800	17,25	72,06	63,24	7,07	-14,96	3,86	-1,056
900	18,19	74,15	64,33	8,84	-15,18	6,23	-1,514
1000	19,00	76,11	65,41	10,70	-15,36	8,63	-1,885

Хартли, Притчард и Скиннер [575] измеряли энтальпию реакции диметилртути с бромом и с бромидом ртути. Карсон А, Карсон Е. и Уилларст [194] использовали эти результаты в сочетании с собственным значением энтальпии сгорания диметилртути и установили для бромметана $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -8,6$ ккал/моль. Константы равновесия реакции между хлорметаном и бромистым водородом с образованием бромметана и хлористого водорода опубликованы в работе Бэка [60]. На основании функции энергии Гиббса и энтальпий образования, принятых в этой работе для бромметана, было рассчитано значение $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -9,66$ ккал/моль. Согласно Россину, Вагману, Эвансу, Левину и Джаффе [1249], $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -8,5$ ккал/моль; эта величина получена на основании данных по теплотам сгорания пятидесятилетней давности. Маргрейв [929] опубликовал результаты масс-спектрометрических определений потенциалов, приводящие к значению $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -7,6$ ккал/моль. Фоуэлл, Лейчер и Парк [435] на основании определения энтальпии гидрирования до метана бромистого водорода установили $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -8,97$ ккал/моль. Принято среднее взвешенное значение $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -9,0$ ккал/моль. Эган и Кемп [373] опубликовали следующие низкотемпературные термические данные: $T_t = 173,78^{\circ}$ K, $\Delta H_t = 0,113$ ккал/моль, $T_{tr} = 179,47^{\circ}$ K, $\Delta H_{tr} = 1,429$ ккал/моль, $T_b = 276,71^{\circ}$ K, при этом $\Delta H_v = 5,715$ ккал/моль и $S^{\circ}_{298}(g) = 58,61$ ккал/(моль \cdot °K). Экспериментальное значение энтропии хорошо согласуется с рассчитанным Вейсманом, Бернстейном, Россером, Мейстером и Клевелендом [1584] значением $S^{\circ}_{298}(g) = 58,75$ ккал/(моль \cdot °K), полученным на основании собственных отнесений колебаний и величин моментов инерции, близких к микроволновым результатам Миллера, Аамодта, Доусманьса, Тоунса и Крейчмала [1008]. Здесь приняты термодинамические функции, опубликованные Вейсманом и др. В удовлетворительном согласии с указанными функциями находятся более ранние расчеты Джеллеса и Питцера [465], а также Свердлина и Годнева [4453].

№ 760. Бромэтан, $\text{C}_2\text{H}_5\text{Br}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 108,976

Термодинамические функции рассчитаны с использованием отнесений колебаний по Шеппарду [1341] с исправлениями Грина и Холдена [540] и моментов инерции, полученных методом микроволновой спектроскопии Фланаганом и Пирсом [430]. Фланаган и Пирс по микроволновым результатам Лайда [867] определили барьер внутреннего вращения, равный 3684 ккал/моль. Термодинамические функции, рассчитанные Грином и Холденом, удовлетворительно согласуются со значениями, принятыми в настоящей работе; Грин и Холден использовали более ранние микроволновые результаты Вагнера, Дейли и Солимсна [1566] и принимали барьер внутреннего вращения

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	15,45	68,71	68,71	0,00	-15,30	-6,29	4,608
300	15,48	68,81	68,72	0,03	-15,33	-6,23	4,539
400	18,93	73,75	69,36	1,76	-19,95	-2,29	1,254
500	21,99	78,31	70,70	3,81	-20,73	2,21	-0,967
600	24,56	82,55	72,33	6,14	-21,35	6,86	-2,498
700	26,73	86,50	74,07	8,71	-21,83	11,60	-3,622
800	28,58	90,20	75,86	11,47	-22,19	16,40	-4,480
900	30,19	93,66	77,65	14,41	-22,45	21,24	-5,158
1000	31,59	96,91	79,41	17,50	-22,62	26,11	-5,707

3567 ккал/моль, установленный Лайдом [867]. Ли и Россини [863] на основании обзора данных по давлению пара рассчитали константы уравнения Антуана, которые приводят к значению $T_b = 311,5^\circ \text{K}$. В сочетании с отобранными Кобе и Линном [780] значениями $T_c = 503,9^\circ \text{K}$ и $P_c = 61,5 \text{ атм}$ эти константы уравнения Антуана приводят к значениям $\Delta H_{298}^\circ = 6,57 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{311,5}^\circ = 6,41 \text{ ккал/моль}$. Колосовский и Алимов [799] измеряли энтальпию испарения и получили хорошо согласующиеся данные. Согласно Тиммермансу [1500, 1502], $T_m = 154,6^\circ \text{K}$ и $\Delta H_m = 1,4 \text{ ккал/моль}$. Курбагов [814] измерял теплоемкости бромэтана в жидком состоянии, однако, по-видимому, его данные не отличаются высокой точностью.

Лейн, Линнетт и Осун [845] измеряли константы равновесия реакции между этиленом и бромистым водородом; на основании полученных данных они рассчитали для бромэтана $\Delta H_{298}^\circ(g) = -15,3 \text{ ккал/моль}$. Карсон А., Карсон Е и Уиллмарст [194] на основании результатов измерений энтальпии сгорания диэтилртути и данных Хартли, Притчарда и Скипнера [576], относящихся к реакции диэтилртути с бромом и бромидом ртути, определили значение $\Delta H_{298}^\circ(l) = -22,1 \text{ ккал/моль}$. Приведение к газообразному состоянию дает величину $\Delta H_{298}^\circ(g) = -15,5 \text{ ккал/моль}$. Ашкрофт, Карсон, Картер и Лей [27] измеряли энтальпию реакции этилбромидом с гидридом лития и вычислили $\Delta H_{298}^\circ(l) = -23,0 \text{ ккал/моль}$. Пересчет для газообразного состояния дает $\Delta H_{298}^\circ(g) = -16,4 \text{ ккал/моль}$. Фоуелл, Лейчер и Парк [435] получили данные по энтальпии гидрирования до этана и бромистого водорода, которые позволили им рассчитать значение $\Delta H_{298}^\circ(g) = 14,79 \text{ ккал/моль}$. Принято среднее взвешенное значение $-15,3 \text{ ккал/моль}$. Согласно Россини, Варману, Эвансу, Левину и Джаффе [1249], $\Delta H_{298}^\circ(g) = -13,0 \text{ ккал/моль}$, но эта величина основана на старых данных, представляющих лишь исторический интерес.

№ 761. 1,2-Дибромэтан, $\text{C}_2\text{H}_4\text{Br}_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 187,884

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	20,40	78,81	78,81	0,00	-9,30	-2,53	1,852
300	20,45	78,94	78,82	0,04	-9,33	-2,49	1,810
400	23,83	85,30	79,66	2,26	-17,23	1,40	-0,762
500	26,80	90,94	81,36	4,80	-17,61	6,10	-2,666
600	29,24	96,05	83,39	7,60	-17,85	10,86	-3,957
700	31,20	100,71	85,54	10,63	-17,97	15,66	-4,890
800	32,94	104,99	87,71	13,83	-17,99	20,47	-5,591
900	34,48	108,96	89,85	17,21	-17,91	25,27	-6,137
1000	35,80	112,67	91,95	20,72	-17,74	30,07	-6,571

Питцер [1151] изучал низкотемпературные свойства и установил, что $T_{tr} = 283,1^\circ \text{K}$ и $\Delta H_m = 2,62 \text{ ккал/моль}$; согласно его расчетам, $S_{298}^\circ(l) = 53,37 \text{ ккал/(моль·°K)}$. Гуинн и Питцер [556] на основании значения энтальпии испарения $8,69 \text{ ккал/моль}$ при 405°K , установленной Метюсом [940], рассчитали $S_{298}^\circ(g) = 78,81 \text{ ккал/(моль·°K)}$. Гуинн и Питцер [556] измеряли также теплоемкость газообразного 1,2-дибромэтана, однако им не удалось установить параметры для внутреннего вращения, которые приводили бы к результатам статистических расчетов, согласующимся как с энтропией, так и с теплоемкостями пара. Поэтому приняты экспериментальные значения и использованы оценки для экстраполяции к более высоким температурам. Тиммерманс [1501] приводит восемь значений точки плавления, хорошо согласующихся с данными Питцера [1151], и три значения точки кипения, хорошо согласующиеся при $404,8^\circ \text{K}$.

Конн, Кистяковский и Смит [259] измеряли энтальпию присоединения брома к этилену при 355°K . Приведение этих данных к 298°K и использование энтальпий образования газообразного этилена и брома, принятых в данной работе, приводит к значению $\Delta H_{298}^\circ(g) = -9,3 \text{ ккал/моль}$. Результаты многих попыток измерения энтальпии сгорания [709, 1180, 1383, 1385] значительно отличаются от данных, приведенных выше, что отражает несовершенство старых методов измерения энтальпии сгорания соединений брома.

№ 762. 1-Бромпропан, $\text{C}_3\text{H}_7\text{Br}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 123,002

Грин и Холден [540] рассчитали термодинамические функции на основании литературных данных и приемлемых оценок для молекулярных параметров. Их результаты приняты в настоящей работе.

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _f
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	20,66	79,08	79,08	0,00	-21,00	-5,37	3,934
300	20,73	79,21	79,09	0,04	-21,04	-5,27	3,840
400	25,70	85,87	79,96	2,37	-26,00	0,94	-0,515
500	30,02	92,08	81,77	5,16	-27,05	7,80	-3,416
600	33,66	97,89	83,98	8,35	-27,89	14,85	-5,409
700	33,76	103,31	86,36	11,88	-28,54	22,03	-6,878
800	39,41	108,40	88,80	15,69	-29,02	29,28	-7,999
900	41,74	113,18	91,24	19,75	-29,36	36,60	-8,887
1000	43,70	117,68	93,67	24,02	-29,56	43,94	-9,604

Бьеллерап [137] измерял энтальпию сгорания и вычислил $\Delta H_{f_{298}}^{\circ}(l) = -29,73$ ккал/моль и $\Delta H_{f_{298}}^{\circ}(g) = -21,98$ ккал/моль. Бьеллерап рассчитал также значение $\Delta H_{f_{298}}^{\circ}(g) = -21,77$ ккал/моль по энтальпии реакции между циклопропаном и бромистым водородом, установленной Лейчером, Кианпуром и Парком [829], а также значение $\Delta H_{f_{298}}^{\circ}(g) = -21,15$ ккал/моль по энтальпии реакции между 1-бромпропаном и водородом на основании неопубликованных данных, сообщенных Лейчером. Более ранние данные по энтальпии реакции циклопропана с бромистым водородом, полученные Лейчером, Уолденом, Ли и Парком [834], приводят в величине $\Delta H_{f_{298}}^{\circ}(g) = -18,6$ ккал/моль. Девис, Лейчер и Парк [308] на основании энтальпии реакции 1-бромпропана с водородом рассчитали значение $\Delta H_{f_{298}}^{\circ}(g) = -19,91$ ккал/моль. Рожнов и Андреевский [1259], а также Броуер и Уайтбот [173] измеряли константы равновесия изомеризации до 2-бромпропана. В сочетании со значениями энтропии и энтальпии образования 2-бромпропана, принятыми в данной работе, их результаты приводят к значениям $\Delta H_{f_{298}}^{\circ}(g)$, равным соответственно $-20,2$ и $-20,5$ ккал/моль. Принято среднее взвешенное значение $\Delta H_{f_{298}}^{\circ}(g) = -21,0$ ккал/моль.

Согласно измерениям Тиммерманса [1499], $T_m = 163,1^{\circ}$ K и $\Delta H_m = 1,56$ ккал/моль. Хи [1501] приводит несколько хорошо согласующихся определений точки кипения $T_b = 344,15^{\circ}$ K. По данным Метюса и Феландта [941] $\Delta H_v = 7,14$ ккал/моль при точке кипения.

№ 763. 2-Бромпропан, C₃H₇Br (состояние идеального газа).
Мол. вес 123,002

Термодинамические функции рассчитаны на основании отнесений колебаний по Шеппарду [1344], средних длин связи, рекомендован

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	21,27	75,53	75,53	0,00	-23,20	-6,51	4,771
300	21,31	75,67	75,54	0,04	-23,23	-6,41	4,667
400	26,34	82,50	76,43	2,43	-28,14	0,15	-0,083
500	30,76	88,87	78,29	5,29	-29,12	7,34	-3,209
600	34,42	94,81	80,55	8,56	-29,88	14,71	-5,356
700	37,49	100,35	82,99	12,16	-30,45	22,19	-6,927
800	40,09	105,53	85,49	16,04	-30,87	29,73	-8,122
900	42,32	110,38	87,99	20,16	-31,15	37,33	-9,064
1000	44,26	114,95	90,46	24,49	-31,29	44,95	-9,824

ных Саттоном [1449], и оценочного значения барьера внутреннего вращения $4,0$ ккал/моль. Низшая частота скелетного колебания, не отнесенная Шеппардом, принята равной 280 см⁻¹. Швендеман и Тобиасон [1297] методом микроволновой спектроскопии получили результаты, которые дают моменты инерции, лишь немного отличающиеся от принятых здесь.

Рассчитанные функции использованы в сочетании с константами равновесия для реакции пропилена с бромистым водородом, опубликованными Рожновым и Андреевским [1258], и получено значение $\Delta H_{f_{298}}^{\circ}(g) = -23,2$ ккал/моль.

Бьеллерап [137] измерял энтальпию сгорания и рассчитал значения $\Delta H_{f_{298}}^{\circ}(l) = -30,85$ ккал/моль и $\Delta H_{f_{298}}^{\circ}(g) = -23,55$ ккал/моль. По результатам измерения энтальпии реакции с водородом, приводящей к образованию пропана и бромистого водорода, Девис, Лейчер и Парк [308] рассчитали $\Delta H_{f_{298}}^{\circ}(g) = -22,7$ ккал/моль. Более ранние работы по определению энтальпии реакции присоединения бромистого водорода к пропилену, выполненные Лейчером, Уолденом, Ли и Парком [834], а также Лейчером, Кианпуром и Парком [829], приводят к несколько более отрицательным энтальпиям образования, что, возможно, объясняется образованием полимера. Принято значение, основанное на данных по равновесиям, которое близко к среднему калориметрическому результату.

Тиммерманс [1501] приводит три хорошо согласующиеся ссылки на точку кипения $T_b = 332,6^{\circ}$ K, однако две ссылки на точку плавления значительно различаются — T_m $184,2$ и $183,2^{\circ}$ K. По данным измерений Метюса и Феландта [941] $\Delta H_v = 6,79$ ккал/моль при точке кипения.

№ 764. 1,2-Дибромпропан, $C_3H_5Br_2$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 201,910

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	24,57	89,90	89,90	0,00	-17,40	-4,22	3,094
300	24,82	90,06	89,91	0,05	-17,44	-4,14	3,017
400	29,74	97,88	90,94	2,78	-25,77	1,96	-1,070
500	34,13	105,01	93,05	5,98	-26,50	8,98	-3,924
600	37,63	111,55	95,60	9,58	-27,03	16,12	-5,872
700	40,53	117,58	98,31	13,49	-27,39	23,35	-7,289
800	42,91	123,15	101,07	17,66	-27,61	30,61	-8,361
900	44,92	128,32	103,82	22,06	-27,70	37,89	-9,201
1000	46,74	133,15	106,51	26,64	-27,69	45,19	-9,876

Конн, Кистяковский и Смит [259] изучали реакцию между пропиленом и бромом, приводящую к образованию 1,2-дибромпропана, и установили, что при 355° K $\Delta H_f = -29,41$ ккал/моль. После приведения к 298° K этот результат в сочетании с величиной $\Delta C_p = 5,9$ кал/(моль·°K) и энтальпиями образования газообразного пропилена и брома, принятыми в данной работе, позволил получить значение $\Delta H_f^\circ_{298}(g) = -17,4$ ккал/моль. Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XII.3. Тиммерманс [1501] и Сталл [1432] получили данные, хорошо согласующиеся при $T_m = 328,6^\circ$ K, однако их данные по точке кипения расходятся в пределах 413,7 — 414,8° K. Курбатов [814] опубликовал результаты измерения теплоемкости жидкого 1,2-дибромпропана, однако его данные, по-видимому, не отличаются точностью.

№ 765. 1-Бромбутан, C_4H_9Br (состояние идеального газа).

Мол. вес 137,028

Грин и Холден [540] рассчитали термодинамические функции путем прибавления инкрементов к полученным ими значениям для 1-бромпропана. Здесь приняты результаты этих исследователей. Они рассчитали также $\Delta H_f^\circ_{298}(g) = -25,65$ ккал/моль (по энтальпии сгорания, определенной Бьеллерапом [138]) и $\Delta H_v^\circ_{298} = 8,82$ ккал/моль (из данных по давлению пара). Тиммерманс [1499, 1500] определил $T_m = 160,8^\circ$ K и $\Delta H_m = 1,6$ ккал/моль. Опубликованные Тиммермансом [1501] результаты определения точки кипения хорошо согласуются при 374,7° K. Меткос и Феландт [941] указывают значение $\Delta H_v = 7,78$ ккал/моль при точке кипения. Дис [318] измерял теплоемкость в температурном интервале 93—298° K. Его результа-

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	26,13	88,39	88,39	0,00	-25,65	-3,08	2,259
300	26,23	88,56	88,40	0,05	-25,69	-2,94	2,144
400	32,64	97,00	89,50	3,00	-30,97	5,65	-3,086
500	38,27	104,90	91,80	6,56	-32,28	14,96	-6,539
600	43,00	112,31	94,61	10,63	-33,32	24,50	-8,925
700	47,04	119,25	97,64	15,13	-34,11	34,21	-10,681
800	50,48	125,76	100,75	20,01	-34,69	44,01	-12,021
900	53,49	131,88	103,87	25,21	-35,09	53,87	-13,082
1000	56,03	137,66	106,97	30,69	-35,31	63,78	-13,938

ты для интервала 250—290° K удовлетворяют уравнению $C_p(l) = 23,0 + 0,046 T$ [кал/(моль·°K)]. Согласно определениям Диса, $T_m = 160,4^\circ$ K и $\Delta H_m = 2,21$ ккал/моль; эти значения полностью согласуются с соответствующими величинами Тиммерманса [1499, 1500].

№ 766. 2-Бромбутан, C_4H_9Br (состояние идеального газа).

Мол. вес 137,028

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	26,48	88,50	88,50	0,00	-28,70	-6,16	4,518
300	26,58	88,67	88,51	0,05	-28,74	-6,03	4,390
400	33,09	97,22	89,63	3,04	-33,98	2,55	-1,393
500	38,92	105,25	91,96	6,65	-35,23	11,83	-5,171
600	43,76	112,79	94,81	10,79	-36,20	21,34	-7,771
700	47,86	119,85	97,89	15,38	-36,91	30,99	-9,675
800	51,31	126,47	101,05	20,34	-37,41	40,72	-11,123
900	54,29	132,69	104,22	25,62	-37,73	50,51	-12,265
1000	56,93	138,55	107,37	31,19	-37,86	60,33	-13,184

Бьеллерап [137] измерял энтальпию сгорания и рассчитал значение $\Delta H_f^\circ_{298}(l) = -37,12$ ккал/моль. На основании данных по давлению пара он вычислил также $\Delta H_v^\circ_{298} = 8,45$ ккал/моль и $\Delta H_f^\circ_{298}(g) = -28,66$ ккал/моль. Проанализировав результаты Лейчера, Биллингса, Кампона, Ли и Парка [822] по энтальпии присоединения бромистого водорода к бутену-1, бутену-2 (цис) и бутену-2 (транс),

Бьеллерап рассчитал $\Delta H_{298}^{\circ}(g)$ и получил соответственно значения $-28,75$, $-28,76$ и $-28,61$ ккал/моль, причем все эти величины блестяще согласуются с данными по энтальпиям сгорания. Принято среднее значение $-28,70$ ккал/моль. Термодинамические функции оценены с использованием констант, приведенных в табл. XII.3. Тиммерманс [1501] указывает значение $T_m = 161,2^{\circ}\text{K}$ на основании трех хорошо согласующихся источников и значение $T_b = 364,4^{\circ}\text{K}$ на основании двух прекрасно согласующихся источников.

№ 767. 2-Бром-2-метилпропан, $\text{C}_4\text{H}_9\text{Br}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 137,028

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	27,85	79,34	79,34	0,00	-32,00	-6,73	4,935
300	27,98	79,52	79,35	0,06	-32,04	-6,58	4,792
400	34,93	88,54	80,53	3,21	-37,12	2,89	-1,578
500	40,84	96,99	82,99	7,01	-38,18	13,02	-5,690
600	45,58	104,87	85,99	11,34	-38,95	23,33	-8,497
700	49,43	112,20	89,21	16,09	-39,50	33,76	-10,540
800	52,65	119,01	92,52	21,20	-39,85	44,24	-12,086
900	55,39	125,38	95,82	26,61	-40,04	54,77	-13,300
1000	57,74	131,34	99,08	32,27	-40,09	65,32	-14,275

Отнесение частот колебаний произведено Тобином [1509], два момента инерции определены микроволновым методом Уильямсом и Горди [1615], а данные по дифракции электронов получены Боуеном, Джилкристом и Саттоном [152]. Все эти данные, а также оценочная величина барьера внутреннего вращения 4400 ккал/моль использованы для расчета термодинамических функций. Принятые в этой книге функции для изобутена и бромистого водорода использованы в сочетании с константами равновесия реакции отщепления бромистого водорода, опубликованными Хоулеттом [621], а также Кистяковским и Стауффером [763], для расчета величины $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -32,0$ ккал/моль.

Данные Брайса-Смита и Хоулетта [179] согласуются с результатами Тиммерманса и Делкурта [1504] при $T_m = 257,0^{\circ}\text{K}$ и $T_b = 346,2^{\circ}\text{K}$. Согласно Кушнеру, Кроуву и Смицу [817], $\Delta H_m = 0,47$ ккал/моль; при 208,7 и 231,6° K наблюдаются переходы в твердом состоянии, причем энтальпии этих переходов соответственно равны 1,35 и 0,25 ккал/моль. В работе Кушнера и др. содержатся также данные по теплоемкостям в интервале температур от 120 до 265° K. Теплоемкость жидкости при 257–265° K составляет 36 ккал/(моль·°K).

№ 768. 1,2-Дибромбутан, $\text{C}_4\text{H}_8\text{Br}_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 215,936

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	30,38	97,70	97,70	0,00	-23,70	-3,14	2,299
300	30,45	97,89	97,71	0,06	-23,74	-3,01	2,193
400	36,77	107,54	98,98	3,43	-32,38	5,62	-3,069
500	42,25	116,35	101,58	7,39	-33,37	15,23	-6,659
600	46,70	124,46	104,73	11,84	-34,12	25,03	-9,115
700	50,40	131,94	108,09	16,70	-34,65	34,93	-10,906
800	53,60	138,89	111,51	21,91	-35,01	44,89	-12,263
900	56,20	145,35	114,92	27,40	-35,20	54,90	-13,330
1000	58,50	151,40	118,27	33,14	-35,26	64,92	-14,187

Бьеллерап [137] измерял энтальпию сгорания и рассчитал значение $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -35,23$ ккал/моль. Используя величину $\Delta H_{298}^{\circ} = 10,80$ ккал/моль, полученную на основании данных по давлению пара, он рассчитал $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -24,43$ ккал/моль. По энтальпии бромирования бутена-1 при 355° K (Конн, Кистяковский и Смит [259]) и энтальпии бромирования бутена-1 в четыреххлористом углеороде при 300° K (Листер [878]) Бьеллерап установил также значения $\Delta H_{298}^{\circ}(g)$, равные соответственно $-22,24$ и $-21,46$ ккал/моль. Учитывая, что результаты, полученные методом сгорания для других соединений, изучавшихся Бьеллерапом, хорошо согласуются с данными по энтальпиям реакций, в данном случае отдано предпочтение величине, полученной на основании данных по сгоранию, и принято значение $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -23,7$ ккал/моль. Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XII.3. Согласно Сталлу [1432], $T_m = 208,7^{\circ}\text{K}$ и $T_b = 439,5^{\circ}\text{K}$.

№ 769. 2,3-Дибромбутан, $\text{C}_4\text{H}_8\text{Br}_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 215,936

Конн, Кистяковский и Смит [259] измеряли энтальпию присоединения брома к обоим изомерам бутена-2 при 355° K. Продукт присоединения к *цис*-форме бутена-2 дает полностью компенсированную мезоформу 2,3-дибромбутана, тогда как присоединение к *транс*-форме рацемическую (или *dl*) смесь. Термодинамические функции мезоформы и *dl*-продукта одинаковы, они оценены с использованием констант, приведенных в табл. XII.3. Энтальпии присоединения брома, приведенные к 298° K, дают значения $\Delta H_{298}^{\circ}(g)$, равные $-24,5$ ккал/моль для *dl*-продукта и $-24,3$ ккал/моль для мезо-формы.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	29,77	94,40	94,40	0,00	-24,40	-2,85	2,091
300	29,84	94,59	94,41	0,06	-24,45	-2,72	1,981
400	36,60	104,12	95,66	3,39	-33,12	6,24	-3,411
500	42,30	112,92	98,24	7,35	-34,12	16,20	-7,083
600	46,90	121,06	101,38	11,81	-34,85	26,34	-9,593
700	50,70	128,58	104,73	16,70	-35,36	36,58	-11,421
800	53,90	135,56	108,16	21,93	-35,68	46,87	-12,805
900	56,50	142,07	111,57	27,46	-35,85	57,21	-13,892
1000	58,70	148,14	114,92	33,22	-35,88	67,56	-14,785

Указанные величины совпадают в пределах ошибки эксперимента; использовано среднее значение $-24,4$ ккал/моль. Согласно Сталлу [1432], для dl-смеси $T_b = 433,7^\circ\text{K}$, а для мезо-формы $T_m = 238,7^\circ\text{K}$ и $T_b = 430,5^\circ\text{K}$.

№ 770. 2,3-Дибром-2-метилбутан, $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{Br}_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 229,962

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	35,51	98,60	98,60	0,00	-33,20	-3,19	2,340
300	35,62	98,82	98,61	0,07	-33,25	-3,01	2,192
400	44,10	110,26	100,11	4,07	-42,20	8,84	-4,829
500	51,50	120,92	103,22	8,86	-43,38	21,74	-9,503
600	57,40	130,85	107,00	14,31	-44,20	34,84	-12,691
700	62,10	140,06	111,08	20,30	-44,74	48,07	-15,007
800	65,90	148,61	115,24	26,70	-45,06	61,34	-16,756
900	69,10	156,56	119,40	33,45	-45,19	74,66	-18,128
1000	71,90	163,99	123,49	40,51	-45,15	87,98	-19,227

По данным измерений Конна, Кистяковского и Смита [259] энтальпия присоединения брома к 2-метилбутену-2 при 355°K составляет $-30,39$ ккал/моль. Приведение к 298°K и стандартному состоянию жидкого брома дает $\Delta Hf_{298}^\circ(g) = -33,2$ ккал/моль. Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XII.3. Согласно Дрейсбаху [353], $T_m = 288^\circ\text{K}$ и $T_b = 444^\circ\text{K}$.

№ 771. 1-Бромпентан, $\text{C}_5\text{H}_{11}\text{Br}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 151,054

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	31,60	97,70	97,70	0,00	-30,87	-1,37	1,001
300	31,73	97,90	97,71	0,06	-30,92	-1,19	0,863
400	39,58	108,13	99,05	3,64	-36,52	9,79	-5,347
500	46,52	117,72	101,83	7,95	-38,08	21,55	-9,418
600	52,34	126,73	105,24	12,90	-39,31	33,59	-12,234
700	57,32	135,18	108,92	18,39	-40,25	45,82	-14,306
800	61,55	143,12	112,70	24,34	-40,93	58,16	-15,887
900	65,24	150,59	116,50	30,68	-41,38	70,58	-17,138
1000	68,36	157,63	120,27	37,37	-41,62	83,04	-18,148

Грин и Холден [540] рассчитали термодинамические функции путем прибавления инкрементов к соответствующим значениям для 1-бромпропана. Они рассчитали также значение $\Delta Hf_{298}^\circ(g) = -30,87$ ккал/моль на основании энтальпии образования жидкости $\Delta Hf_{298}^\circ(l) = -40,72$ ккал/моль по данным Бьеллера [138] и значения $\Delta Hv_{298}^\circ = 9,85$ ккал/моль, вычисленного с использованием данных по давлению пара. По данным измерений Кушнера, Кроува и Смита [817], $T_m = 185,2^\circ\text{K}$ и $\Delta Hm = 2,74$ ккал/моль; эти же исследователи определили теплоемкости в температурном интервале $22-207^\circ\text{K}$. В работе Дуса [318] приведены значения $T_m = 185,1^\circ\text{K}$, $\Delta Hm = 3,44$ ккал/моль, а также данные по теплоемкости в температурном интервале $96-290^\circ\text{K}$.

Сведения о теплоемкости, опубликованные в этих двух источниках, плохо согласуются; среднее значение $40,5 \pm 1,5$ кал/(моль·°K) соответствует опубликованным в различных источниках данным для жидкого 1-бромпентана. Плохо согласующиеся значения ΔHm могут указывать на полиморфизм этого вещества в твердом состоянии и на медленные скорости перехода между фазами. Согласно Дрейсбаху [353], $T_b = 402,73^\circ\text{K}$ и при этой температуре $\Delta Hv = 8,24$ ккал/моль.

№ 772. Бромэтилен, $\text{C}_2\text{H}_3\text{Br}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 106,960

Галликсон и Нилсен [546] изучали спектр, произвели отнесения основных частот колебаний и рассчитали термодинамические свойства с использованием структурных постоянных Хьюджилла, Куна и Саттона [659]. Их результаты, распространенные здесь на область

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	13,26	65,83	65,83	0,00	18,73	19,30	-14,144
300	13,31	65,92	65,84	0,03	18,71	19,30	-14,059
400	15,91	70,11	66,39	1,49	14,52	20,33	-11,109
500	18,07	73,90	67,52	3,20	14,10	21,84	-9,544
600	19,83	77,36	68,88	5,09	13,74	23,42	-8,529
700	21,28	80,53	70,32	7,15	13,46	25,05	-7,822
800	22,50	83,45	71,78	9,34	13,22	26,72	-7,300
900	23,55	86,16	73,23	11,65	13,03	28,42	-6,902
1000	24,46	88,69	74,65	14,05	12,90	30,15	-6,588

до 1000° K, лишь немного отличаются от более ранних расчетов Ричардса [1224], основанных на отнесениях, выполненных Томпсоном и Торкингтоном [1494], и тех же структурных постоянных. Лейчер, Квантур, Монтомери, Кнедлер и Парк [826] измеряли энтальпию гидрирования бромвинила до этана и бромистого водорода при 401° K. Приведение к 298° K и расчет с использованием энтальпии образования этана и бромистого водорода дают $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = 18,73$ ккал/моль. В работах Гуйера, Шюте и Вейденманна [555] и Мела [989] приводятся данные по давлению пара, недостаточно хорошо согласующиеся; для установления энтальпий испарения необходимо провести дополнительные исследования. Согласно Дрейсбаху [352], $T_m = 133,61^{\circ}$ K, что довольно плохо согласуется с результатами Тиммерманса [1501], по данным которого $T_m = 135,35^{\circ}$ K и $T_b = 288,95^{\circ}$ K. Таким образом, физические свойства этого соединения достоверно не установлены. По сообщению Мела [988] $C_p(l) = 26,15$ кал/(моль·°K) при 288° K.

№ 773. 3-Бромпропен-1, C₃H₅Br (состояние идеального газа).
Мол. вес 120,986

Джеллнер и Скиннер [466] измеряли энтальпию гидролиза и рассчитали значение $\Delta Hf_{298}^{\circ}(l) = 4,1$ ккал/моль. Энтальпия испарения при 298° K принята равной 7,8 ккал/моль, что приводит к величине $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = 11,9$ ккал/моль. Работы по изучению бомбардировки электронами, выполненные Лоссипгом, Инголдом и Хендерсоном [887], позволяют получить данные по энтальпиям образования аллил-иодида и аллилбромиды. Значение Джеллнера и Скинера [466] для аллилиодида приводит к величине $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = 10,6$ ккал/моль для аллилбромиды. Томсен [1495] указывает значение энтальпии

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	18,56	75,80	75,80	0,00	11,80	19,11	-14,004
300	18,61	75,92	75,81	0,04	11,77	19,15	-13,950
400	22,69	81,85	76,59	2,11	7,25	22,50	-12,292
500	26,14	87,29	78,19	4,56	6,55	26,39	-11,536
600	29,01	92,32	80,13	7,32	5,98	30,41	-11,078
700	31,38	96,97	82,21	10,34	5,54	34,53	-10,779
800	33,40	101,30	84,33	13,58	5,19	38,69	-10,568
900	35,12	105,33	86,44	17,01	4,92	42,89	-10,416
1000	36,63	109,11	88,52	20,60	4,75	47,13	-10,299

сгорания, на основании которой получается величина $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = 12,9$ ккал/моль. Принято среднее значение 11,8 ккал/моль. Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XII.3, и бутена-1 в качестве исходного углеводорода. Боуен, Джиллкрест и Саттон [152] определили структурные постоянные методом дифракции электронов.

Ароматические бромпроизводные. Таблицы
для состояния идеального газа

№ 774. Бромбензол, C₆H₅Br (состояние идеального газа).
Мол. вес 157,016

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	23,35	77,53	77,53	0,00	25,10	33,11	-24,267
300	23,49	77,68	77,54	0,05	25,07	33,16	-24,152
400	30,44	85,42	78,54	2,75	20,44	36,76	-20,084
500	36,30	92,86	80,67	6,10	19,69	40,93	-17,890
600	40,99	99,91	83,29	9,97	19,10	45,23	-16,474
700	44,74	106,52	86,14	14,27	18,65	49,63	-15,494
800	47,78	112,69	89,08	18,90	18,31	54,07	-14,771
900	50,30	118,47	92,03	23,80	18,06	58,56	-14,219
1000	52,40	123,88	94,95	28,94	17,93	63,07	-13,783

Термодинамические функции рассчитаны с использованием моментов инерции, установленных по методу микроволновой спектроскопии Розенталем и Дейли [1237] и с учетом отнесений частот колебаний по Уиффену [1603]. Сталл [1431] измерял теплоемкость при низких температурах в интервале 90—320° К и дал оценки величин теплоемкости в температурном интервале от 0 до 90° К, необходимые для расчета энтропии на основании третьего закона термодинамики. Согласно результатам Метюса [940], значение $\Delta H\nu$ при 429° К равно 9,05 ккал/моль, что в сочетании с величиной ΔC_p испарения, равной —12 ккал/(моль·°К), позволяет рассчитать $\Delta H\nu_{298}^\circ = 10,62$ ккал/моль. Если использовать данные, приводимые Сталлом [1432], для оценки давления пара при 25° С, то расчетное значение энтропии идеального газа составит 75,2 ккал/(моль·°К). Эта величина более, чем на 2 ккал/(моль·°К) ниже значения, установленного спектроскопическим методом.

Учитывая, что эта величина, полученная на основании третьего закона термодинамики с использованием экстраполяции, не может считаться надежной, принят результат, рассчитанный на основании спектроскопических данных.

В работах Смита и Саннера [1385] и Смита и Бьеллерапа [1383] приведены значения энтальпии сгорания. Детали экспериментальных работ не приводятся, поэтому в значительной мере неопределены вычисленные величины $\Delta H_{298}^\circ(l) = 14,8$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^\circ(l) = 15,7$ ккал/моль соответственно. Черник, Скиннер и Вадсо [225] несколько изменили результаты Хартли, Притчарда и Скинера [576] для энтальпии реакции между дифенилртутью и бромом, протекающей с образованием бромида ртути и бромбензола. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] отобрали для бромида ртути значение $\Delta H_{298}^\circ(s) = -40,5$ ккал/моль. Для дифенилртути имеются три следующие значения. Согласно Чернику, Сипперу и Вадсо [225], на основании реакции хлористого водорода и хлорида ртути это значение равно 65,4 ккал/моль, по Фейрбразеру и Скинеру [404], изучавшим энтальпию сгорания, оно равно 66,9 ккал/моль, Карсон и др. [194] также на основании энтальпии сгорания получили величину 71,3 ккал/моль. Эти данные позволяют получить для бромбензола значения $\Delta H_{298}^\circ(l)$, соответственно равные 13,7, 14,4 и 16,7 ккал/моль. Принято среднее взвешенное значение 14,5 ккал/моль. Ранее установленная энтальпия испарения приводит к значению $\Delta H_{298}^\circ(g) = 25,1$ ккал/моль.

Согласно Сталлу [1431], $T_m = 242,43^\circ$ К и $\Delta H_m = 2,54$ ккал/моль. Теплоемкость жидкости в интервале температур от 270 до 320° К, указанная в работе Сталла [1431], описывается уравнением $C_p = 30,1 + 0,024T$ [кал/(моль·°К)]. В работе Тиммерманса [1501] приведены результаты определения точки кипения, которые хорошо согласуются при 429,3° К.

Алифатические подпроизводные. Таблицы для состояния идеального газа

№ 775. Иодметан, CH_3I (состояние идеального газа).
Мол. вес 141,944

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	10,55	60,71	60,71	0,00	3,34	3,74	-2,742
300	10,58	60,78	60,72	0,02	3,32	3,74	-2,727
400	12,36	64,07	61,15	1,17	0,60	4,07	-2,226
500	13,95	67,01	62,03	2,49	-5,21	5,51	-2,407
600	15,31	69,67	63,09	3,96	-5,62	7,69	-2,801
700	16,48	72,12	64,21	5,55	-5,96	9,94	-3,103
800	17,51	74,39	65,34	7,25	-6,23	12,23	-3,340
900	18,40	76,51	66,46	9,04	-6,44	14,55	-3,532
1000	19,20	78,49	67,57	10,92	-6,59	16,89	-3,691

Результаты двух недавно опубликованных работ по определению констант равновесия реакции между метаном и иодом с образованием иодметана и иодистого водорода очень хорошо согласуются между собой. Согласно расчетам Гоя и Притчарда [521], $\Delta H_{298}^\circ(g) = 3,40$ ккал/моль, а по данным Голдена, Уолша и Бенсона [505] $\Delta H_{298}^\circ(g) = 3,28$ ккал/моль. Карсон, Картер и Педли [195] в результате тщательной работы по изучению энтальпии реакции между гидридом лития и иодметаном, а также между гидридом лития и иодом установили, что $\Delta H_{298}^\circ(l) = -2,9$ ккал/моль. Ли и Россини [863] проанализировали данные по давлению пара и рассчитали $T_b = 315,5^\circ$ К и константы для уравнения Антуана. Если принять $T_c = 528^\circ$ К, согласно Кобе и Линну [780], и оценочное значение $P_c = 65$ атм, то по уравнению Хаггенмахера [560] получается значение $H\nu_{298}^\circ = 6,63$ ккал/моль. На основании этого результата рассчитана величина $\Delta H_{298}^\circ(g) = 3,7$ ккал/моль. Котрелл [276] сделал исчерпывающий обзор всех предшествующих работ по калориметрии иодметана и отобрал значение $\Delta H_{298}^\circ(l) = -2,6$ ккал/моль. В сочетании с принятым в настоящее время значением $\Delta H\nu_{298}^\circ$ это дает $\Delta H_{298}^\circ(g) = 4,0$ ккал/моль. Согласно Россини, Вагману, Эвансу, Левину и Джаффе [1249], $\Delta H_{298}^\circ(g) = 4,9$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^\circ(l) = -2,0$ ккал/моль, причем эти значения основаны на данных, полученных более пятидесяти лет назад. Здесь приняты значения для констант равновесия, которые приводят к величине $\Delta H_{298}^\circ(g) = 3,34$ ккал/моль. Результаты калориметрических исследований согласуются в пределах ошибки эксперимента.

Джеллес и Питцер [465] рассчитали термодинамические функции на основании отнесений колебаний по Питцеру и Джеллесу [1159]. Использованный ими общий момент инерции кажется ошибочным, поэтому их значения энтропии исправлены в соответствии с моментами инерции, полученными микроволновым методом в работе Миллера, Аамодта, Доусманиса, Тоунса и Крейтчмана [1008]. Данные Харрисона и Мелвин-Хьюза [572] по теплоемкости жидкости удовлетворяют уравнению $C_p(l) = 12,35 + 0,025T$ [кал/(моль·°К)], 270—310° К. Курбатов [814] также измерял теплоемкость подметана в жидком состоянии, однако его результаты, очевидно, слишком завышены. Результаты измерения энтальпии испарения, полученные Колосовским и Алимовым [799], по-видимому, завышены на несколько процентов. Тиммерманс [1501] отобрал $T_m = 315,65^\circ \text{К}$.

№ 776. Динодметан, $\text{C}_2\text{H}_2\text{I}_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 267,846

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	13,83	73,88	73,88	0,00	28,20	24,16	-17,709
300	13,86	73,97	73,89	0,03	28,18	24,13	-17,581
400	15,76	78,23	74,45	1,52	23,56	23,04	-12,588
500	17,25	81,91	75,58	3,17	12,67	23,95	-10,469
600	18,38	85,16	76,91	4,95	12,48	26,23	-9,553
700	19,30	88,06	78,30	6,84	12,34	28,53	-8,908
800	20,08	90,69	79,69	8,81	12,24	30,85	-8,426
900	20,73	93,10	81,05	10,85	12,18	33,18	-8,057
1000	21,30	95,31	82,37	12,95	12,16	35,52	-7,762

Бертло [122] измерял энтальпию сгорания; его результаты, приведенные Карашем [744], позволили рассчитать значение $\Delta H_f^\circ(l) = 16,0$ ккал/моль. Дрейсбах [353] вычислил $\Delta H_v^\circ = 12,2$ ккал/моль, что дает $\Delta H_f^\circ(g) = 28,2$ ккал/моль. Джеллес и Питцер [465] вычислили термодинамические функции, приведенные здесь. Значения энтропий, рассчитанные Волдом, Клевелем, Мейстером и Бернштейном [1540], завышены приблизительно на 3 кал/(моль·°К). Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] указывают точки плавления двух кристаллических форм 279,3 и 278,76° К, при которых энтальпии плавления составляют соответственно 2,88 и 3,02 ккал/моль. Дрейсбах [353] отобрал $T_b = 455^\circ \text{К}$. Приведенные в работе Курбатова [814] данные по теплоемкости жидкого динодметана, по-видимому, слишком завышены.

№ 777. Триодметан, CH_3 (состояние идеального газа).
Мол. вес 393,748

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	17,91	85,00	85,00	0,00	50,40	42,53	-31,174
300	17,94	85,12	85,01	0,04	50,39	42,48	-30,946
400	19,57	90,51	85,73	1,92	43,91	40,16	-21,939
500	20,71	95,01	87,15	3,93	27,98	40,73	-17,803
600	21,52	98,86	88,79	6,05	28,02	43,28	-15,763
700	22,13	102,22	90,47	8,23	28,08	45,82	-14,304
800	22,61	105,21	92,13	10,47	28,15	48,35	-13,207
900	23,01	107,90	93,74	12,75	28,24	50,86	-12,351
1000	23,34	110,34	95,28	15,07	28,33	53,37	-11,664

Бертло [122] измерял энтальпию сгорания; его результаты, приведенные Карашем [744], позволили рассчитать значение $\Delta H_f^\circ(s) = 33,7$ ккал/моль. По данным Джонса [697] $\Delta H_s^\circ = 16,7$ ккал/моль; эта величина, основанная на результатах измерения давления пара, приводит к $\Delta H_f^\circ(g) = 50,4$ ккал/моль. В работе Плайлера и Бенедикта [1172] приведены данные об инфракрасном спектре, а в работе Штаммерейха и Форнериса [1405] — данные по спектру комбинационного рассеяния. Свердлин [1452] рассчитал термодинамические функции и его результаты удовлетворительно согласуются с приведенными здесь данными, рассчитанными на основании спектра комбинационного рассеяния и оценочного значения расстояния C — I, принятого равным 2,1 А. Согласно Россини, Вагману, Эвансу, Левину и Джаффе [1249], $T_m = 398^\circ \text{К}$ и $\Delta H_m = 3,9$ ккал/моль.

№ 778. Иодэтан, $\text{C}_2\text{H}_5\text{I}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 155,970

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	15,76	70,82	70,82	0,00	-2,00	5,10	-3,737
300	15,82	70,92	70,83	0,03	-2,02	5,14	-3,745
400	19,18	75,94	71,49	1,79	-5,08	7,77	-4,248
500	22,13	80,55	72,85	3,86	-11,16	11,59	-5,064
600	24,64	84,81	74,49	6,20	-11,77	16,19	-5,898
700	26,80	88,78	76,25	8,77	-12,25	20,90	-6,523
800	28,65	92,48	78,05	11,55	-12,61	25,65	-7,007
900	30,25	95,95	79,85	14,49	-12,87	30,45	-7,395
1000	31,65	99,21	81,62	17,59	-13,03	35,28	-7,710

Отнесения основных частот этилгалогенидов выполнено Шеппардом [1341]. По мнению Грина и Холдена [540], отнесение частот хлорэтана и бромэтана следует пересмотреть, в соответствии с этим частота для иодэтана, согласно Шеппарду, 985 см^{-1} , оценена как 1245 см^{-1} . Касуя и Ока [724] вычислили момент инерции по микроволновым данным, а Касуя [723] установил барьер внутреннего вращения по расщеплению полос, равный 3220 ккал/моль . Термодинамические функции рассчитаны с использованием указанных значений.

На основании результатов измерения энтальпии сгорания Спрингалл и Уайт [1402] вычислили $\Delta H_{298}^{\circ} (l) = -8,4 \text{ ккал/моль}$. Карсон, Хартли и Скиннер [196] измеряли энтальпию реакции диэтилцинка с водой и с иодом и установили, что $\Delta H_{298}^{\circ} (l) = -9,1 \text{ ккал/моль}$. Найденная ими из данных по реакции гидролиза энтальпия образования диэтилцинка хорошо соответствует результатам измерения энтальпии сгорания, полученным Лонгом и Норришем [882]. Хартли, Притчард и Скиннер [576] определяли энтальпию реакции диэтилртути с иодом и иодидом ртути. Карсон, Карсон и Уиллмарст [194] использовали данные Хартли и др. в сочетании с результатами собственных измерений энтальпии сгорания диэтилртути и рассчитали $\Delta H_{298}^{\circ} (l) = -10,13 \text{ ккал/моль}$. По данным измерений Метюса [940] $\Delta H_{\nu} = 7,115 \text{ ккал/моль}$ при 345° K , а по данным Колосовского и Алимова [799] $\Delta H_{\nu} = 7,66 \text{ ккал/моль}$ при 303° K . Приведение этих результатов к 298° K с учетом оценочного значения $-12 \text{ ккал/(моль} \cdot \text{K)}$ для ΔC_p испарения позволяет получить хорошо согласующиеся значение $\Delta H_{298}^{\circ} = 7,7 \text{ ккал/моль}$. Бенсон и Боз [106] измеряли константу равновесия пиролиза этилиодида до этилена и иодистого водорода при 630° K и на основании полученных данных рассчитали $\Delta H_{298}^{\circ} (g) = -3,0 \text{ ккал/моль}$. Принято среднее значение $\Delta H_{298}^{\circ} (g) = -2,0 \text{ ккал/моль}$. Россини, Вагман, Эванс, Левин и Джаффе [1249] приводят значение $\Delta H_{298}^{\circ} (l) = -7,4 \text{ ккал/моль}$, основанное на старых ненадежных данных по измерению энтальпии сгорания.

Согласно Тиммермансу [1501], $T_m = 162,3^{\circ} \text{ K}$. Ли и Россини [863] сделали обзор данных по давлению пара и отобрали значение $T_b = 345,5^{\circ} \text{ K}$. Теплоемкость жидкости измерял Курбатов [814], однако его данные, по-видимому, не отличаются точностью.

№ 779. 1,2-Диодэтан, $\text{C}_2\text{H}_4\text{I}_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 281,872

Бенсон и Аmano [105] определяли равновесный состав системы этилен — иод — диодэтан и использовали полученные данные в сочетании с результатами более ранних измерений Абрамса и Девиса [1], а также Катбертсона и Кистяковского [301] для расчета значений $\Delta H_{298}^{\circ} (g) = 15,9 \text{ ккал/моль}$ и $S_{298}^{\circ} (g) = 83,3 \text{ ккал/(моль} \cdot \text{K)}$. Более старые данные Муни и Ладлама [1022] не согласуются с этими результатами.

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	19,67	83,30	83,30	0,00	15,90	18,76	-43,753
300	19,72	83,43	83,31	0,04	15,88	18,78	-43,680
400	22,94	89,55	84,12	2,18	10,96	20,05	-40,953
500	25,70	94,98	85,76	4,61	-0,16	23,39	-40,223
600	27,92	99,86	87,71	7,30	-0,53	28,13	-40,247
700	29,79	104,34	89,77	10,19	-0,79	32,93	-40,282
800	31,37	108,40	91,84	13,25	-0,96	37,76	-40,316
900	32,70	112,17	93,90	16,45	-1,06	42,61	-40,347
1000	33,84	115,68	95,90	19,78	-1,08	47,47	-40,374

Оценка величин теплоемкости сделана с использованием констант, приведенных в табл. XII.4. Согласно Дрейсбаху [353], $T_m = 354^{\circ} \text{ K}$ и $T_b = 473^{\circ} \text{ K}$.

По данным измерения энтальпии сгорания Берто [122] вычислил $\Delta H_{298}^{\circ} (s) = -0,1 \text{ ккал/моль}$. Абрамс и Девис [1] на основании данных по давлению пара, опубликованных Муни и Ладламом [1022], рассчитали $\Delta H_{298}^{\circ} (g) = 15,7 \text{ ккал/моль}$. Расчетное значение $\Delta H_{298}^{\circ} (g) = 15,6 \text{ ккал/моль}$ хорошо согласуется с вышеуказанным равновесным значением.

№ 780. 1-Иодпропан, $\text{C}_3\text{H}_7\text{I}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 169,996

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	24,48	80,32	80,32	0,00	-7,30	6,68	-4,894
300	21,56	80,46	80,33	0,04	-7,33	6,76	-4,926
400	26,27	87,32	81,23	2,44	-10,69	11,75	-6,421
500	30,52	93,65	83,09	5,29	-17,01	17,99	-7,862
600	34,11	99,54	85,34	8,52	-17,80	25,06	-9,128
700	37,17	105,03	87,77	12,09	-18,41	32,26	-10,072
800	39,80	110,17	90,25	15,94	-18,86	39,53	-10,797
900	42,07	114,99	92,73	20,04	-19,17	46,85	-11,376
1000	44,03	119,53	95,19	24,34	-19,34	54,20	-11,845

Мортимер, Притчард и Скиннер [1030] измеряли энтальпии реакции дидроцилртути с бромом и с иодом. Полученные данные связаны

с энтальпиями образования 1-бромпропана, 1-йодпропана, бромида ртути и йодида ртути. Для 1-йодпропана получено значение $\Delta H_f^{\circ}_{298}(l) = -16,3$ ккал/моль, которое основано на использовании энтальпий образования бромида и йодида ртути, приведенных в работе Россини, Вагмана, Эванса, Левина и Джаффе [1249], и энтальпии образования 1-бромпропана, принятой в этой главе. Дрейсбах [353] отобрал значение $\Delta H_v^{\circ}_{298} = 8,6$ ккал/моль, которое дает $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -7,7$ ккал/моль. Андреевский и Рожнов [22] измеряли равновесие между 1-йодпропаном и 2-йодпропаном. Их результаты в сочетании с отобранным здесь значением энтальпии образования 2-йодпропана приводит для 1-йодпропана к величине $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -6,9$ ккал/моль. Принято среднее значение, равное $-7,3$ ккал/моль.

Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XII.4. Тиммерманс [1501] указывает T_b 375,6° К на основании четырех хорошо согласующихся результатов определения точки кипения, однако его данные относительно точки плавления T_m 175,5° К расходятся со значением Дрейсбаха [353], равным 171,9° К.

№ 781. 2-Иодпропан, C_3H_7I (состояние идеального газа).

Мол. вес 169,996

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H^{\circ}_{298})/T$	$H^{\circ}-H^{\circ}_{298}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	21,53	77,55	77,55	0,00	-10,00	4,80	-3,521
300	21,61	77,69	77,56	0,04	-10,03	4,89	-3,565
400	26,59	84,60	78,46	2,46	-13,37	10,16	-5,550
500	30,96	91,02	80,34	5,34	-19,65	16,66	-7,282
600	34,58	96,99	82,62	8,63	-20,40	23,99	-8,739
700	37,62	102,56	85,08	12,24	-20,96	31,44	-9,816
800	40,21	107,75	87,59	16,13	-21,37	38,95	-10,641
900	42,42	112,62	90,11	20,27	-21,64	46,51	-11,294
1000	44,34	117,19	92,59	24,61	-21,78	54,10	-11,823

Термодинамические функции рассчитаны с использованием отнесенных колебаний по Шеппарду [1344], средних длин связей, рекомендованных Саттоном [1449], и оценочного значения барьера внутреннего вращения 4,0 ккал/моль. Самой нижней основной частоте, не указанной Шеппардом, по оценке было приписано 250 см⁻¹. Эти функции в сочетании с константами равновесия реакции диссоциации до пропилена и йодистого водорода при 511,7° К, приводимыми в работе Бозе и Бенсона [149], дают $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -10,5$ ккал/моль. Мортимер, Притчард и Скиннер [1030] измеряли энтальпию реакции

диизопропилртути с бромом и йодом. Если использовать энтальпии образования бромида ртути и йодида ртути, отобранные Россини, Вагманом, Эвансом, Левиним и Джаффе [1249], и энтальпию образования 2-бромпропана, принятую в этой главе, то получается величина $\Delta H_f^{\circ}_{298}(l) = -18,1$ ккал/моль. Мортимер и др. на основании опубликованных данных по давлению пара рассчитали $\Delta H_v^{\circ}_{298} = 8,7$ ккал/моль, а это дает $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -9,4$ ккал/моль. Принято среднее значение $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -10,0$ ккал/моль.

Согласно Тиммермансу [1501], $T_b = 362,6^{\circ}$ К и $T_m = 183,2^{\circ}$ К.

№ 782. 1,2-Диодпропан, $C_3H_6I_2$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 295,898

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H^{\circ}_{298})/T$	$H^{\circ}-H^{\circ}_{298}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	24,77	94,60	94,60	0,00	8,60	17,81	-13,051
300	24,86	94,76	94,61	0,05	8,57	17,86	-13,011
400	29,83	102,61	95,64	2,79	3,32	21,31	-11,644
500	34,07	109,74	97,76	5,99	-8,06	26,91	-11,763
600	37,51	116,26	100,31	9,58	-8,60	33,96	-12,368
700	40,43	122,27	103,02	13,48	-8,98	41,09	-12,827
800	42,85	127,83	105,78	17,64	-9,21	48,25	-13,181
900	44,92	133,00	108,52	22,04	-9,32	55,44	-13,463
1000	46,74	137,83	111,21	26,62	-9,30	62,64	-13,690

Бенсон и Аmano [105] измеряли равновесные составы системы пропилен — йод — 1,2-диодпропан и рассчитали $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -8,6$ ккал/моль и $S^{\circ}_{298}(g) = 94,6$ ккал/(моль °K). Теплоемкости при температурах, превышающих 298° К, оценены с использованием констант, приведенных в табл. XII.4.

№ 783. 2-Иод-2-метилпропан, C_4H_9I (состояние идеального газа).

Мол. вес 184,022

Термодинамические функции рассчитаны на основании отнесенных колебаний по Тобину [1509], структурных параметров по Уильямсу и Горди [1615], а также по Боуэну, Джилкристу и Саттону [152] и оценочной величине барьера внутреннего вращения 4,4 ккал/моль. Джонс и Огг [700] опубликовали данные по равновесию реакции дегидрогалогенирования до изобутена и йодистого водорода. Используя функции энергии Гиббса, принятые в данной книге, мы рассчитали среднюю энтальпию реакции при 298° К, равную 19,74 ккал/моль.

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p °	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	28,27	81,79	81,79	0,00	-17,60	5,65	-4,142
300	28,40	81,97	81,80	0,06	-17,63	5,79	-4,220
400	35,27	91,11	82,99	3,25	-21,14	13,92	-7,606
500	41,12	99,63	85,48	7,08	-27,49	23,32	-10,191
600	45,82	107,55	88,51	11,43	-28,24	33,55	-12,219
700	49,61	114,91	91,76	16,21	-28,77	43,89	-13,701
800	52,85	121,75	95,08	21,34	-29,11	54,29	-14,831
900	55,58	128,13	98,41	26,76	-29,28	64,74	-15,719
1000	57,91	134,12	101,68	32,44	-29,31	75,19	-16,432

В сочетании с энтальпиями образования иодистого водорода и изобутена это значение позволяет получить $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -17,6$ ккал/моль для 2-иод-2-метилпропана.

Милаццо [999] измерял давление пара твердого и жидкого 2-иод-2-метилпропана и установил, что $\Delta H_m = 3,47$ ккал/моль при температуре плавления, $T_b = 235,0^{\circ}\text{K}$.

**№ 784. 1,2-Диодбутан, C₄H₈I₂ (состояние идеального газа).
Мол. вес 309,924**

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p °	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	30,58	101,80	101,80	0,00	2,85	19,62	-14,381
300	30,69	101,99	101,81	0,06	2,81	19,72	-14,367
400	36,81	111,68	103,08	3,44	-2,74	25,76	-14,074
500	42,19	120,49	105,70	7,40	-14,37	34,02	-14,868
600	46,60	128,58	108,85	11,85	-15,14	43,77	-15,941
700	50,30	136,05	112,21	16,70	-15,69	53,63	-16,744
800	53,50	142,98	115,62	21,89	-16,06	63,56	-17,362
900	56,20	149,44	119,03	27,38	-16,26	73,53	-17,854
1000	58,50	155,49	122,37	33,12	-16,32	83,51	-18,251

Клайн и Кистяковский [236] измеряли равновесные составы системы бутен-1 — иод — диодбутан и рассчитали $\Delta H_f^{\circ} = -12,0$ ккал/моль, откуда следует $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 2,85$ ккал/моль. Термодинамические функции идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XII.4.

**№ 785. 3-Иодпропен-1, C₃H₃I (состояние идеального газа).
Мол. вес 167,980**

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p °	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	19,75	76,46	76,46	0,00	22,90	28,72	-21,053
300	19,84	76,59	76,47	0,04	22,88	28,76	-20,949
400	23,89	82,87	77,29	2,23	20,01	30,93	-16,900
500	27,25	88,57	78,99	4,80	14,11	34,24	-14,965
600	30,00	93,79	81,03	7,66	13,64	38,31	-13,953
700	32,20	98,58	83,20	10,77	13,28	42,45	-13,253
800	34,20	103,02	85,40	14,10	13,01	46,63	-12,739
900	35,80	107,14	87,59	17,60	12,82	50,85	-12,348
1000	37,20	110,98	89,74	21,25	12,71	55,09	-12,039

Джеллнер и Скиннер [466] измеряли энтальпию гидролиза 2-иодпропена-1 и рассчитали $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = 14,0$ ккал/моль. Согласно Дрейсбаху [353], $T_m = 173,85^{\circ}\text{K}$, $T_b = 375^{\circ}\text{K}$ и $\Delta H_{298}^{\circ} = 8,9$ ккал/моль, что дает $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = 22,9$ ккал/моль. Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены с использованием констант, приведенных в табл. XII.4, при этом в качестве исходного углеводорода брали бутен-1. Боуен, Джилкрист и Саттон [152] определяли структуру методом дифракции электронов. Лишь исторический интерес имеют данные по энтальпии сгорания, полученные Бергло и цитируемые Карашем [744], которые, вероятно, завышены на несколько килокалорий.

**Ароматические иодпроизводные. Таблица
для состояния идеального газа**

**№ 786. Иодбензол, C₆H₅I (состояние идеального газа).
Мол. вес 204,010**

Хартли, Притчард и Скиннер [576] измеряли энтальпию реакции между дифенилртутью и иодом с образованием иодида ртути и иодбензола. Полученные этими исследователями значения были немного изменены Черником, Скиннером и Вадсо [225], которые измеряли также энтальпию реакции дифенилртути с хлористым водородом. Использование этих данных и величин энтальпий образования хлорной ртути и иодной ртути (-53,5 и -25,2 ккал/моль соответственно) дает для иодбензола $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = 26,7$ ккал/моль. Смит [1382] на основании данных Карлссона [719] вновь рассчитал энтальпию сгорания и получил $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = 28,0$ ккал/моль. Грехэм, Ничол и Убеллоде [522] измеряли энтальпию реакции фенилмагнийбромида

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	G _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH ^o	ΔG ^o	
298	24,08	79,84	79,84	0,00	38,85	44,88	-32,898
300	24,22	79,99	79,85	0,05	38,83	44,92	-32,721
400	31,10	87,93	80,88	2,83	35,80	47,19	-25,784
500	36,86	95,51	83,06	6,23	29,79	50,63	-22,130
600	41,43	102,65	85,73	10,16	29,25	54,85	-19,976
700	45,08	109,32	88,63	14,49	28,83	59,15	-18,468
800	48,07	115,54	91,61	19,15	28,52	63,50	-17,347
900	50,55	121,35	94,60	24,08	28,30	67,89	-16,485
1000	52,60	126,78	97,55	29,24	28,18	72,30	-15,800

с иодистым водородом и иодом и получили значение $\Delta H_{298}^{\circ}(I) = 21,9$ ккал/моль для иодбензола. Принято среднее взвешенное значение 27,0 ккал/моль.

Сталл [1431] измерял теплоемкость в интервале температур от 90 до 290° K и, кроме того, получил следующие данные: $T_m = 241,83^{\circ}$ K и $\Delta H_m = 2,33$ ккал/моль. Согласно Дрейсбаху [351], $\Delta H_{298}^{\circ} = 11,85$ ккал/моль и $\Delta H_v = 9,44$ ккал/моль при $T_b = 461,48^{\circ}$ K. Уиффен [1603] произвел отнесения частот колебаний и рассчитал термодинамические функции для состояния идеального газа. Энтропия, полученная на основании данных по низкотемпературным свойствам, недостаточно хорошо согласуется со значением, рассчитанным Уиффеном. Учитывая, что экстраполяции от 90 до 0° K вносит значительную неопределенность, принято указанное выше рассчитанное значение.

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА СЕРУСОДЕРЖАЩИХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Введение

Хотя о термодинамическом изучении некоторых простейших тиоспиртов (меркаптанов, алкантиолов) и тиоэфиров (диалкилсульфидов, тиоалканов) сообщалось еще в 1886 г. Томсеном [1495], химической термодинамикой серусодержащих органических соединений в основном пренебрегали вплоть до самого недавнего времени. Когда Паркс и Хаффман писали свою монографию [1105], термодинамические данные были получены только для двух таких соединений [сероуглерода и сероокиси углерода (карбонилсульфида)]. В 1949 г. Барроу и Питчер [78] смогли найти для своего обзора компиляционные данные только по семи соединениям. Благодаря использованию теоретических расчетов им удалось составить сравнительно полные сводки для трех тиоспиртов, двух тиоэфиров, одного сульфона и одного сульфоксида. Однако эти расчеты основывались на неадекватных данных, которые, за редким исключением, отличались низкой точностью. К настоящему времени главным образом благодаря усилиям ученых двух лабораторий — Нефтяного исследовательского центра в Бартлесвиле (США) и Термодинамической лаборатории Лундского университета (Швеция) — точные значения энергии Гиббса измерены более чем для 20 серусодержащих органических соединений. Текущая программа изучения серусодержащих органических соединений в Бартлесвилской лаборатории предусматривает детальные исследования более 60 индивидуальных соединений серы, каждое из которых является «ключевым» членом одного или нескольких гомологических рядов. Информация, полученная при изучении этих индивидуальных соединений, позволит точно и полно рассчитать таблицы термодинамических свойств примерно для 2000 других соединений серы. Расчеты такого типа быстро и экономно выполняются автоматическими счетными машинами. Что касается имеющихся в настоящее время данных по сероокиси углерода, то они лишь немного лучше допущавшейся Парксом и Хаффманом оценки в 2 ккал/моль, а это во всяком случае показывает полноту наших знаний в соответствующей области. Теперь на прочной основе находятся наши знания о таких важных классах соединений, как тиоэфиры и тиоспирты; данные для этих соединений отличаются высокой точностью.

Малый объем химико-термодинамической информации о соединениях серы, полученной до последнего десятилетия, обусловлен

несколькими причинами. Прежде всего тем, что термодинамики, изучавшие органические соединения, вполне естественно обращали основное внимание на углеводороды, поскольку этот класс соединений имеет гораздо большее экономическое значение, чем соединения серы. Большой и все возрастающий объем доступных термодинамических данных по углеводородам продолжал накапливаться, в то время как многие другие классы органических соединений изучались явно недостаточно. Физико-химики не занимались соединениями серы еще и потому, что, как правило, некоторые свойства этих соединений весьма неприятны. Наконец, изучение соединений серы связано с решением трудных проблем (некоторые из них обсуждаются ниже), а без этого нельзя ожидать серьезных успехов. Обстановка в настоящее время быстро изменяется, и быстрота накопления термодинамических данных для органических соединений серы превышает темпы роста исследований любого сравнительно большого класса веществ. Помимо уже упомянутых выше лабораторий, лаборатория Бельфастского университета в последнее время получила много термодинамических данных по соединениям серы благодаря усилиям Хенри Мейкла и его сотрудников.

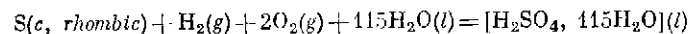
Теплоты сгорания соединений серы были определены такими известными термохимиками, как Бертло, Андрэ и Матиньон [123], Рот и Рист-Шумахер [1254], а также Хаффман и Эллис [646, 647], однако по причинам, обсуждаемым Уаддингтоном, Саннером и Хаббардом [1551], полученные результаты оказались не столь точными, какими они должны были бы быть при применении тщательно разработанного метода калориметрии сгорания. Таким образом, значения, указанные в компиляционной работе Караша [744], не являются вполне достоверными. Впервые методом сжигания данные со средней степенью точности были получены Хаффманом и Эллисом [646], применявшими обычную стальную бомбу, в которую не вводилась вода. Воздух не удалялся из бомбы, поскольку азот был необходим как катализатор окисления серы до серной кислоты. Образующаяся концентрированная серная кислота создавала туман в калориметрической бомбе, при этом предполагалось, что ее концентрация была одинаковой по всему объему бомбы. Можно показать, что результаты, полученные по этому методу Хаффмана и Эллиса, достаточно точны, если сравнить значения для тиофена, измеренные этим методом, с соответствующими величинами, полученными более точным методом вращающейся калориметрической бомбы. Работы с тиофеном по методу Хаффмана и Эллиса были выполнены также Уаддингтоном, Ноултоном, Скоттом, Оливером, Тоддом, Хаббардом, Смитом и Хаффманом [1548], Муром, Ренквистом и Парксом [1025] и Франклином и Лампкином [440]. Все результаты согласуются в пределах $0,5 \text{ ккал/моль}$ с принятым здесь значением.

Ввиду неравномерного распределения серной кислоты в объеме бомбы метод Хаффмана и Эллиса приводит к менее достоверным

результатам, нежели метод вращающейся калориметрической бомбы, при котором в бомбу вводится сравнительно большое количество воды, а благодаря вращению обеспечивается однородность и определенный состав конечных продуктов. Работы по совершенствованию метода вращающейся бомбы проводились Саннером в Лундском университете и Уаддингтоном с сотрудниками в Бартлесвилльской лаборатории Горного бюро США. Дальнейшее улучшение результатов может быть достигнуто благодаря применения принципа сравнительных измерений, когда теплота сгорания смеси предельного углеводорода и ромбической серы в соответствующих концентрациях сравнивается с теплотой сгорания того соединения, для которого хотят установить теплоту образования. Подробное описание бомбовой калориметрии соединений серы и методов внесения поправок для приведения к стандартному состоянию дано в работах Хаббарда, Скотта и Уаддингтона [637] и Уаддингтона, Саннера и Хаббарда [1551]. В качестве стандартного вещества для калориметрии сгорания соединений серы был предложен тиантрен.

Для серы приняты следующие стандартные состояния, указанные в работе Сталла и Зинке [1437]: ромбическая твердая сера от 298 до $368,6^\circ \text{ K}$, моноклинная твердая сера от $368,6$ до 392° K , равновесная жидкость от 392 до $717,75^\circ \text{ K}$ и состояние идеального двухатомного газа от $717,75$ до 1000° K . Это последнее стандартное состояние приводит к небольшим совершенно явным отклонениям в табулированных значениях энергии Гиббса для соединений серы при 800° K ввиду того, что пары серы при этой температуре содержат не только двухатомные, но и более крупные молекулы; однако пока еще не получены точные данные, которые позволили бы определить состав паров серы при температурах несколько выше точки кипения. Несмотря на это, табулированные значения энергии Гиббса дают в основном правильные представления о стабильности того или иного соединения по сравнению с входящими в его состав элементами. Хотя использование двухатомного газа в качестве стандартного состояния является вполне правомерным во всем температурном интервале от 298 до 1000° K , все же это может привести к ошибочным представлениям об устойчивости того или иного соединения при низких температурах. Поэтому в случае необходимости переход от одного стандартного состояния к другому легко сделать с помощью таблиц Сталла и Зинке [1437].

При расчете энтальпии образования по опубликованным значениям теплот сгорания данные относились к среднему значению энтальпии образования водной серной кислоты согласно недавним определениям Нефтяного исследовательского центра в Бартлесвиле [509] и Термохимической лаборатории в Луиде [926]. Их значения ΔH_{298}° для реакции



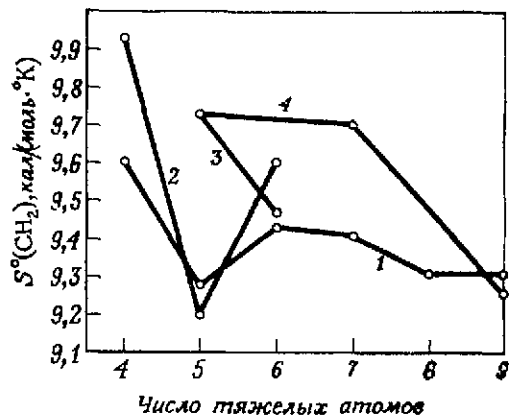
соответственно равны $-212,17$ и $-212,24$ ккал/моль, а среднее значение составляет $-212,20$ ккал/моль. Теплота образования $S_2(g)$

$$2S(c, \text{rhombic}) = S_2(g),$$

равная $\Delta H_{298,18}^\circ = 30,84 \pm 0,15$ ккал/моль и принятая Эвансом и Вагманом [399], использовалась и в настоящей работе.

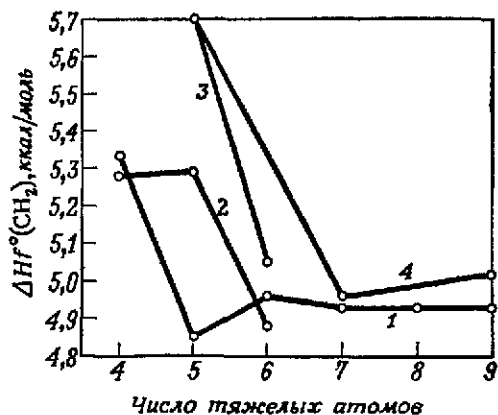
Д-р Шилчер любезно предоставил его расчетные данные по органическим соединениям серы (для целей сравнения) до их опубликования.

Соединения серы служат хорошим примером экстраполяции данных, относящихся к избранным «ключевым» членам отдельных клас-



Р и с. XIII.1. Метиленовые инкременты для расчета энтропии низших нормальных тиаалканов и нормальных алканов [952].

1 — n-алкан; 2 — 2-тиаалкан; 3 — 3-тиаалкан; 4 — симм-тиаалкан



Р и с. XIII.2. Метиленовые инкременты для расчета энтальпии низших нормальных тиаалканов и нормальных алканов [952].

1 — n-алкан; 2 — 2-тиаалкан; 3 — 3-тиаалкан; 4 — симм-тиаалкан

сов соединений, обычно к первым нескольким членам соответствующих гомологических рядов. На основании этих данных для отдельных низших членов с помощью метода инкрементов термодинамические свойства экстраполируются на все члены соответствующих

гомологических рядов в пределах таких размеров молекул, которые представляют практический интерес. Метиленовые инкременты, относящиеся к энтропии и энтальпии, для низших нормальных тиаалканов (тиоэфиров) и нормальных алканов приведены на рис. XIII.1 и XIII.2 [952]. Высшие члены этих рядов экспериментально не изучены, а некоторые пока не известны. Тем не менее, можно ожидать, что работы в этой области в ближайшие годы будут быстро развиваться.

Замещение группы $-CH_2-$ в углеводородах на атом серы повышает энергию Гиббса приблизительно на 4 ккал/моль при образовании тиола и приблизительно на 6 ккал/моль при образовании сульфида. Эти два класса соединений являются таким образом термодинамически нестабильными в сравнении с серой и углеводородом. Сравнение энергий Гиббса для соединений серы и углеводородов приведено в табл. XIII.1.

Таблица XIII.1

Сравнение энергий Гиббса алканов и диалкилсульфидов (тиаалканов) при $298,15^\circ K$

Исходный углеводород а)	ΔG_{298}° , ккал/моль	Диалкилсульфид б)	ΔG_{298}° , ккал/моль	$[\Delta G_{298}^\circ]$, ккал/моль
Пропан	-5,61	Диметилсульфид	1,66	7,27
Бутан	-4,10	Этилметилсульфид	2,73	6,83
2-Метилбутан	-3,54	Изопропилметилсульфид	3,21	6,75
Пентан	-2,00	Метилпропилсульфид	4,40	6,40
Гексан	-0,06	Бутилметилсульфид	6,37	6,43
Пентан	-2,00	Диэтилсульфид	4,25	6,25
Гексан	-0,06	Этилпропилсульфид	5,63	5,69
Гептан	1,91	Бутилэтилсульфид	7,65	5,74
Бутан	-4,10	Диметилдисульфид	3,52	7,62
Гексан	-0,06	Диэтилдисульфид	5,32	5,38
Октан	3,92	Дипропилдисульфид	8,84	4,92
Декаан	7,94	Дибутилдисульфид	12,87	4,93

а) Данные из гл. IX.

б) Данные из гл. XII.

Табл. VI.2 и VI.3 также содержат интересные сравнительные данные, включающие ΔH_f° исходных углеводородов и соответствующих тиолов и диалкилсульфидов.

В заключение следует упомянуть и о других менее полных таблицах и исследованиях термических свойств органических соединений

серы; в качестве примера можно назвать работы Джирелли и Бурламакки [488] по меркаптанам и алифатическим сульфидам, исследования Чермина [222—224], измерения давления паров 36 соединений серы, содержащихся в нефти, выполненные Осборном и Доуслиным [1091], формулы Маслова [937] для расчета теплоемкостей и предложенное Ловрингом и Лейдлером [889] распространение системы молекулярной термохимии на соединения, содержащие серу и кислород.

Диэтилсульфиды (тиозифуры, монометиалканы).
Таблицы для состояния идеального газа

№ 800. Диметилсульфид, C_2H_6S (состояние идеального газа).
Мол. вес 62,134

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	17,71	68,32	68,32	0,00	-8,97	1,66	-1,220
300	17,77	68,43	68,33	0,04	-8,99	1,73	-1,259
400	21,12	74,01	69,06	1,98	-10,72	5,51	-3,010
500	24,24	79,07	70,57	4,26	-12,12	9,73	-4,254
600	27,04	83,74	72,38	6,82	-13,27	14,21	-5,177
700	29,44	88,08	74,31	9,65	-14,20	18,90	-5,899
800	31,59	92,16	76,29	12,70	-28,01	22,40	-6,120
900	33,50	95,99	78,27	15,96	-28,29	28,73	-6,976
1000	35,17	99,61	80,22	19,39	-28,46	35,08	-7,666

Осборн, Дошер и Йост [1092] измеряли низкотемпературные свойства и установили следующие значения: $T_m = 174,85^\circ K$, $\Delta H_m = 1,908$ ккал/моль, $S_{298}^\circ(l) = 46,94$ кал/(моль · °K) и $C_p(l, 270-290^\circ K) = 21,35 + 0,023T$ [кал/(моль · °K)]. Эти данные использованы Мак-Каллохом, Хаббардом, Фроу, Хоссенлоном и Уаддингтоном [958] в качестве дополнительной информации к результатам собственных измерений теплоемкости пара, давления пара, энтальпии испарения и энтальпии сгорания. Окончательные результаты включают $T_b = 350,33^\circ K$, $\Delta H_v = 6,454$ ккал/моль при температуре кипения, $\Delta H_{f_{298}}^\circ(l) = -15,63$ ккал/моль, $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -8,97$ ккал/моль с учетом поправки на полное значение $\Delta H_{f_{298}}^\circ$ для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639) и $S_{298}^\circ(g) = 68,32$ кал/(моль · °K). В работе Мак-Каллоха и др. [958] приводятся ссылки на предшествующие работы.

№ 801. Этилметилсульфид, C_3H_8S (состояние идеального газа).
Мол. вес 76,160

Низкотемпературные свойства, давление пара, теплоемкость пара и энтальпию испарения измеряли Скотт, Финке, Мак-Каллох, Гросс-

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	22,73	79,62	79,62	0,00	-14,25	2,73	-1,998
300	22,82	79,77	79,63	0,05	-14,28	2,83	-2,061
400	27,81	87,02	80,58	2,58	-16,36	8,80	-4,806
500	32,40	93,73	82,55	5,60	-18,04	15,28	-6,680
600	36,41	100,00	84,94	9,04	-19,38	22,08	-8,071
700	39,89	105,88	87,52	12,86	-20,44	29,10	-9,085
800	42,93	111,41	90,16	17,00	-34,33	34,96	-9,551
900	45,60	116,63	92,82	21,43	-34,64	43,65	-10,599
1000	47,94	121,55	95,44	26,11	-34,79	52,36	-11,443

Уильямсон, Уаддингтон и Хаффман [1308]. Ими получены следующие данные: $T_m = 167,22^\circ K$, $\Delta H_m = 2,333$ ккал/моль, $\Delta H_v = 7,055$ ккал/моль при $T_b = 339,80^\circ K$, $S_{298}^\circ(l) = 57,14$ кал/(моль · °K), $S_{298}^\circ(g) = 79,62$ кал/(моль · °K) и $C_p(l, 270-300^\circ K) = 23,8 + 0,036T$ [кал/(моль · °K)]. Спектроскопические данные использовались в сочетании с вышеуказанными результатами при расчете термодинамических функций для состояния идеального газа. Энтальпия сгорания, установленная Хаббардом и Уаддингтоном [638] и исправленная в соответствии с новым значением $\Delta H_{f_{298}}^\circ$ для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639), приводит к следующим величинам энтальпии образования: $\Delta H_{f_{298}}^\circ(l) = -21,89$ ккал/моль и $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -14,25$ ккал/моль.

№ 802. Диэтилсульфид, $C_4H_{10}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 90,186

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	27,97	87,96	87,96	0,00	-19,95	4,25	-3,416
300	28,09	88,14	87,97	0,06	-19,99	4,40	-3,204
400	34,65	97,13	89,15	3,20	-22,44	12,84	-7,017
500	40,75	105,53	91,59	6,97	-24,33	21,89	-9,566
600	46,11	113,44	94,58	11,32	-25,85	31,27	-11,391
700	50,81	120,91	97,81	16,17	-27,01	40,92	-12,775
800	54,91	127,97	101,15	21,46	-40,91	49,41	-13,497
900	58,56	134,65	104,50	27,14	-41,17	60,72	-14,745
1000	61,79	140,99	107,84	33,16	-41,20	72,06	-15,747

Термические данные для диэтилсульфида, использованные при расчете термодинамических функций для состояния идеального газа, были получены Скоттом, Финке, Хаббардом, Мак-Каллохом, Оливером, Гроссом, Катцем, Уильямсоном, Уаддингтоном и Хаффманом [1305]. Эти исследователи определили $T_m = 169,20^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 2,845 \text{ ккал/моль}$, $\Delta H_v = 7,591 \text{ ккал/моль}$ при $T_b = 365,25^\circ \text{K}$, $S_{298}^\circ(l) = 64,36 \text{ кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$, $S_{298}^\circ(g) = 87,96 \text{ кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$ и $C_p(l, 270-320^\circ \text{K}) = 26,7 + 0,048T \text{ [кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)]}$. Данные по равновесию изомеризации получены Скоттом, Гатри, Мак-Каллохом и Уаддингтоном [1313]. Хаббард, Гуд и Уаддингтон [631] измеряли энтальпию сгорания, используя метод вращающейся термохимической бомбы; по их данным, исправленным в соответствии с новым значением $\Delta H_{f_{298}}^\circ$ для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639), рассчитаны $\Delta H_{f_{298}}^\circ(l) = -28,52 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -19,95 \text{ ккал/моль}$.

№ 803. Изопропилметилсульфид, $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 90,186

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	28,00	85,87	85,87	0,00	-21,61	3,21	-2,556
300	28,12	86,05	85,88	0,06	-21,65	3,37	-2,452
400	34,69	95,05	87,06	3,20	-24,06	12,02	-3,567
500	40,72	103,45	89,51	6,98	-25,99	21,27	-9,296
600	46,01	111,35	92,50	11,32	-27,52	30,87	-41,242
700	50,65	118,80	95,73	16,16	-28,68	40,72	-42,713
800	54,95	125,85	99,06	21,44	-42,59	49,42	-43,501
900	58,82	132,55	102,41	27,13	-42,84	60,95	-44,739
1000	62,29	138,93	105,74	33,19	-42,83	72,49	-45,842

Термодинамические свойства изопропилметилсульфида установлены в результате calorиметрических исследований, выполненных Мак-Каллохом, Финке, Мессерли, Пеннингтоном, Хоссенлопом и Уаддингтоном [953]. Эти исследователи получили следующие данные: $T_m = 171,64^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 2,236 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 357,97^\circ \text{K}$ и при этой температуре $\Delta H_v = 7,338 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}^\circ(l) = 62,88 \text{ кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$, $S_{298}^\circ(g) = 85,87 \text{ кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$ и $C_p(l, 290-360^\circ \text{K}) = 24,80 + 0,055T \text{ [кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)]}$. На основании данных Хаббарда, Гуда и Уаддингтона [631] по calorиметрии сгорания, исправленных в соответствии с новым значением $\Delta H_{f_{298}}^\circ$ для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639), рассчитаны $\Delta H_{f_{298}}^\circ(l) = -29,79 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -21,61 \text{ ккал/моль}$.

№ 804. Метилпропилсульфид, $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 90,186

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	28,05	88,84	88,84	0,00	-19,54	4,40	-3,224
300	28,17	89,02	88,85	0,06	-19,58	4,54	-3,311
400	34,64	98,02	90,03	3,20	-21,99	12,90	-7,049
500	40,61	106,41	92,47	6,97	-23,93	21,85	-9,552
600	45,86	114,28	95,46	11,30	-25,47	31,16	-11,349
700	50,43	121,70	98,68	16,12	-26,65	40,72	-12,713
800	54,45	128,70	102,00	21,37	-40,60	49,13	-13,422
900	58,02	135,33	105,34	26,99	-40,91	60,38	-14,661
1000	61,14	141,61	108,66	32,96	-41,00	71,65	-15,657

Результаты всестороннего изучения термодинамических свойств опубликованы Скоттом, Финке, Мак-Каллохом, Мессерли, Пеннингтоном, Хоссенлопом и Уаддингтоном [1309]. Эти исследователи установили, что $T_m = 160,16^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 2,369 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 368,69^\circ \text{K}$ и при этой температуре $\Delta H_v = 7,667 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}^\circ(l) = 65,14 \text{ кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$, $S_{298}^\circ(g) = 88,84 \text{ кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$ и $C_p(l, 270-320^\circ \text{K}) = 27,35 + 0,046T \text{ [кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)]}$. На основании данных Хаббарда, Гуда и Уаддингтона [631], исправленных в соответствии с новым значением $\Delta H_{f_{298}}^\circ$ для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639), рассчитаны $\Delta H_{f_{298}}^\circ(l) = -28,21 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -19,54 \text{ ккал/моль}$. Результаты изучения равновесия изомеризации опубликованы Скоттом, Гатри, Мак-Каллохом и Уаддингтоном [1313]. Термодинамические функции рассчитаны по методу инкрементов с использованием экспериментальных данных, характеризующих теплоемкость пара, и данных для низших членов соответствующего ряда.

№ 805. Бутилметилсульфид, $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 104,212

Термодинамические свойства бутилметилсульфида определяли Мак-Каллох, Финке, Хаббард, Тодд, Мессерли, Доуслин и Уаддингтон [952], которые установили, что $T_m = 175,30^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 2,976 \text{ ккал/моль}$, $\Delta H_{v_{298}} = 9,730 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 396,57^\circ \text{K}$, $S_{298}^\circ(l) = 73,49 \text{ кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$, $S_{298}^\circ(g) = 98,43 \text{ кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$, $C_p(l, 190-360^\circ \text{K}) = 58,773 - 0,18710T + 6,914 \cdot 10^{-4}T^2 - 6,2000 \cdot 10^{-7}T^3 \text{ [кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)]}$; на основании данных этих исследований, исправленных в соответствии с новым значением $\Delta H_{f_{298}}^\circ$ для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639), рассчитаны $\Delta H_{f_{298}}^\circ(l) = -34,15 \text{ ккал/моль}$

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	33,64	98,43	98,43	0,00	-24,42	6,37	-4,676
300	33,79	98,64	98,44	0,07	-24,47	6,56	-4,778
400	41,73	109,46	99,86	3,85	-27,18	17,26	-9,432
500	49,12	119,59	102,80	8,40	-29,36	28,63	-12,516
600	55,68	129,13	106,40	13,64	-31,06	40,39	-14,713
700	61,43	138,16	110,30	19,51	-32,32	52,44	-16,371
800	66,53	146,70	114,32	25,91	-46,28	63,33	-17,301
900	71,09	154,80	118,37	32,79	-46,53	77,06	-18,712
1000	75,08	162,51	122,40	40,11	-46,49	90,80	-19,844

и $\Delta H_f^\circ(g) = -24,42$ ккал/моль. Термодинамические функции для газообразного состояния вычислены Скоттом и Мак-Каллохом [1316], которые использовали метод инкрементов, но при этом брали расчетные значения энтропии, а не теплоемкости, и приводили эмпирически в соответствии с вышеуказанной величиной энтропии. Мейкл и Мейрик [899] также определяли ΔH_c и $\Delta H_{v_{298}}$ ($9,9 \pm 0,3$ ккал/моль) и рассчитали $\Delta H_f^\circ(g) = -24,2 \pm 0,6$ ккал/моль. Мейкл и Мак-Клин [903] методом газ-жидкостной хроматографии определили $\Delta H_{v_{298}} = 9,8 \pm 0,2$ ккал/моль и обосновали согласие с четырьмя эмпирическими методами, а также с двойным эбулиометрическим методом, использовавшимся Мейклом и Мейриком [898].

№ 806. Этилпропилсульфид, C₅H₁₂S (состояние идеального газа).

Мол. вес 104,212

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	33,25	98,97	98,97	0,00	-25,00	5,63	-4,126
300	33,40	99,18	98,98	0,07	-25,05	5,82	-4,237
400	41,43	109,90	100,38	3,81	-27,80	16,47	-9,001
500	48,95	119,97	103,30	8,34	-29,99	27,80	-12,152
600	55,62	129,50	106,88	13,57	-31,71	39,53	-14,397
700	61,50	138,52	110,76	19,44	-32,97	51,53	-16,089
800	66,68	147,08	114,77	25,85	-46,92	62,39	-17,044
900	71,32	155,20	118,82	32,75	-47,15	76,08	-18,474
1000	75,42	162,94	122,85	40,09	-47,09	89,78	-19,621

Мак-Каллох, Финке, Хаббард, Тодд, Мессерли, Доуслин и Уаддингтон [952] определяли термические и термохимические константы для этого соединения и установили $T_m = 156,10^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = -2,529$ ккал/моль, $S_{298}^\circ(l) = 73,98$ кал/(моль·°K), $T_b = 391,65^\circ \text{K}$, $\Delta H_{v_{298}} = 9,580$ ккал/моль, $\Delta H_f^\circ(l) = -34,58$ ккал/моль, $\Delta H_f^\circ(g) = -25,00$ ккал/моль [после исправления в соответствии с новым значением $\Delta H_f^\circ(g)$ для H₂SO₄ (водн.) (см. стр. 639)] и $S_{298}^\circ(g) = 98,82$ кал/(моль·°K). В температурном интервале от 190 до 390° K $C_p(l) = 60,865 - 0,22365T + 8,4708 \cdot 10^{-4}T^2 - 8,3246 \times 10^{-7}T^3$ [кал/(моль·°K)]. Термодинамические функции для этого соединения рассчитаны по обычному методу инкрементов Скоттом и Мак-Каллохом [1316], при этом расчетные значения не подгонялись эмпирически. Для получения соответствующих метиленовых инкрементов были выбраны два соединения 1-пропантиол и этантиол вместо 2-тиаэнтана и 2-тиабутана с тем, чтобы использовать только соединения, для которых термодинамические функции были рассчитаны подробно разработанными статистическо-механическими методами.

№ 807. Бутилэтилсульфид, C₆H₁₄S (состояние идеального газа).

Мол. вес 118,238

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	38,71	108,27	108,27	0,00	-29,92	7,65	-5,606
300	38,89	108,52	108,28	0,08	-29,97	7,88	-5,739
400	48,37	121,02	109,92	4,45	-33,04	20,92	-11,427
500	57,19	132,78	113,32	9,73	-35,50	34,70	-15,165
600	64,96	143,91	117,50	15,85	-37,41	48,92	-17,817
700	71,77	154,44	122,03	22,69	-38,81	63,45	-19,810
800	77,74	164,42	126,71	30,17	-52,86	76,85	-20,994
900	83,06	173,89	131,43	38,22	-53,15	93,10	-22,606
1000	87,75	182,89	136,13	46,76	-53,10	109,36	-23,899

Мейкл и Мейрик [899] определяли ΔH_c и опубликовали следующие данные: $\Delta H_f^\circ(g) = -30,3 \pm 0,6$ ккал/моль и $\Delta H_{v_{298}} = 10,8 \pm 0,3$ ккал/моль. Мейкл и Мак-Клин [903] методом газ-жидкостной хроматографии получили $\Delta H_{v_{298}} = 10,6 \pm 0,2$ ккал/моль и сравнили полученные значения с другими определениями и оценками. Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к полученным ими значениям для этилпропилсульфида метиленового инкремента, рекомендованного Персоном и Пименте-ром [1140] для термодинамических функций, и инкремента, предложенного Прозеном, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии

образования. Их результат $\Delta H_f^{\circ}(g) = -29,92$ ккал/моль согласуется с указанным выше экспериментальным значением в пределах ошибки опыта; этот результат принят здесь. На основании первого цитированного выше значения ΔH_v° установлено, что $\Delta H_f^{\circ}(l) = -40,7$ ккал/моль.

№ 808. Диизопропилсульфид, $C_6H_{14}S$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 118,238

T, °K	кал/(моль · °K)			кал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	40,45	99,30	99,30	0,00	-33,76	6,48	-4,752
300	40,65	99,56	99,31	0,08	-33,84	6,73	-4,902
400	50,64	112,65	101,02	4,66	-36,67	20,63	-11,272
500	59,17	124,90	104,59	10,16	-38,91	35,23	-15,396
600	66,22	136,33	108,94	16,44	-40,65	50,22	-18,290
700	72,10	146,99	113,62	23,36	-41,98	65,50	-20,450
800	77,12	156,95	118,42	30,83	-43,04	79,65	-21,758
900	81,46	166,29	123,23	38,76	-44,45	96,65	-23,468
1000	85,24	175,07	127,97	47,10	-46,60	113,68	-24,813

Благодаря доступности точных результатов неопубликованных работ по определению энтропии и теплоемкости пара диизопропилсульфида при температурах приблизительно до 500° K и использованию результатов статистическо-термодинамических исследований конформационных энергий, согласно Скотту и Кроудеру [1298], удалось оценить термодинамические свойства этого соединения во всем температурном интервале, представляющем интерес. Отнесение колебаний было произведено на основании интерпретации молекулярного спектра для кристаллического, жидкого и газообразного состояний с учетом результатов расчета силовых постоянных. Было принято, что барьеры заторможенного внутреннего вращения изопропильной группы и метильных групп имеют характер вращения вокруг оси третьего порядка. Высоты барьеров были подобраны таким образом, чтобы согласовывались с наблюдаемыми значениями энтропии и теплоемкости; для метильной группы этот барьер принят равным 3,75 ккал/моль и для изопропильной 2,80 ккал/моль. Термодинамические функции для диизопропилсульфида рассчитаны без учета поправок на конформационное равновесие, ангармоничность и другие небольшие эффекты. Точность термодинамических функций для температур выше интервала, в котором производились калориметрические измерения, определяется тем, что суммарное влияние такого рода эффектов не учитывалось. Скотт и Кроудер [1298] использовали значения $S_{298}^{\circ}(g) = 99,30$ кал/(моль · °K) и $\Delta H_f^{\circ}(g) =$

$= -33,76$ ккал/моль, полученные после исправления в соответствии с новой величиной ΔH_f° для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). Расчет величины $\Delta H_f^{\circ}(g)$, основанный на тех же экспериментальных данных, приведен в работе Мак-Каллоха и Гуда [957]. Методом газожидкостной хроматографии Мейкл и Мак-Клин [903] получили оценку $\Delta H_v^{\circ} = 9,46 \pm 0,2$ ккал/моль.

№ 809. Метиламилсульфид, $C_6H_{14}S$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 118,238

T, °K	кал/(моль · °K)			кал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	39,10	107,73	107,73	0,00	-29,34	8,39	-6,149
300	39,28	107,98	107,74	0,08	-29,39	8,62	-6,279
400	48,67	120,58	109,39	4,48	-32,43	21,71	-11,859
500	57,36	132,39	112,82	9,79	-34,86	35,53	-15,529
600	65,02	143,54	117,02	15,92	-36,75	49,79	-18,133
700	71,70	154,08	121,57	22,76	-38,16	64,36	-20,092
800	77,59	164,04	126,26	30,23	-52,22	77,79	-21,251
900	82,83	173,49	130,99	38,26	-52,53	94,08	-22,844
1000	87,41	182,46	135,69	46,77	-52,51	110,38	-24,123

Мейкл и Мейрик [899] измеряли ΔH_c и установили $\Delta H_v^{\circ} = 10,8 \pm 0,3$ ккал/моль. По их сообщению $\Delta H_f^{\circ}(g) = -29,1 \pm 0,6$ ккал/моль. Значение ΔH_v° , установленное Мейклом и Мак-Клином [903] методом газожидкостной хроматографии и равное $1,0 \pm 0,2$ ккал/моль, согласуется в пределах суммарных ошибок опыта. Согласно Россини, Питцеру, Арнетту, Брауну и Пиментелу [248], $T_m = 179^{\circ} K$ и $T_b = 418^{\circ} K$. Термодинамические свойства рассчитаны Скоттом и Мак-Каллохом [1316] путем прибавления метилового инкремента, рекомендованного Персоном и Пиментелом [140] для термодинамических функций, и инкремента, предложенного Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для ΔH_f° , к соответствующим значениям для бутилметилсульфида. $\Delta H_f^{\circ}(g) = -29,34$ ккал/моль. Это значение принято и оно находится в пределах точности определения указанных выше экспериментальных величин. Использование данных Мейкла и Мейрика по определению ΔH_v° приводит к значению $\Delta H_f^{\circ}(l) = -40,14$ ккал/моль.

№ 810. Дипропилсульфид, $C_6H_{14}S$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 118,238

Мак-Каллох, Финке, Хаббард, Тодд, Мессерли, Доуслин и Уаддингтон [952] изучали низкотемпературные свойства и опубликовали

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	38,53	107,16	107,16	0,00	-29,96	7,94	-5,819
300	38,71	107,40	107,17	0,08	-30,01	8,17	-5,952
400	48,21	119,85	108,80	4,43	-33,10	21,32	-11,649
500	57,15	131,59	112,19	9,70	-35,56	35,22	-15,395
600	65,13	142,73	116,36	15,82	-37,47	49,56	-18,051
700	72,19	153,31	120,89	22,70	-38,85	64,21	-20,017
800	78,45	163,37	125,58	30,23	-52,84	77,72	-21,232
900	84,08	172,94	130,31	38,37	-53,04	94,07	-22,841
1000	89,05	182,06	135,03	47,03	-52,88	110,42	-24,131

данные по ΔH_v , давлению пара и ΔH_c . Согласно результатам этих исследователей, $T_m = 170,44^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 2,902 \text{ ккал/моль}$, $\Delta H_{v,298}^\circ = 10,66 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}^\circ(l) = 80,85 \text{ кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$, $S_{298}^\circ(g) = 107,16 \text{ кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$ и $C_p(l, 185-315^\circ \text{K}) = 69,861 - 0,26760T + 10,219 \cdot 10^{-4}T^2 - 10,208 \cdot 10^{-7}T^3 \text{ [кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)]}$. На основании измерений ΔH_c они определили $\Delta H_{f,298}^\circ(l) = -40,62 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{f,298}^\circ(g) = -29,96 \text{ ккал/моль}$ после исправления в соответствии с новым значением $\Delta H_{f,298}^\circ$ для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). Термодинамические функции рассчитаны Скоттом и Мак-Каллохом [1316] с использованием обычного метода инкрементов. Мейкл и Мак-Клиш [903] методом газо-жидкостной хроматографии получили $\Delta H_{v,298}^\circ = 10,7 \pm 0,2 \text{ ккал/моль}$ и эбулиометрическим методом $10,6$ и $10,7 \text{ ккал/моль}$.

№ 811. Бутилпропилсульфид, $\text{C}_7\text{H}_{16}\text{S}$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 132,264

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	43,99	117,90	117,90	0,00	-34,88	9,53	-6,984
300	44,20	118,18	117,91	0,09	-34,94	9,80	-7,137
400	55,15	132,41	119,77	5,06	-38,35	25,19	-13,761
500	65,39	145,84	123,65	11,10	-41,07	41,40	-18,093
600	74,47	158,58	128,42	18,10	-43,17	58,09	-21,157
700	82,46	170,67	133,60	25,95	-44,69	75,12	-23,453
800	89,51	182,15	138,96	34,56	-58,78	91,03	-24,867
900	95,82	193,06	144,37	43,83	-59,04	109,79	-26,659
1000	101,38	203,45	149,76	53,70	-58,89	128,56	-28,094

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления метиленового инкремента, предложенного Персоном и Пиментелом [1140], к значению функций для динпропилсульфида и прибавления соответствующего члена, определяющего симметрию, $R \ln 2$, к величине S° и $-(G^\circ - H_0^\circ)/T$. Значение $\Delta H_{f,298}^\circ(g) = -34,88 \text{ ккал/моль}$ было рассчитано аналогичным образом путем прибавления метиленового инкремента $-4,926 \text{ ккал/моль}$, предложенного Прозеном, Джонсоном и Россини [1196], к соответствующему значению для динпропилсульфида. По данным Брауна и Энгельберта [162] $T_b = 426,7^\circ \text{K}$.

№ 812. Этиламилсульфид, $\text{C}_7\text{H}_{16}\text{S}$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 132,264

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	44,18	117,58	117,58	0,00	-34,85	9,65	-7,076
300	44,39	117,86	117,59	0,09	-34,91	9,93	-7,231
400	55,31	132,14	119,46	5,08	-38,30	25,34	-13,846
500	65,44	145,60	123,35	11,13	-41,01	41,58	-18,172
600	74,30	158,33	128,13	18,12	-43,11	58,29	-21,232
700	82,05	170,38	133,31	25,95	-44,66	75,35	-23,525
800	88,81	181,78	138,67	34,50	-58,81	91,30	-24,939
900	94,81	192,60	144,06	43,69	-59,15	110,09	-26,733
1000	100,08	202,86	149,43	54,44	-59,12	128,91	-28,173

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления удвоенного метиленового инкремента к соответствующим значениям для этилпропилсульфида. Инкременты, рекомендованные Персоном и Пиментелом [1140], использовали для расчета термодинамических функций, а инкременты Прозена, Джонсона и Россини [1196] — для расчета энтальпии образования $\Delta H_{f,298}^\circ(g) = -34,85 \text{ ккал/моль}$.

№ 813. Гексилметилсульфид, $\text{C}_7\text{H}_{16}\text{S}$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 132,264

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления удвоенного метиленового инкремента к соответствующим значениям для бутилметилсульфида. Инкременты, предложенные Персоном и Пиментелом [1140], использовали для термодинамических функций, а инкременты, рекомендованные Прозеном, Джонсоном и Россини [1196] — для $\Delta H_{f,298}^\circ$. Принята $\Delta H_{f,298}^\circ(g) = -34,27 \text{ ккал/моль}$. По сообщению Россини, Питцера, Арнетта, Брауна и Пиментела [1248] $T_m = 206,6^\circ \text{K}$ и $T_b = 444^\circ \text{K}$.

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	44,57	117,04	117,04	0,00	-34,27	10,39	-7,619
300	44,78	117,32	117,05	0,09	-34,33	10,67	-7,771
400	55,61	131,71	118,93	5,11	-37,68	26,13	-14,278
500	65,61	145,21	122,85	11,19	-40,37	42,41	-18,535
600	74,36	157,97	127,65	18,19	-42,46	59,16	-21,548
700	81,98	170,01	132,85	26,02	-44,01	76,26	-23,808
800	88,66	181,40	138,21	34,56	-58,17	92,24	-25,197
900	94,58	192,20	143,62	43,72	-58,54	111,07	-26,971
1000	99,74	202,43	148,99	53,45	-58,53	129,94	-28,391

№ 814. Дибутилсульфид, C₈H₁₈S (состояние идеального газа).
Мол. вес 146,290

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	49,46	125,84	125,84	0,00	-39,99	11,76	-8,622
300	49,70	126,15	125,85	0,10	-40,06	12,08	-8,795
400	62,09	142,17	127,95	5,69	-43,78	29,98	-16,381
500	73,64	157,29	132,32	12,49	-46,76	48,78	-21,320
600	83,81	171,63	137,68	20,37	-49,05	68,10	-24,805
700	92,74	185,24	143,51	29,21	-50,72	87,80	-27,412
800	100,58	198,14	149,54	38,88	-64,91	106,39	-29,063
900	107,57	210,40	155,63	49,30	-65,22	127,84	-31,071
1000	113,71	222,06	161,69	60,37	-65,10	149,30	-32,628

Определение ΔH_c, выполненное Саннером [1443], приводит к значению ΔH_{f,298}^o(l), которое после исправления в соответствии с новой величиной ΔH_{f,298}^o для H₂SO₄(водн.) (см. стр. 639) позволило Саннеру [1447] получить значение энтальпии образования жидкого дибутилсульфида, равное -52,76 ± 0,45 ккал/моль. Низкотемпературные термические и термохимические данные получены Мак-Каллохом, Финке, Хаббардом, Тоддом, Мессерли, Доуслином и Уаддингтоном [952]. По их данным T_m = 198,13° K, ΔH_m = 4,643 ккал/моль, T_b = 462,06° K, ΔH_{v,298}^o = 12,75 ккал/моль, S₂₉₈^o(l) = 96,82 кал/(моль °K), S₂₉₈^o(g) = 125,84 кал/(моль °K), C_s(l, 205 - 355° K) = 85,483 - 0,30972T + 11,687 · 10⁻⁴T² - 10,974 · 10⁻⁷T³ [кал/(моль °K)]. ΔH_{f,298}^o(l) = -52,74 ккал/моль

ΔH_{f,298}^o(g) = -39,99 ккал/моль после исправления в соответствии с новым значением ΔH_{f,298}^o для H₂SO₄(водн.) (см. стр. 639). Термодинамические функции для этого соединения были рассчитаны путем прибавления удвоенного метиленового инкремента, предложенного Персоном и Пиментелом [1140], к значениям для дипропилсульфида; полученные величины согласуются с приведенными выше данными. Мейкл и Мак-Клиг [903] опубликовали значение ΔH_{v,298}^o = 13,0 ± 0,2 ккал/моль, полученное методом газо-жидкостной хроматографии, и значение 12,8 ккал/моль, полученное методом двойной эбуллиметрии.

№ 815. Этилгексилсульфид, C₈H₁₈S (состояние идеального газа).
Мол. вес 146,290

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	49,64	126,89	126,89	0,00	-39,77	11,67	-8,553
300	49,88	127,20	126,90	0,10	-39,84	11,98	-8,730
400	62,25	143,27	129,00	5,71	-43,54	29,78	-16,270
500	73,68	158,41	133,38	12,52	-46,51	48,46	-21,182
600	83,64	172,75	138,76	20,40	-48,81	67,68	-24,650
700	92,32	186,31	144,59	29,20	-50,51	87,27	-27,244
800	99,87	199,14	150,62	38,82	-64,75	105,75	-28,888
900	106,55	211,29	156,69	49,15	-65,15	127,10	-30,863
1000	112,41	222,83	162,73	60,10	-65,14	148,48	-32,449

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления утроенного метиленового инкремента к соответствующим значениям для этилпропилсульфида. Инкремент для термодинамических функций рекомендован Персоном и Пиментелом [1140], а для энтальпии образования — Прозеном, Джонсоном и Россини [1196]. Принята ΔH_{f,298}^o(g) = -39,77 ккал/моль.

№ 816. Гептилметилсульфид, C₈H₁₈S (состояние идеального газа).
Мол. вес 146,290

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления утроенного метиленового инкремента к соответствующим значениям для бутилметилсульфида. Инкремент, предложенный Персоном и Пиментелом [1140], использовали для расчета термодинамических функций, а инкремент Прозена, Джонсона

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cr°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	50,03	126,35	126,35	0,00	-39,19	12,41	-9,096
300	50,27	126,67	126,36	0,10	-39,26	12,73	-9,270
400	62,55	142,83	128,48	5,75	-42,93	30,57	-16,702
500	73,85	158,03	132,88	12,58	-45,87	49,29	-21,546
600	83,70	172,39	138,28	20,47	-48,16	68,54	-24,966
700	92,25	185,94	144,13	29,27	-49,86	88,17	-27,526
800	99,72	198,76	150,17	38,88	-64,11	106,69	-29,147
900	106,32	210,89	156,25	49,19	-64,53	128,08	-31,101
1000	112,07	222,40	162,29	60,12	-64,55	149,50	-32,672

и Россини [1196] — для расчета ΔH_f° . $\Delta H_f^\circ(g) = -39,19$ ккал/моль. Россини, Питцер, Арветт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_b = 468^\circ\text{K}$ и $T_m = 209,9^\circ\text{K}$.

№ 817. Амилпропилсульфид, $\text{C}_8\text{H}_{18}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 146,290

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cr°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	49,46	127,21	127,21	0,00	-39,81	11,53	-8,454
300	49,70	127,52	127,22	0,10	-39,88	11,85	-8,631
400	62,09	143,54	129,32	5,69	-43,60	29,61	-16,180
500	73,64	158,66	133,69	12,49	-46,58	48,27	-21,059
600	83,81	173,00	139,05	20,37	-48,87	67,46	-24,571
700	92,74	186,61	144,88	29,21	-50,54	87,02	-27,168
800	100,58	199,51	150,91	38,88	-64,73	105,47	-28,812
900	107,57	211,77	157,00	49,30	-65,04	126,78	-30,786
1000	113,71	223,43	163,06	60,37	-64,92	148,11	-32,368

Для определения термодинамических свойств амилпропилсульфида в газообразном состоянии к соответствующим значениям для бутилпропилсульфида прибавляли метиленовый инкремент, предложенный Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций, а при расчете энтальпии образования — инкремент, рекомендованный Прозеном, Джонсоном и Россини [1196]; эти расчеты выполнены Скоттом и Мак-Каллохом [1316]. Принята $\Delta H_f^\circ(g) = -39,81$ ккал/моль.

№ 818. Бутиламилсульфид, $\text{C}_9\text{H}_{20}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 160,316

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cr°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	54,92	136,52	136,52	0,00	-44,92	13,36	-9,792
300	55,19	136,87	136,53	0,11	-44,99	13,72	-9,992
400	69,03	154,66	138,86	6,33	-49,04	33,86	-18,500
500	81,88	171,48	143,72	13,88	-52,27	54,97	-24,027
600	93,15	187,42	149,68	22,65	-54,76	76,66	-27,920
700	103,01	202,54	156,16	32,47	-56,57	98,74	-30,828
800	111,64	216,87	162,86	43,21	-70,86	119,74	-32,709
900	119,31	230,47	169,63	54,76	-71,23	143,60	-34,869
1000	126,04	243,39	176,36	67,04	-71,12	167,49	-36,602

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические функции путем прибавления утроенного метиленового инкремента, предложенного Персоном и Пиментелом [1140], к соответствующим значениям для дипропилсульфида и прибавления члена, учитывающего симметрию, $R \ln 2$, к величинам S° и $-(G^\circ - H^\circ_0)/T$. Значение $\Delta H_f^\circ(g) = -44,92$ ккал/моль рассчитано путем прибавления одного метиленового инкремента к соответствующей величине для дибутилсульфида.

№ 819. Этилгептилсульфид, $\text{C}_9\text{H}_{20}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 160,316

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cr°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	55,11	136,20	136,20	0,00	-44,70	13,67	-10,023
300	55,38	136,55	136,21	0,11	-44,77	14,03	-10,222
400	69,19	154,40	138,55	6,34	-48,80	34,21	-18,689
500	81,93	171,23	143,42	13,91	-52,02	55,34	-24,189
600	92,98	187,17	149,39	22,67	-54,52	77,05	-28,064
700	102,60	202,24	155,88	32,46	-56,36	99,17	-30,960
800	110,94	216,50	162,57	43,15	-70,70	120,19	-32,833
900	118,30	230,00	169,32	54,62	-71,16	144,10	-34,990
1000	124,75	242,80	176,03	66,78	-71,16	168,03	-36,722

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления четырех метиленовых инкрементов к соот-

ветствующим значениям для этилпропилсульфида. Инкремент, рекомендованный Персоном и Пиментелом [1140], использовали для термодинамических функций, а инкремент, предложенный Проzenом, Джонсоном и Россини [1196], для энтальпии образования. Принята величина $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -44,70$ ккал/моль. По сообщению Адамса, Брамлета и Тендика [2] T_b приблизительно равно 463°K при 732 мм рт. ст.

№ 820. Гексилпропилсульфид, $\text{C}_9\text{H}_{20}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 160,316

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH ^o	ΔG ^o	
298	54,92	136,52	136,52	0,00	-44,73	13,55	-9,931
300	55,19	136,87	136,53	0,11	-44,80	13,91	-10,130
400	69,03	154,66	138,86	6,33	-48,85	34,05	-18,604
500	81,88	171,48	143,72	13,88	-52,08	55,16	-24,110
600	93,15	187,42	149,68	22,65	-54,57	76,85	-27,990
700	103,01	202,54	156,16	32,47	-56,38	98,93	-30,887
800	111,64	216,87	162,86	43,21	-70,67	119,93	-32,761
900	119,31	230,47	169,63	54,76	-71,04	143,79	-34,915
1000	126,04	243,39	176,36	67,04	-70,93	167,68	-36,644

К соответствующим значениям для бутилпропилсульфида прибавляли удвоенный метиленовый инкремент, предложенный Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций, а в случае энтальпии образования — удвоенный метиленовый инкремент, рекомендованный Проzenом, Джонсоном и Россини [1196]; таким путем Скотт и Мак-Каллох [1316] установили термодинамические свойства гексилпропилсульфида в газообразном состоянии. Принята $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -44,73$ ккал/моль.

№ 821. Метилотилсульфид, $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 160,316

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления четырех метиленовых инкрементов к соответствующим значениям для бутилметилсульфида. Использован инкремент Персона и Пиментела [1140] для термодинамических функций, а также Проzenа, Джонсона и Россини [1196] для расчета ΔH° . $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -44,12$ ккал/моль. Россини, Питцер, Арнетт-Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 231^{\circ}\text{K}$ и $T_b = 491^{\circ}\text{K}$.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH ^o	ΔG ^o	
298	55,50	135,66	135,66	0,00	-44,12	14,42	-10,567
300	55,77	136,01	135,67	0,11	-44,19	14,77	-10,762
400	69,49	153,96	138,02	6,38	-48,18	35,00	-19,120
500	82,10	170,85	142,91	13,97	-51,38	56,17	-24,552
600	93,04	186,81	148,91	22,74	-53,87	77,92	-28,380
700	102,53	201,88	155,41	32,53	-55,71	100,07	-31,242
800	110,79	216,12	162,12	43,21	-70,06	121,13	-33,090
900	118,07	229,60	168,87	54,66	-70,54	145,08	-35,228
1000	124,41	242,37	175,59	66,79	-70,57	169,06	-36,945

№ 822. Бутилгексилсульфид, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 174,342

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH ^o	ΔG ^o	
298	60,39	145,83	145,83	0,00	-49,84	15,37	-11,270
300	60,69	146,21	145,84	0,12	-49,92	15,77	-11,491
400	75,97	165,79	148,40	6,96	-54,28	38,30	-20,924
500	90,13	184,30	153,75	15,28	-57,77	61,86	-27,038
600	102,49	201,84	160,31	24,92	-60,46	86,04	-31,338
700	113,29	218,47	167,44	35,72	-62,41	110,66	-34,547
800	122,71	234,23	174,82	47,53	-76,80	134,19	-36,657
900	131,06	249,17	182,26	60,23	-77,23	160,61	-38,999
1000	138,38	263,37	189,66	73,71	-77,13	187,05	-40,878

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства на основе данных для бутиламилсульфида и метиленового инкремента, предложенного Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций, и инкремента, рекомендованного Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. Принято $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -49,84$ ккал/моль.

№ 823. Этилотилсульфид, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 174,342

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления пяти метиленовых инкрементов к соответ-

t, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _t
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	60,58	145,51	145,51	0,00	-49,63	15,68	-11,44
300	60,87	145,89	145,52	0,12	-49,71	16,08	-11,714
400	76,13	165,52	148,09	6,98	-54,05	38,63	-21,107
500	90,18	184,05	153,45	15,31	-57,53	62,22	-27,19
600	102,33	201,59	160,02	24,95	-60,23	86,42	-31,475
700	112,88	218,18	167,16	35,72	-62,21	111,07	-34,675
800	122,00	233,86	174,52	47,47	-76,65	134,63	-36,775
900	130,05	248,70	181,95	60,08	-77,16	161,09	-39,117
1000	137,08	262,78	189,33	73,45	-77,19	187,59	-40,996

ствующим значениям для этилпропилсульфида. Использован инкремент Персона и Пиментела [1140] для термодинамических функций, а также инкремент Прозена, Джонсона и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = -49,63$ ккал/моль. Дюпс и Рейд [701] сообщили, что при 100 мм рт. ст. температура кипения приблизительно равна 428° K.

№ 824. Гептилпропилсульфид, C₁₀H₂₂S (состояние идеального газа).

Мол. вес 174,342

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	60,39	145,83	145,83	0,00	-49,66	15,55	-11,402
300	60,69	146,21	145,84	0,12	-49,74	15,95	-11,622
400	75,97	165,79	148,40	6,96	-54,10	38,48	-21,023
500	90,13	184,30	153,75	15,28	-57,59	62,04	-27,116
600	102,49	201,84	160,31	24,92	-60,28	86,22	-31,404
700	113,29	218,47	167,44	35,72	-62,23	110,84	-34,603
800	122,71	234,23	174,82	47,53	-76,62	134,37	-36,706
900	131,06	249,17	182,26	60,23	-77,05	160,79	-39,042
1000	138,38	263,37	189,66	73,71	-76,95	187,23	-40,917

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства гептилпропилсульфида в газообразном состоянии путем прибавления утроенного метиленового инкремента к соответствующим значениям для бутилпропилсульфида. Использован инкремент Пер-

сона и Пиментела [1140] для термодинамических функций, а также инкремент Прозена, Джонсона и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = -49,66$ ккал/моль.

№ 825. Метилпропилсульфид, C₁₀H₂₂S (состояние идеального газа).

Мол. вес 174,342

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	60,97	144,97	144,97	0,00	-49,05	16,42	-12,037
300	61,26	145,35	144,98	0,12	-49,13	16,82	-12,254
400	76,43	165,08	147,56	7,01	-53,44	39,42	-21,539
500	90,35	183,67	152,94	15,37	-56,89	63,05	-27,558
600	102,39	201,23	159,54	25,02	-59,58	87,29	-31,795
700	112,81	217,81	166,69	35,79	-61,56	111,97	-34,957
800	121,85	233,48	174,07	47,53	-76,01	135,57	-37,035
900	129,82	248,30	181,50	60,12	-76,54	162,07	-39,355
1000	136,74	262,35	188,89	73,46	-76,59	188,61	-41,219

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления пяти метиленовых инкрементов к соответствующим значениям для бутилметилсульфида. Использован инкремент Персона и Пиментела [1140] для термодинамических функций, а также инкремент Прозена, Джонсона и Россини [1196] для ΔHf° . Энтальпия образования $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = -49,05$ ккал/моль. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 238^{\circ}$ K и $T_b = 513^{\circ}$ K.

№ 826. Диамилсульфид, C₁₀H₂₂S (состояние идеального газа).

Мол. вес 174,342

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H _{298^o})/T	H ^o -H _{298^o}	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	60,39	144,45	144,45	0,00	-49,84	15,79	-11,571
300	60,69	144,83	144,46	0,12	-49,92	16,19	-11,792
400	75,97	164,41	147,02	6,96	-54,28	38,85	-21,226
500	90,13	182,92	152,37	15,28	-57,77	62,55	-27,339
600	102,49	200,46	158,93	24,92	-60,46	86,87	-31,640
700	113,29	217,09	166,06	35,72	-62,41	111,62	-34,848
800	122,71	232,85	173,44	47,53	-76,80	135,29	-36,958
900	131,06	247,79	180,88	60,23	-77,23	161,85	-39,300
1000	138,38	261,99	188,28	73,71	-77,13	188,43	-41,179

Мейкл и Мейрик [899] определили ΔH_c и ΔH_v ($14,7 \pm 0,3$ ккал/моль) для диамилсульфида и после исправления в соответствии с новым значением ΔH_f^{298} для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 614) рассчитали величины $\Delta H_f^{298}(l) = -63,7 \pm 0,4$ ккал/моль и $\Delta H_f^{298}(g) = -49,0 \pm 0,6$ ккал/моль. По данным Эйерса и Агруса [53] $T_b = 500,5^\circ K$. Для газообразного состояния этого симметричного тиоалкана Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для дипропилсульфида четырех метиленовых инкрементов. Для термодинамических функций инкремент предложен Персоном и Пиментелом [1140], а для энтальпии образования — Прозеном, Джонсоном и Россини [1196]. Такой расчет дает $\Delta H_f^{298}(g) = -49,84$ ккал/моль. Для сопоставимости результатов принята именно эта величина.

№ 827. Бутилгептилсульфид, $C_{11}H_{24}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 188,368

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	65,86	155,14	155,14	0,00	-54,77	17,38	-12,740
300	66,18	155,55	155,15	0,13	-54,86	17,82	-12,983
400	82,91	176,91	157,95	7,59	-59,54	42,73	-23,343
500	98,38	197,11	163,78	16,67	-63,28	68,74	-30,044
600	111,84	216,27	170,94	27,20	-66,17	95,41	-34,753
700	123,57	234,41	178,73	38,98	-68,26	122,56	-38,262
800	133,77	251,59	186,77	51,86	-82,74	148,63	-40,602
900	142,81	267,88	194,88	65,70	-83,23	177,60	-43,126
1000	150,71	283,34	202,96	80,38	-83,16	206,61	-45,151

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутиламилсульфида удвоенных метиленовых инкрементов. Для термодинамических функций инкремент рекомендован Персоном и Пиментелом [1140], а для энтальпии образования — Прозеном, Джонсоном и Россини [1196]. Принята $\Delta H_f^{298}(g) = -54,77$ ккал/моль. По данным Синего [1348] точка кипения при 27 мм рт. ст. равна $408^\circ K$.

№ 828. Децилметилсульфид, $C_{11}H_{24}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 188,368

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутилметилсульфида шести метиленовых инкрементов. Для термодинами-

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	66,43	154,28	154,28	0,00	-53,97	18,44	-13,514
300	66,76	154,70	154,29	0,13	-54,06	18,88	-13,753
400	83,37	176,21	157,11	7,65	-58,68	43,86	-23,963
500	98,59	196,49	162,97	16,76	-62,39	69,94	-30,569
600	111,73	215,65	170,17	27,29	-65,28	96,68	-35,213
700	123,08	233,75	177,97	39,05	-67,40	123,88	-38,676
800	132,92	250,84	186,02	51,86	-81,95	150,03	-40,983
900	141,56	267,00	194,13	65,59	-82,54	179,08	-43,484
1000	149,07	282,32	202,19	80,13	-82,61	208,18	-45,495

ческих функций инкремент рекомендован Персоном и Пиментелом [1140], а для расчета ΔH_f° — Прозеном, Джонсоном и Россини [1196]. $\Delta H_f^{298}(g) = -53,97$ ккал/моль. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 254,7^\circ K$ и $T_b = 533,1^\circ K$.

№ 829. Этилпентилсульфид, $C_{11}H_{24}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 188,368

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	66,04	154,82	154,82	0,00	-54,55	17,70	-12,971
300	66,37	155,23	154,83	0,13	-54,64	18,14	-13,213
400	83,07	176,65	157,63	7,61	-59,30	43,07	-23,532
500	98,42	196,87	163,48	16,70	-63,03	69,11	-30,206
600	111,67	216,01	170,65	27,22	-65,93	95,81	-34,897
700	123,15	234,11	178,44	38,98	-68,05	122,98	-38,394
800	133,07	251,22	186,48	51,80	-82,59	149,09	-40,726
900	141,79	267,40	194,58	65,55	-83,16	178,10	-43,246
1000	149,41	282,75	202,63	80,12	-83,20	207,16	-45,271

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для этилпропилсульфида шести метиленовых инкрементов. Для термодинамических функций инкремент рекомендован Персоном и Пиментелом [1140], а для энтальпии образования — Прозеном, Джонсоном и Россини [1196]. $\Delta H_f^{298}(g) = -54,55$ ккал/моль.

№ 830. Октилпропилсульфид, $C_{11}H_{24}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 188,368

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	65,86	155,44	155,44	0,00	-54,56	17,59	-12,894
300	66,48	155,55	155,45	0,13	-54,65	18,03	-13,136
400	82,91	176,91	157,95	7,59	-59,33	42,94	-23,458
500	98,38	197,41	163,78	16,67	-63,07	68,95	-30,136
600	111,84	216,27	170,94	27,20	-65,96	95,62	-34,829
700	123,57	234,41	178,73	38,98	-68,05	122,77	-38,328
800	133,77	251,59	186,77	51,86	-82,53	148,84	-40,659
900	142,81	267,88	194,88	65,70	-83,02	177,81	-43,177
1000	150,71	283,34	202,96	80,38	-82,95	206,82	-45,197

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства октилпропилсульфида в газообразном состоянии путем прибавления к соответствующим значениям для бутилпропилсульфида четырех метиленовых инкрементов. Для термодинамических функций инкремент рекомендован Персоном и Пиментелом [1140], а для энтальпии образования — Прозеном, Джонсоном и Россини [1196]. $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = -54,56$ ккал/моль.

№ 831. Бутилоктилсульфид, $C_{12}H_{26}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 202,394

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	71,32	164,45	164,45	0,00	-59,69	19,40	-14,217
300	71,68	164,90	164,46	0,14	-59,78	19,88	-14,482
400	89,85	188,04	167,49	8,23	-64,78	47,16	-25,767
500	106,62	209,93	173,81	18,07	-68,78	75,63	-33,055
600	121,18	230,69	181,57	29,47	-71,87	104,80	-38,171
700	133,84	250,34	190,01	42,24	-74,10	134,47	-41,984
800	144,84	268,94	198,72	56,18	-88,68	163,08	-44,550
900	154,55	286,58	207,51	71,16	-89,23	194,61	-47,255
1000	163,04	303,31	216,26	87,05	-89,17	226,17	-49,427

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутиламмилсульфида трех метиленовых инкрементов. Для термодинамиче-

ских функций инкремент рекомендован Персоном и Пиментелом [1140], а для энтальпии образования — Прозеном, Джонсоном и Россини [1196]. $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = -59,69$ ккал/моль.

№ 832. Децилэтилсульфид, $C_{12}H_{26}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 202,394

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	71,51	164,13	164,13	0,00	-59,84	19,34	-14,177
300	71,86	164,58	164,14	0,14	-59,93	19,83	-14,443
400	90,01	187,77	167,18	8,24	-64,91	47,14	-25,754
500	106,67	209,69	173,51	18,10	-68,90	75,63	-33,055
600	121,01	230,44	181,28	29,50	-71,99	104,82	-38,180
700	133,43	250,04	189,72	42,23	-74,26	134,52	-41,997
800	144,13	268,57	198,43	56,12	-88,89	163,17	-44,573
900	153,54	286,11	207,20	71,02	-89,52	194,74	-47,286
1000	161,75	302,72	215,93	86,79	-89,59	226,35	-49,466

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для этилпропилсульфида семи метиленовых инкрементов. Для термодинамических функций инкремент рекомендован Персоном и Пиментелом [1140], а для энтальпии образования — Прозеном, Джонсоном и Россини [1196]. $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = -59,84$ ккал/моль.

№ 833. Дигексилсульфид, $C_{12}H_{26}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 202,394

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	71,32	163,07	163,07	0,00	-59,69	19,81	-14,519
300	71,68	163,52	163,08	0,14	-59,78	20,29	-14,784
400	89,85	186,66	166,11	8,23	-64,78	47,71	-26,069
500	106,62	208,55	172,43	18,07	-68,78	76,32	-33,356
600	121,18	229,31	180,19	29,47	-71,87	105,63	-38,472
700	133,84	248,96	188,63	42,24	-74,10	135,43	-42,282
800	144,84	267,56	197,34	56,18	-88,68	164,19	-44,852
900	154,55	285,20	206,13	71,16	-89,23	195,85	-47,557
1000	163,04	301,93	214,88	87,05	-89,17	227,55	-49,729

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства для газообразного состояния этого симметричного тиаалкана путем прибавления к соответствующим значениям для дипропилсульфида шести метиленовых инкрементов. Для термодинамических функций инкремент рекомендован Персоном и Пиментелом [1140], а для энтальпии образования — Проzenом, Джонсоном и Россини [1196]. Такой расчет дает $\Delta H_f^\circ(g) = -59,69$ ккал/моль. По данным Вогела и Коуана [1542] $T_b = 386,5^\circ \text{K}$ при 4 мм рт. ст.

№ 834. Метилундецилсульфид, $\text{C}_{12}\text{H}_{26}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 202,394

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	71,90	163,59	163,59	0,00	-58,90	20,44	-14,984
300	72,25	164,04	163,60	0,14	-58,99	20,93	-15,245
400	90,31	187,34	166,65	8,28	-63,94	48,29	-26,382
500	106,84	209,31	173,00	18,16	-67,90	76,82	-33,575
600	121,07	230,07	180,80	29,57	-70,98	106,05	-38,627
700	133,36	249,68	189,25	42,30	-73,25	135,78	-42,392
800	143,98	268,20	197,98	56,18	-87,90	164,47	-44,929
900	153,31	285,70	206,76	71,06	-88,54	196,08	-47,611
1000	161,41	302,29	215,49	86,80	-88,63	227,73	-49,768

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутилметилсульфида семи метиленовых инкрементов. Для термодинамических функций инкремент рекомендован Персоном и Пиментелом [1140], а для расчета ΔH_f° — Проzenом, Джонсоном и Россини [1196]. $\Delta H_f^\circ(g) = -58,90$ ккал/моль. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 259^\circ \text{K}$ и $T_b = 552^\circ \text{K}$.

№ 835. Нонилпропилсульфид, $\text{C}_{12}\text{H}_{26}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 202,394

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства нонилпропилсульфида в газообразном состоянии путем прибавления к соответствующим значениям для бутилпропилсульфида пяти метиленовых инкрементов. Для термодинамических функций инкремент рекомендован Персоном и Пиментелом [1140], а для энтальпии образования — Проzenом, Джонсоном и Россини [1196]. $\Delta H_f^\circ(g) = -59,51$ ккал/моль. Айвазов, Петров, Хайруллин и Япрынцева [5] отобрали значения $T_m = 243,3^\circ \text{K}$ и $T_b = 405,4^\circ \text{K}$ при 5 мм рт. ст.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	71,32	164,45	164,45	0,00	-59,51	19,58	-14,349
300	71,68	164,90	164,46	0,14	-59,60	20,06	-14,613
400	89,85	188,04	167,49	8,23	-64,60	47,34	-25,866
500	106,62	209,93	173,81	18,07	-68,60	75,81	-33,133
600	121,18	230,69	181,57	29,47	-71,69	104,98	-38,236
700	133,84	250,34	190,01	42,24	-73,92	134,65	-42,037
800	144,84	268,94	198,72	56,18	-88,50	163,26	-44,599
900	154,55	286,58	207,51	71,16	-89,05	194,79	-47,299
1000	163,04	303,31	216,26	87,05	-88,99	226,35	-49,466

№ 836. Бутилонилсульфид, $\text{C}_{13}\text{H}_{28}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 216,420

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	76,79	173,76	173,76	0,00	-64,62	21,40	-15,687
300	77,17	174,24	173,77	0,15	-64,72	21,93	-15,974
400	96,79	199,17	177,03	8,86	-70,04	51,59	-28,186
500	114,87	222,75	183,84	19,46	-74,29	82,50	-36,061
600	130,52	245,11	192,20	31,75	-77,58	114,17	-41,585
700	144,12	266,27	201,29	45,50	-79,96	146,37	-45,696
800	155,90	286,30	210,67	60,51	-94,63	177,53	-48,495
900	166,30	305,28	220,14	76,63	-95,23	211,61	-51,382
1000	175,38	323,28	229,56	93,72	-95,20	245,73	-53,701

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутилметилсульфида четырех метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций. Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_f^\circ(g) = -64,62$ ккал/моль.

№ 837. Децилпропилсульфид, $\text{C}_{13}\text{H}_{28}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 216,420

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства децилпропилсульфида в газообразном состоянии путем прибавления к соответствующим значениям для бутилпропилсульфида шести метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	76,79	173,76	173,76	0,00	-64,44	21,58	-15,819
300	77,17	174,24	173,77	0,15	-64,54	22,11	-16,105
400	96,79	199,17	177,03	8,86	-69,86	51,77	-28,284
500	114,87	222,75	183,84	19,46	-74,11	82,68	-36,140
600	130,52	245,11	192,20	31,75	-77,40	114,35	-41,651
700	144,12	266,27	201,29	45,50	-79,78	146,55	-45,753
800	155,90	286,30	210,67	60,51	-94,45	177,71	-48,545
900	166,30	305,28	220,14	76,63	-95,05	211,79	-51,426
1000	175,38	323,28	229,56	93,72	-95,02	245,91	-53,740

и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = -64,44$ ккал/моль.

№ 838. Додecilметилсульфид, C₁₃H₂₈S (состояние идеального газа).
Мол. вес 216,420

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	77,36	172,90	172,90	0,00	-63,82	22,46	-16,461
300	77,75	173,38	172,91	0,15	-63,92	22,99	-16,745
400	97,25	198,46	176,19	8,91	-69,18	52,73	-28,806
500	115,08	222,13	183,04	19,55	-73,40	83,71	-36,586
600	130,41	244,49	191,43	31,84	-76,68	115,44	-42,045
700	143,63	265,61	200,54	45,56	-79,09	147,70	-46,110
800	155,05	285,55	209,93	60,50	-93,84	178,92	-48,877
900	165,05	304,41	219,39	76,52	-94,54	213,08	-51,741
1000	173,74	322,26	228,79	93,47	-94,65	247,30	-54,044

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства додецилметилсульфида путем прибавления к соответствующим значениям для бутилметилсульфида семи метиленовых инкрементов, предложенных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = -63,82$ ккал/моль. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 271^{\circ}$ K и $T_b = 570^{\circ}$ K.

№ 839. Этилундецилсульфид, C₁₃H₂₈S (состояние идеального газа).
Мол. вес 216,420

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	76,97	173,44	173,44	0,00	-64,40	21,72	-15,918
300	77,36	173,92	173,45	0,15	-64,50	22,24	-16,204
400	96,95	198,90	176,72	8,88	-69,80	51,93	-28,374
500	114,91	222,51	183,54	19,49	-74,04	82,87	-36,223
600	130,35	244,86	191,91	31,77	-77,33	114,57	-41,729
700	143,70	265,98	201,00	45,49	-79,74	146,79	-45,828
800	155,20	285,93	210,38	60,45	-94,47	177,98	-48,620
900	165,28	304,81	219,83	76,48	-95,16	212,10	-51,503
1000	174,08	322,69	229,23	93,46	-95,24	246,28	-53,821

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства этилундецилсульфида путем прибавления к соответствующим значениям для этилпропилсульфида восьми метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = -64,40$ ккал/моль.

№ 840. Бутилдецилсульфид, C₁₄H₃₀S (состояние идеального газа).
Мол. вес 230,446

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	82,25	183,07	183,07	0,00	-69,55	23,41	-17,157
300	82,67	183,59	183,08	0,16	-69,66	23,98	-17,466
400	103,73	210,29	186,58	9,49	-75,29	56,02	-30,605
500	123,11	235,57	193,87	20,86	-79,80	89,38	-39,067
600	139,86	259,53	202,83	34,02	-83,28	123,55	-45,000
700	154,39	282,21	212,57	48,75	-85,81	158,27	-49,412
800	166,97	303,66	222,63	64,83	-100,58	191,97	-52,441
900	178,04	323,98	232,77	82,09	-101,24	228,60	-55,510
1000	187,71	343,25	242,86	100,39	-101,22	265,28	-57,974

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутилметилсульфида пяти метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = -69,55$ ккал/моль. Айвазов, Петров, Хайруллина и Япрынцева [5] отобрали значение $T_b = 419^{\circ}$ K при 9 мм рт. ст.

№ 841. Додецилсульфид, $C_{14}H_{30}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 230,446

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	82,44	182,75	182,75	0,00	-69,33	23,72	-17,388
300	82,85	183,27	182,76	0,16	-69,44	24,29	-17,696
400	103,89	210,02	186,26	9,51	-75,05	56,36	-30,793
500	123,16	235,33	193,57	20,88	-79,55	89,75	-39,229
600	139,69	259,28	202,54	34,05	-83,04	123,94	-45,144
700	153,98	281,91	212,28	48,75	-85,59	158,69	-49,544
800	166,26	303,29	222,33	64,77	-100,42	192,42	-52,565
900	177,03	323,51	232,46	81,95	-101,17	229,10	-55,630
1000	186,41	342,66	242,53	100,13	-101,26	265,83	-58,095

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для этилпропилсульфида девяти метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_f^\circ(g) = -69,33$ ккал/моль. По данным Боста и Эверетта [150] $T_m = 267^\circ$ K и $T_b = 430-434^\circ$ K при 18 мм рт. ст.

№ 842. Дигептилсульфид, $C_{14}H_{30}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 230,446

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	82,25	181,69	181,69	0,00	-69,54	23,83	-17,466
300	82,67	182,21	181,70	0,16	-69,65	24,40	-17,775
400	103,73	208,91	185,20	9,49	-75,28	56,58	-30,912
500	123,11	234,19	192,49	20,86	-79,79	90,08	-39,373
600	139,86	258,15	201,45	34,02	-83,27	124,39	-45,305
700	154,39	280,83	211,19	48,75	-85,80	159,25	-49,717
800	166,97	302,28	221,25	64,83	-100,57	193,08	-52,745
900	178,04	322,60	231,39	82,09	-101,23	229,85	-55,814
1000	187,71	341,87	241,48	100,39	-101,21	266,67	-58,278

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства этого симметричного тиаалкана в газообразном состоянии путем прибавления к соответствующим значениям для дипропилсульфида

восьми метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_f^\circ(g) = -69,54$ ккал/моль. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значение $T_b = 414,5^\circ$ K.

№ 843. Метилтридецилсульфид, $C_{14}H_{30}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 230,446

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	82,83	182,21	182,21	0,00	-68,75	24,46	-17,931
300	83,24	182,73	182,22	0,16	-68,86	25,03	-18,237
400	104,19	209,59	185,74	9,55	-74,44	57,15	-31,225
500	123,33	234,94	193,07	20,94	-78,91	90,58	-39,592
600	139,75	258,92	202,06	34,12	-82,39	124,81	-45,460
700	153,91	281,55	211,82	48,82	-84,94	159,60	-49,826
800	166,11	302,91	221,88	64,83	-99,78	193,37	-52,822
900	176,80	323,11	232,02	81,99	-100,55	230,08	-55,868
1000	186,07	342,23	242,09	100,14	-100,67	266,85	-58,318

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутилэтилсульфида девяти метиленовых инкрементов, предложенных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_f^\circ(g) = -68,75$ ккал/моль. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 276^\circ$ K и $T_b = 587^\circ$ K.

№ 844. Пропилундецилсульфид, $C_{14}H_{30}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 230,446

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства пропилундецилсульфида в газообразном состоянии путем прибавления к соответствующим значениям для бутилпропилсульфида семи метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_f^\circ(g) = -69,36$ ккал/моль.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	82,25	183,07	183,07	0,00	-69,36	23,60	-17,29
300	82,67	183,59	183,08	0,16	-69,47	24,17	-17,60
400	103,73	210,29	186,58	9,49	-75,10	56,21	-30,708
500	123,41	235,57	193,87	20,86	-79,61	89,57	-39,150
600	139,86	259,53	202,83	34,02	-83,09	123,74	-45,069
700	154,39	282,21	212,57	48,75	-85,62	158,46	-49,471
800	166,97	303,66	222,63	64,83	-100,39	192,16	-52,493
900	178,04	323,98	232,77	82,09	-101,05	228,79	-55,556
1000	187,71	343,25	242,86	100,39	-101,03	265,47	-58,010

№ 845. Бутилундецилсульфид, C₁₅H₃₂S (состояние идеального газа).
Мол. вес 244,472

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(C°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	87,72	192,38	192,38	0,00	-74,47	25,42	-18,634
300	88,16	192,93	192,39	0,17	-74,59	26,03	-18,965
400	110,67	221,42	196,12	10,12	-80,54	60,45	-33,029
500	131,36	248,39	203,90	22,25	-85,30	96,27	-42,078
600	149,20	273,95	213,46	36,30	-88,98	132,93	-48,418
700	164,67	298,14	223,85	52,01	-91,65	170,18	-53,131
800	178,03	321,02	234,58	69,16	-106,52	206,42	-56,389
900	189,79	342,68	245,40	87,56	-107,24	245,61	-59,639
1000	200,04	363,22	256,16	107,06	-107,24	284,85	-62,250

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутиламилсульфида шести метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_{f,298}^{\circ}(g) = -74,47$ ккал/моль.

№ 846. Додецилпропилсульфид, C₁₅H₃₂S (состояние идеального газа).
Мол. вес 244,472

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства додецилпропилсульфида в газообразном состоянии путем прибавления к соответствующим значениям для бутилпропилсульфида восьми метиленовых инкрементов, предложенных Персоном и Пимен-

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	87,72	192,38	192,38	0,00	-74,29	25,60	-18,766
300	88,16	192,93	192,39	0,17	-74,41	26,21	-19,096
400	110,67	221,42	196,12	10,12	-80,36	60,63	-33,127
500	131,36	248,39	203,90	22,25	-85,12	96,45	-42,157
600	149,20	273,95	213,46	36,30	-88,80	133,11	-48,483
700	164,67	298,14	223,85	52,01	-91,47	170,36	-53,187
800	178,03	321,02	234,58	69,16	-106,34	206,60	-56,438
900	189,79	342,68	245,40	87,56	-107,06	245,79	-59,683
1000	200,04	363,22	256,16	107,06	-107,06	285,03	-62,290

телом [1140] для термодинамических функций и Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_{f,298}^{\circ}(g) = -74,29$ ккал/моль. Айвазов, Петров, Хайруллина и Япрынцева [5] отобрали значения $T_m = 288^{\circ}$ K и $T_b = 618^{\circ}$ K.

№ 847. Этилтридецилсульфид, C₁₅H₃₂S (состояние идеального газа).
Мол. вес 244,472

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	87,91	192,06	192,06	0,00	-74,26	25,73	-18,858
300	88,35	192,61	192,07	0,17	-74,37	26,34	-19,188
400	110,84	221,15	195,81	10,14	-80,31	60,79	-33,212
500	131,41	248,15	203,60	22,28	-85,06	96,63	-42,235
600	149,04	273,70	213,17	36,32	-88,75	133,32	-48,558
700	164,26	297,85	223,56	52,01	-91,44	170,59	-53,259
800	177,33	320,65	234,29	69,10	-106,37	206,86	-56,510
900	188,78	342,22	245,09	87,42	-107,17	246,09	-59,757
1000	198,75	362,64	255,83	106,81	-107,28	285,38	-62,367

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для этилпропилсульфида десяти метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_{f,298}^{\circ}(g) = -74,26$ ккал/моль.

№ 848. Метилтетрадецилсульфид, $C_{15}H_{32}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 244,472

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	88,30	191,52	191,52	0,00	-73,68	26,47	-19,401
300	88,74	192,07	191,53	0,17	-73,79	27,08	-19,729
400	111,14	220,72	195,28	10,18	-79,69	61,58	-33,644
500	131,58	247,77	203,10	22,34	-84,42	97,46	-42,798
600	149,10	273,34	212,69	36,39	-88,10	134,18	-48,874
700	164,19	297,49	223,10	52,08	-90,79	171,50	-53,541
800	177,18	320,28	233,84	69,16	-105,73	207,81	-56,767
900	188,55	341,82	244,65	87,46	-106,55	247,07	-59,995
1000	198,41	362,21	255,39	106,82	-106,69	286,40	-62,591

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутилметилсульфида девяти метиленовых инкрементов, предложенных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = -73,68$ ккал/моль. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 284^{\circ}K$ и $T_b = 603^{\circ}K$.

№ 849. Бутилдодецилсульфид, $C_{16}H_{34}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 258,498

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	93,19	201,69	201,69	0,00	-79,40	27,43	-20,105
300	93,66	202,27	201,70	0,18	-79,52	28,08	-20,457
400	117,62	232,55	205,66	10,76	-85,79	64,88	-35,448
500	139,61	261,21	213,93	23,65	-90,81	103,15	-45,083
600	158,55	288,38	224,10	38,57	-94,69	142,31	-51,832
700	174,95	314,08	235,13	55,27	-97,50	182,08	-56,846
800	189,10	338,38	246,53	73,48	-112,47	220,86	-60,334
900	201,54	361,39	258,03	93,03	-113,24	262,60	-63,765
1000	212,38	383,20	269,46	113,74	-113,26	304,40	-66,523

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутилметилсульфида семи метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций

Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = -79,40$ ккал/моль. По данным Драховзала и Клавана [348] T_b приблизительно равна $343^{\circ}K$ при 9 мм рт. ст.

№ 850. Этилтетрадецилсульфид, $C_{16}H_{34}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 258,498

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	93,37	201,36	201,36	0,00	-79,18	27,75	-20,338
300	93,84	201,94	201,37	0,18	-79,30	28,40	-20,689
400	117,78	232,27	205,34	10,78	-85,55	65,23	-35,638
500	139,65	260,96	213,62	23,67	-90,56	103,52	-45,248
600	158,38	288,11	223,79	38,60	-94,45	142,71	-51,978
700	174,53	313,77	234,83	55,26	-97,28	182,51	-56,980
800	188,39	338,00	246,23	73,42	-112,31	221,33	-60,460
900	200,52	360,90	257,71	92,88	-113,17	263,11	-63,889
1000	211,08	382,59	269,12	113,47	-113,30	304,96	-66,646

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для этилдодецилсульфида одиннадцати метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = -79,18$ ккал/моль.

№ 851. Метилпентадецилсульфид, $C_{16}H_{34}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 258,498

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	93,76	200,82	200,82	0,00	-78,60	28,40	-20,881
300	94,23	201,41	200,83	0,18	-78,72	29,14	-21,230
400	118,08	231,83	204,81	10,81	-84,94	66,02	-36,070
500	139,82	260,57	213,12	23,73	-89,93	104,36	-45,611
600	158,44	287,75	223,31	38,67	-93,80	143,57	-52,294
700	174,46	313,41	234,37	55,33	-96,63	183,42	-57,262
800	188,24	337,62	245,78	73,48	-111,67	222,27	-60,717
900	200,29	360,50	257,26	92,92	-112,55	264,09	-64,127
1000	210,74	382,16	268,68	113,49	-112,71	305,98	-66,869

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутилметилсульфида десяти метиленовых инкрементов, предложенных

Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Прозеном, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -78,60$ ккал/моль. Россини, Питцер, Арпетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 288^{\circ}\text{K}$ и $T_b = 618^{\circ}\text{K}$.

№ 852. Диоктилсульфид, $\text{C}_{16}\text{H}_{34}\text{S}$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 258,498

$T, ^{\circ}\text{K}$	ккал/(моль \cdot $^{\circ}\text{K}$)			ккал/моль			lg K_p
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	93,19	200,31	200,31	0,00	-79,39	27,85	-20,413
300	93,66	200,89	200,32	0,18	-79,51	28,51	-20,766
400	117,62	231,17	204,28	10,76	-85,78	65,44	-35,755
500	139,61	259,83	212,55	23,65	-90,80	103,85	-45,390
600	158,55	287,00	222,72	38,57	-94,68	143,14	-52,137
700	174,95	312,70	233,75	55,27	-97,49	183,06	-57,150
800	189,10	337,00	245,15	73,48	-112,46	221,98	-60,638
900	201,54	360,01	256,65	93,03	-113,23	263,85	-64,070
1000	212,38	381,82	268,08	113,74	-113,25	305,79	-66,827

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства этого симметричного тиаалкана в газообразном состоянии путем прибавления к соответствующим значениям для дипропилсульфида десяти метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Прозеном, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -79,39$ ккал/моль. $T_b = 434,7^{\circ}\text{K}$ при 4 мм рт. ст. [1542].

№ 853. Пропилтридецилсульфид, $\text{C}_{16}\text{H}_{34}\text{S}$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 258,498

$T, ^{\circ}\text{K}$	ккал/(моль \cdot $^{\circ}\text{K}$)			ккал/моль			lg K_p
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	93,19	201,69	201,69	0,00	-79,22	27,61	-20,236
300	93,66	202,27	201,70	0,18	-79,34	28,26	-20,388
400	117,62	232,55	205,66	10,76	-85,61	65,06	-35,540
500	139,61	261,21	213,93	23,65	-90,63	103,33	-45,163
600	158,55	288,38	224,10	38,57	-94,51	142,49	-51,898
700	174,95	314,08	235,13	55,27	-97,32	182,26	-56,902
800	189,10	338,38	246,53	73,48	-112,29	221,04	-60,380
900	201,54	361,39	258,03	93,03	-113,06	262,78	-63,809
1000	212,38	383,20	269,46	113,74	-113,08	304,58	-66,562

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства пропилтридецилсульфида в газообразном состоянии путем прибавления к соответствующим значениям для бутилпропилсульфида девяти метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Прозеном, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -79,22$ ккал/моль.

№ 854. Бутилтридецилсульфид, $\text{C}_{17}\text{H}_{36}\text{S}$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 272,524

$T, ^{\circ}\text{K}$	ккал/(моль \cdot $^{\circ}\text{K}$)			ккал/моль			lg K_p
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	98,65	210,99	210,99	0,00	-84,32	29,45	-21,584
300	99,15	211,61	211,00	0,19	-84,45	30,14	-21,958
400	124,56	243,66	215,20	11,39	-91,04	69,32	-37,874
500	147,85	274,02	223,95	25,04	-96,31	110,04	-48,097
600	167,89	302,79	234,71	40,85	-100,39	151,70	-55,252
700	185,22	330,00	246,40	58,52	-103,34	194,00	-60,567
800	200,16	355,73	258,47	77,81	-118,41	235,32	-64,284
900	213,28	380,08	270,64	98,49	-119,24	279,62	-67,897
1000	224,71	403,15	282,75	120,41	-119,27	323,98	-70,801

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутилтридецилсульфида восьми метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Прозеном, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -84,32$ ккал/моль.

№ 855. Этилпентадецилсульфид, $\text{C}_{17}\text{H}_{36}\text{S}$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 272,524

$T, ^{\circ}\text{K}$	ккал/(моль \cdot $^{\circ}\text{K}$)			ккал/моль			lg K_p
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	98,84	210,67	210,67	0,00	-84,11	29,75	-21,808
300	99,34	211,29	210,68	0,19	-84,24	30,45	-22,181
400	124,72	243,39	214,88	11,41	-90,81	69,66	-38,057
500	147,90	273,78	223,65	25,07	-96,07	110,40	-48,254
600	167,72	302,54	234,42	40,87	-100,15	152,08	-55,392
700	184,81	329,71	246,11	58,52	-103,13	194,41	-60,695
800	199,46	355,36	258,18	77,75	-118,26	235,77	-64,405
900	212,27	379,61	270,34	98,35	-119,17	280,11	-68,015
1000	223,41	402,57	282,42	120,15	-119,32	324,51	-70,919

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для этилпропилсульфида двенадцати метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -84,11$ ккал/моль.

№ 856. Гексадецилметилсульфид, $C_{17}H_{36}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 272,524

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ^o ₂₉₈)/T	H ^o -H ^o ₂₉₈	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	99,23	210,13	210,13	0,00	-83,53	30,49	-22,351
300	99,73	210,75	210,14	0,19	-83,66	31,19	-22,722
400	125,02	242,96	214,36	11,45	-90,19	70,45	-38,389
500	148,07	273,39	223,15	25,13	-95,44	111,23	-48,618
600	167,78	302,17	233,94	40,94	-99,50	152,95	-55,709
700	184,74	329,34	245,65	58,59	-102,48	195,32	-60,977
800	199,31	354,98	257,73	77,81	-117,62	236,71	-64,663
900	212,04	379,21	269,89	98,39	-118,55	281,09	-68,253
1000	223,07	402,14	281,98	120,16	-118,73	325,54	-71,142

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутилметилсульфида одиннадцати метиленовых инкрементов, предложенных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -83,53$ ккал/моль. Россини, Цитцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 294^{\circ}K$ и $T_b = 632^{\circ}K$.

№ 857. Пропилтетрадецилсульфид, $C_{17}H_{36}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 272,524

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ^o ₂₉₈)/T	H ^o -H ^o ₂₉₈	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	98,65	210,99	210,99	0,00	-84,14	29,63	-21,716
300	99,15	211,61	211,00	0,19	-84,27	30,32	-22,090
400	124,56	243,66	215,20	11,39	-90,86	69,50	-37,972
500	147,85	274,02	223,95	25,04	-96,13	110,22	-48,176
600	167,89	302,79	234,71	40,85	-100,21	151,88	-55,318
700	185,22	330,00	246,40	58,52	-103,16	194,18	-60,623
800	200,16	355,73	258,47	77,81	-118,23	235,50	-64,333
900	213,28	380,08	270,64	98,49	-119,06	279,80	-67,941
1000	224,71	403,15	282,75	120,41	-119,09	324,16	-70,841

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства пропилтетрадецилсульфида в газообразном состоянии путем прибавления к соответствующим значениям для бутилпропилсульфида десяти метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -84,14$ ккал/моль.

№ 858. Бутилтетрадецилсульфид, $C_{18}H_{38}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 286,550

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ^o ₂₉₈)/T	H ^o -H ^o ₂₉₈	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	104,12	220,30	220,30	0,00	-89,25	31,45	-23,054
300	104,65	220,95	220,31	0,20	-89,39	32,19	-23,450
400	131,50	254,79	224,74	12,02	-96,29	73,75	-40,293
500	156,10	286,84	233,98	26,43	-101,82	116,92	-51,103
600	177,23	317,21	245,35	43,12	-106,10	161,07	-58,667
700	195,50	345,93	257,68	61,78	-109,19	205,90	-64,282
800	211,23	373,09	270,43	82,13	-124,36	249,77	-68,229
900	225,03	398,78	283,27	103,96	-125,24	296,62	-72,024
1000	237,04	423,13	296,05	127,08	-125,29	343,53	-75,075

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутилметилсульфида девяти метиленовых инкрементов, предложенных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -89,25$ ккал/моль.

№ 859. Этилгексадецилсульфид, $C_{18}H_{38}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 286,550

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ^o ₂₉₈)/T	H ^o -H ^o ₂₉₈	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	104,30	219,98	219,98	0,00	-89,03	31,77	-23,285
300	104,83	220,63	219,99	0,20	-89,17	32,51	-23,681
400	131,66	254,52	224,43	12,04	-96,05	74,09	-40,481
500	156,14	286,60	233,68	26,46	-101,58	117,29	-51,265
600	177,06	316,96	245,05	43,15	-105,85	161,46	-58,811
700	195,08	345,64	257,39	61,77	-108,98	206,32	-64,414
800	210,52	372,72	270,13	82,07	-124,20	250,22	-68,354
900	224,01	398,31	282,97	103,81	-125,17	297,11	-72,145
1000	235,74	422,53	295,72	126,81	-125,34	344,08	-75,195

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для этилпропилсульфида тринадцати метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Прозеном, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -89,03$ ккал/моль. По данным Воста и Эверетта [150] $T_m = 292^{\circ}\text{K}$ и T_b приблизительно равна 476°K при 12 мм рт. ст.

№ 860. Гептадецилметилсульфид, $\text{C}_{18}\text{H}_{38}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 286,550

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H^{\circ}_{298})/T$	$H^{\circ}-H^{\circ}_{298}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	104,69	219,44	219,44	0,00	-88,45	32,51	-23,828
300	105,22	220,09	219,45	0,20	-88,58	33,25	-24,221
400	131,96	254,08	223,90	12,08	-95,44	74,88	-40,913
500	156,31	286,21	233,18	26,52	-100,94	118,12	-51,628
600	177,12	316,59	244,57	43,22	-105,20	162,33	-59,127
700	195,01	345,27	256,93	61,84	-108,33	207,23	-64,696
800	210,37	372,34	269,68	82,13	-123,56	251,16	-68,611
900	223,78	397,91	282,52	103,85	-124,55	298,09	-72,383
1000	235,40	422,10	295,28	126,83	-124,75	345,10	-75,418

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутилметилсульфида двенадцати метиленовых инкрементов, предложенных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Прозеном, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -88,45$ ккал/моль. Согласно [1248], $T_m = 298^{\circ}\text{K}$ и $T_b = 646^{\circ}\text{K}$.

№ 861. Динонилсульфид, $\text{C}_{18}\text{H}_{38}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 286,550

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H^{\circ}_{298})/T$	$H^{\circ}-H^{\circ}_{298}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	104,12	218,92	218,92	0,00	-89,25	31,86	-23,356
300	104,65	219,57	218,93	0,20	-89,39	32,61	-23,752
400	131,50	253,41	223,36	12,02	-96,29	74,30	-40,594
500	156,10	285,46	232,60	26,43	-101,82	117,61	-51,405
600	177,23	315,83	243,97	43,12	-106,10	161,90	-58,968
700	195,50	344,55	256,30	61,78	-109,19	206,87	-64,584
800	211,23	371,71	269,05	82,13	-124,36	250,87	-68,531
900	225,03	397,40	281,89	103,96	-125,24	297,86	-72,326
1000	237,04	421,75	294,67	127,08	-125,29	344,91	-75,376

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства этого симметричного триалкана в газообразном состоянии путем прибавления к соответствующим значениям для динонилсульфида двенадцати метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Прозеном, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -89,25$ ккал/моль. Айвазов, Петров, Хайруллина и Япрынцева [5] отобразили значение $T_b = 459^{\circ}\text{K}$.

№ 862. Пентадецилпропилсульфид, $\text{C}_{18}\text{H}_{38}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 286,550

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H^{\circ}_{298})/T$	$H^{\circ}-H^{\circ}_{298}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	104,12	220,30	220,30	0,00	-89,07	31,63	-23,186
300	104,65	220,95	220,31	0,20	-89,21	32,37	-23,582
400	131,50	254,79	224,74	12,02	-96,11	73,93	-40,391
500	156,10	286,84	233,98	26,43	-101,64	117,10	-51,182
600	177,23	317,21	245,35	43,12	-105,92	161,25	-58,732
700	195,50	345,93	257,68	61,78	-109,01	206,08	-64,338
800	211,23	373,09	270,43	82,13	-124,18	249,95	-68,278
900	225,03	398,78	283,27	103,96	-125,06	296,80	-72,068
1000	237,04	423,13	296,05	127,08	-125,11	343,71	-75,114

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства пентадецилпропилсульфида в газообразном состоянии путем прибавления к соответствующим значениям для бутилпропилсульфида одиннадцати метиленовых инкрементов, предложенных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Прозеном, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -89,07$ ккал/моль.

№ 863. Бутилпентадецилсульфид, $\text{C}_{19}\text{H}_{40}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 300,576

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутиламилсульфида десяти метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Прозеном, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_f^{\circ}_{298}(g) = -94,18$ ккал/моль.

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	109,58	229,61	229,61	0,00	-94,18	33,46	-24,724
300	110,14	230,29	229,62	0,21	-94,32	34,24	-24,912
400	138,44	265,91	234,28	12,66	-101,55	78,18	-42,711
500	164,34	299,99	244,05	27,98	-107,19	123,78	-54,102
600	168,57	329,83	255,92	44,35	-112,85	170,48	-62,093
700	205,77	358,87	268,54	63,24	-116,84	218,10	-68,091
800	222,29	387,45	281,63	84,66	-132,11	264,80	-72,338
900	236,77	414,48	294,91	107,63	-133,05	314,51	-76,369
1000	249,37	440,10	308,16	131,95	-133,12	364,28	-79,610

№ 864. Этилгептадецилсульфид, C₁₉H₄₀S (состояние идеального газа).
Мол. вес 300,576

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	109,77	229,29	229,29	0,00	-93,96	33,77	-24,755
300	110,33	229,98	229,30	0,21	-94,10	34,56	-25,173
400	138,60	265,65	233,97	12,68	-101,31	78,52	-42,900
500	164,39	299,42	243,71	27,86	-107,09	124,17	-54,271
600	186,40	331,38	255,68	45,42	-111,56	170,84	-62,225
700	205,36	361,57	268,67	65,03	-114,83	218,22	-68,129
800	221,59	390,08	282,09	86,40	-130,15	264,66	-72,299
900	235,76	417,01	295,59	109,28	-131,17	314,11	-76,272
1000	248,08	442,51	309,02	133,49	-131,36	363,64	-79,468

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для этилпропилсульфида четырнадцати метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = -93,96$ ккал/моль.

№ 865. Гексадецилпропилсульфид, C₁₉H₄₀S (состояние идеального газа).
Мол. вес 300,576

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутилпропилсульфида двенадцати метиленовых инкрементов, предложен-

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	109,58	229,61	229,61	0,00	-93,99	33,65	-24,663
300	110,14	230,29	229,62	0,21	-94,13	34,43	-25,081
400	138,44	265,91	234,28	12,66	-101,36	78,37	-42,815
500	164,34	299,66	244,01	27,83	-107,15	123,99	-54,193
600	186,57	331,63	255,97	45,40	-111,61	170,63	-62,150
700	205,77	361,87	268,96	65,04	-114,85	217,99	-68,057
800	222,29	390,44	282,38	86,46	-130,12	264,40	-72,227
900	236,77	417,48	295,90	109,43	-131,06	313,80	-76,198
1000	249,37	443,09	309,35	133,75	-131,13	363,28	-79,390

ных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = -93,99$ ккал/моль.

№ 866. Метилгептадецилсульфид, C₁₉H₄₀S (состояние идеального газа).
Мол. вес 300,576

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	С _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	110,16	228,75	228,75	0,00	-93,38	34,51	-25,298
300	110,72	229,44	228,76	0,21	-93,52	35,30	-25,713
400	138,90	265,21	233,44	12,71	-100,69	79,31	-43,332
500	164,56	299,03	243,21	27,92	-106,45	125,00	-54,635
600	186,46	331,02	255,20	45,49	-110,91	171,71	-62,541
700	205,29	361,21	268,21	65,10	-114,18	219,13	-68,412
800	221,44	389,70	281,63	86,46	-129,51	265,60	-72,556
900	235,53	416,61	295,15	109,32	-130,55	315,09	-76,510
1000	247,74	442,08	308,58	133,50	-130,77	364,66	-79,692

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутилгептилсульфида тринадцати метиленовых инкрементов, предложенных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций Проzenом, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta Hf_{298}^{\circ}(g) = -93,38$ ккал/моль. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 303^{\circ}\text{K}$ и $T_b = 659^{\circ}\text{K}$.

№ 867. Бутилгексадецилсульфид, $C_{20}H_{42}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 314,602

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	115,05	238,92	238,92	0,00	-99,10	35,47	-26,002
300	115,64	239,64	238,93	0,22	-99,25	36,30	-26,142
400	145,38	277,04	243,83	13,29	-106,79	82,61	-45,136
500	172,59	312,48	254,04	29,22	-112,84	130,69	-57,120
600	195,91	346,05	266,61	47,67	-117,50	179,83	-65,499
700	216,05	377,80	280,24	68,29	-120,88	229,71	-71,716
800	233,36	407,80	294,33	90,78	-136,25	278,66	-76,123
900	248,52	436,18	308,53	114,89	-137,24	330,62	-80,281
1000	261,71	463,07	322,65	140,42	-137,33	382,65	-83,624

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутиламинилсульфида одиннадцати метиленовых инкрементов, предложенных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Прозеном, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_f^\circ_{298}(g) = -99,10$ ккал/моль.

№ 868. Дидецилсульфид, $C_{20}H_{42}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 314,602

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	115,05	237,54	237,54	0,00	-99,10	35,89	-26,303
300	115,64	238,26	237,55	0,22	-99,25	36,71	-26,743
400	145,38	275,66	242,45	13,29	-106,79	83,17	-45,437
500	172,59	311,10	252,66	29,22	-112,84	131,38	-57,422
600	195,91	344,67	265,23	47,67	-117,50	180,66	-65,801
700	216,05	376,42	278,86	68,29	-120,88	230,68	-72,018
800	233,36	406,42	292,95	90,78	-136,25	279,76	-76,424
900	248,52	434,80	307,15	114,89	-137,24	331,86	-80,583
1000	261,71	461,69	321,27	140,42	-137,33	384,03	-83,926

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства этого симметричного диаалкана в газообразном состоянии путем прибавления к соответствующим значениям для дидецилсульфида четырнадцати метиленовых инкрементов, предложенных Персоном

и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Прозеном, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_f^\circ_{298}(g) = -99,10$ ккал/моль. По данным Караша и Зависта [746] $T_m = 300,5^\circ K$, а по данным Хальперна и Глассера [566] $T_b = 452^\circ K$ при 1–2 мм рт. ст.

№ 869. Этилоктадецилсульфид, $C_{20}H_{42}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 314,602

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	115,24	238,60	238,60	0,00	-98,89	35,78	-26,225
300	115,82	239,32	238,61	0,22	-99,04	36,60	-26,664
400	145,54	276,77	243,51	13,31	-106,56	82,95	-45,319
500	172,64	312,23	253,74	29,25	-112,60	131,05	-57,278
600	195,75	345,80	266,34	47,70	-117,27	180,21	-65,639
700	215,64	377,51	279,96	68,29	-120,68	230,13	-71,845
800	232,65	407,44	294,04	90,72	-136,09	279,11	-76,244
900	247,51	435,72	308,22	114,75	-137,18	331,10	-80,399
1000	260,41	462,48	322,32	140,16	-137,39	383,19	-83,742

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для этилоцилсульфида пятнадцати метиленовых инкрементов, рекомендованных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Прозеном, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_f^\circ_{298}(g) = -98,89$ ккал/моль.

№ 870. Гептадецилпропилсульфид, $C_{20}H_{42}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 314,602

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	115,05	238,92	238,92	0,00	-98,92	35,65	-26,133
300	115,64	239,64	238,93	0,22	-99,07	36,48	-26,573
400	145,38	277,04	243,83	13,29	-106,61	82,79	-45,234
500	172,59	312,48	254,04	29,22	-112,66	130,87	-57,199
600	195,91	346,05	266,61	47,67	-117,32	180,01	-65,565
700	216,05	377,80	280,24	68,29	-120,70	229,89	-71,773
800	233,36	407,80	294,33	90,78	-136,07	278,84	-76,172
900	248,52	436,18	308,53	114,89	-137,06	330,80	-80,325
1000	261,71	463,07	322,65	140,42	-137,15	382,83	-83,663

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства гептадецилпропилсульфида в газообразном состоянии путем прибавления к соответствующим значениям для бутилпропилсульфида тринадцати метиленовых инкрементов, предложенных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Прозеном, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования, $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -98,92$ ккал/моль.

№ 871. Метилнонадецилсульфид, $C_{20}H_{42}S$ (состояние идеального газа),
Мол. вес 314,602

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p °	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	115,63	238,06	238,06	0,00	-98,31	36,52	-26,769
300	116,21	238,78	238,07	0,22	-98,46	37,35	-27,205
400	145,84	276,34	242,99	13,34	-105,95	83,74	-45,750
500	172,81	311,85	253,24	29,31	-111,96	131,88	-57,641
600	195,81	345,44	265,83	47,77	-116,62	181,08	-65,956
700	215,57	377,14	279,49	68,36	-120,03	231,03	-72,127
800	232,50	407,06	293,59	90,78	-135,46	280,05	-76,501
900	247,28	435,31	307,78	114,79	-136,56	332,08	-80,637
1000	260,07	462,05	321,88	140,17	-136,79	384,21	-83,965

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические свойства путем прибавления к соответствующим значениям для бутилметилсульфида четырнадцати метиленовых инкрементов, предложенных Персоном и Пиментелом [1140] для термодинамических функций и Прозеном, Джонсоном и Россини [1196] для энтальпии образования. $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -98,31$ ккал/моль. Россини, Питцер, Арнеге, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 308^{\circ}K$ и $T_b = 671^{\circ}K$.

**Диалкилдисульфиды (дитиалканы). Таблицы
для состояния идеального газа**

№ 872. Диметилдисульфид, $C_2H_6S_2$ (состояние идеального газа),
Мол. вес 94,200

Скотт, Финке, Гросс, Гатри и Хаффман [1302] изучали низкотемпературные термические свойства диметилдисульфиды и опубликовали следующие результаты: $T_m = 188,43^{\circ}K$, $\Delta H_m = 2,197$ ккал/моль, $S_{298}^{\circ}(l) = 56,26$ кал/(моль·°K) и $C_p(l, 300-350^{\circ}K) = 26,8 + 0,027T$ [кал/(моль·°K)]. Последующие исследования Хаббарда, Доуслина, Мак-Каллоха, Скотта, Тодда, Мессерли-

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p °	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	22,54	80,46	80,46	0,00	-5,77	3,52	-2,580
300	22,61	80,60	80,47	0,05	-5,80	3,58	-2,605
400	26,36	87,63	81,40	2,50	-8,12	6,94	-3,789
500	29,80	93,89	83,28	5,31	-9,92	10,91	-4,769
600	32,82	99,60	85,53	8,44	-11,35	15,22	-5,542
700	35,41	104,85	87,92	11,86	-12,49	19,79	-6,177
800	37,66	109,73	90,35	15,51	-39,52	21,92	-5,988
900	39,60	114,28	92,76	19,38	-39,64	29,61	-7,191
1000	41,31	118,55	95,12	23,43	-39,64	37,31	-8,155

осселлопа, Джорджа и Уаддингтона [627] позволили получить $\Delta H_v = 8,050$ ккал/моль при $T_b = 382,90^{\circ}K$ и $S_{298}^{\circ}(g) = 80,46$ кал/(моль·°K). Эти исследователи рассчитали термодинамические функции на основании данных по теплоемкости пара. Метод калориметрии сгорания был использован при определении $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -14,96$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -5,78$ ккал/моль с учетом поправки значения ΔH_{298}° для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). Менее точные данные опубликованы Франклином и Лампкином [440].

№ 873. Диэтилдисульфид, $C_4H_{10}S_2$ (состояние идеального газа),
Мол. вес 122,252

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p °	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	33,78	99,07	99,07	0,00	-17,84	5,32	-3,902
300	33,91	99,28	99,08	0,07	-17,88	5,47	-3,981
400	40,90	110,02	100,49	3,81	-20,79	13,58	-7,418
500	47,08	119,83	103,39	8,22	-23,02	22,43	-9,805
600	52,24	128,88	106,89	13,20	-24,78	31,69	-11,543
700	56,57	137,27	110,64	18,64	-26,13	41,27	-12,884
800	60,19	145,06	114,46	24,48	-53,31	48,43	-13,229
900	63,30	152,33	118,27	30,66	-53,51	61,16	-14,852
1000	65,97	159,15	122,02	37,13	-53,53	73,92	-16,154

Полные термические данные опубликованы Скоттом, Финке, Мак-Каллохом, Гроссом, Пеннингтоном и Уаддингтоном [1307].

Согласно этим данным, $T_m = 171,63^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 2,248 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 427,13^\circ \text{K}$, $\Delta H_v = 8,97 \text{ ккал/моль}$ при температуре кипения, $S_{298}^\circ(l) = 72,90 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}$ и $C_p(l, 270-300^\circ \text{K}) = 36,47 + 0,0412T \text{ [кал/(моль} \cdot \text{K)]}$. Термодинамические функции рассчитаны на основании этих данных с учетом барьера внутреннего вращения вокруг связи S—S для диметилдисульфида, установленного Хаббардом, Доуслином, Мак-Каллохом, Скоттом, Тоддом, Мессерли, Хоссенлопом, Джорджем и Уаддингтоном [627]. Эта последняя группа исследователей установила методом калориметрии сгорания $\Delta H_{298}^\circ(l) = -28,69 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{298}^\circ(g) = -17,84 \text{ ккал/моль}$ с учетом нового значения ΔH_{298}° для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). Франклин и Ламкин [440] опубликовали менее точное значение, которое приблизительно на 4 ккал/моль более отрицательно.

№ 874. Дипропилдисульфид, $\text{C}_6\text{H}_{14}\text{S}_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 150,304

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	44,30	118,30	118,30	0,00	-28,01	8,84	-6,482
300	44,50	118,58	118,31	0,09	-28,06	9,07	-6,606
400	54,50	132,77	120,17	5,05	-31,64	21,88	-11,956
500	63,50	145,93	124,02	10,96	-34,41	35,59	-15,557
600	71,30	158,21	128,71	17,70	-36,54	49,80	-18,138
700	78,00	169,72	133,75	25,18	-38,12	64,37	-20,098
800	83,70	180,51	138,93	33,27	-65,38	76,55	-20,912
900	88,80	190,67	144,12	41,90	-65,53	94,31	-22,901
1000	93,20	200,26	149,26	51,00	-65,36	112,08	-24,494

Полные термические данные опубликованы Хаббардом, Доуслином, Мак-Каллохом, Скоттом, Тоддом, Мессерли, Хоссенлопом, Джорджем и Уаддингтоном [627]. Согласно этим данным, $T_m = 187,66^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 3,300 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 469,01^\circ \text{K}$, $S_{298}^\circ(l) = 89,28 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}$, $S_{298}^\circ(g) = 118,30 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}$ и $C_p(l, 290-360^\circ \text{K}) = 42,43 + 0,068T \text{ [кал/(моль} \cdot \text{K)]}$. Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены по методу инкрементов, а данные калориметрии сгорания использованы для расчета $\Delta H_{298}^\circ(l) = -40,95 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_{298}^\circ(g) = -28,01 \text{ ккал/моль}$ с учетом нового значения ΔH_{298}° для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639).

№ 875. Дибутилдисульфид, $\text{C}_8\text{H}_{18}\text{S}_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 178,356

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	55,23	136,91	136,91	0,00	-37,86	12,87	-9,431
300	55,49	137,26	136,92	0,11	-37,93	13,18	-9,599
400	68,38	155,02	139,25	6,31	-42,14	30,75	-16,801
500	79,99	171,55	144,08	13,74	-45,42	49,37	-21,576
600	89,98	187,04	149,96	22,25	-47,95	68,56	-24,973
700	98,55	201,57	156,31	31,69	-49,81	88,19	-27,534
800	105,83	215,22	162,83	41,92	-77,27	105,45	-28,807
900	112,29	228,06	169,37	52,83	-77,53	128,33	-31,160
1000	117,86	240,19	175,85	64,35	-77,40	151,21	-33,045

Термодинамические функции экстраполированы Скоттом и Мак-Каллохом [1316]. Их оценка $\Delta H_{298}^\circ(g) = -37,86 \text{ ккал/моль}$ хорошо согласуется со значением $\Delta H_{298}^\circ(g) = -37,7 \pm 0,6 \text{ ккал/моль}$, рассчитанным Мейклом и Мак-Клином [902] с использованием величины $H_v_{298}^\circ = 15,4 \pm 0,4 \text{ ккал/моль}$ и полученного ими из ΔH_c значения $H_f_{298}^\circ(l) = -53,1 \pm 0,5 \text{ ккал/моль}$. Айвазов, Петров, Хайруллина и Япрынцева [5] отобрали значение $T_b = 375^\circ \text{K}$ при 11 мм рт. ст.

№ 876. Диамилдисульфид, $\text{C}_{10}\text{H}_{22}\text{S}_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 206,408

T, °K	кал/(моль °K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	66,16	155,53	155,53	0,00	-47,71	16,89	-12,379
300	66,48	155,95	155,54	0,13	-47,79	17,28	-12,590
400	82,26	177,27	158,34	7,58	-52,64	39,62	-21,644
500	96,48	197,19	164,14	16,53	-56,43	63,13	-27,593
600	108,66	215,88	171,22	26,80	-59,36	87,32	-31,805
700	119,10	233,44	178,87	38,20	-61,51	112,01	-34,968
800	127,96	249,93	186,73	50,57	-89,16	134,35	-36,701
900	135,78	265,46	194,62	63,76	-89,53	162,33	-39,417
1000	142,53	280,13	202,45	77,69	-89,44	190,33	-41,595

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические функции путем прибавления метиленовых инкрементов к значениям для бугтилдисульфида. Айвазов, Петров, Хайруллина, и Япрынцева [5] отобрали значение $T_b = 401^\circ \text{K}$ при 12 мм рт. ст.

№ 877. Дигексидисульфид, $C_{12}H_{26}S_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 234,460

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	77,09	174,15	174,15	0,00	-57,56	20,91	-15,326
300	77,47	174,63	174,16	0,15	-57,65	21,39	-15,582
400	96,14	199,52	177,42	8,84	-63,14	48,48	-20,487
500	112,97	222,83	184,20	19,32	-67,45	76,90	-33,610
600	127,35	244,73	192,48	31,35	-70,76	106,08	-38,638
700	139,65	265,31	201,43	44,72	-73,20	135,82	-42,403
800	150,09	284,65	210,63	59,22	-101,05	163,24	-44,594
900	159,27	302,87	219,88	74,69	-101,53	196,33	-47,673
1000	167,19	320,07	229,05	91,03	-101,47	229,45	-50,144

Приняты значения, рассчитанные Скоттом и Мак-Каллохом [1316]. Айвазов, Петров, Хайруллина и Япрынцева [5] отобрали значения $T_b = 455^\circ K$ при 21 мм рт. ст.

№ 878. Дигептилдисульфид, $C_{14}H_{30}S_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 262,512

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	88,02	192,77	192,77	0,00	-67,41	24,93	-18,274
300	88,46	193,32	192,78	0,17	-67,52	25,50	-18,573
400	110,02	224,77	196,51	10,11	-73,64	57,34	-31,330
500	129,46	248,46	204,26	22,11	-78,46	90,66	-39,627
600	146,03	273,57	213,74	35,90	-82,17	124,84	-45,470
700	160,20	297,17	223,99	51,23	-84,89	159,63	-49,837
800	172,22	319,36	234,54	67,87	-112,94	192,14	-52,487
900	182,76	340,27	245,14	85,63	-113,53	230,33	-55,930
1000	191,86	360,01	255,65	104,37	-113,51	268,57	-58,694

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические функции по методу метиленовых инкрементов. Айвазов, Петров, Хайруллина и Япрынцева [5] отобрали значение $T_b = 433^\circ K$ при 10 мм рт. ст.

№ 879. Дноктилдисульфид, $C_{16}H_{34}S_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 290,564

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	98,96	211,39	211,39	0,00	-77,27	28,94	-21,214
300	99,45	212,01	211,40	0,19	-77,39	29,59	-21,557
400	123,91	244,03	215,60	11,38	-84,15	66,20	-36,167
500	145,96	274,11	224,32	24,90	-89,48	104,42	-45,640
600	164,72	302,42	235,00	40,45	-93,58	143,59	-52,299
700	180,76	329,04	246,55	57,75	-96,59	183,43	-57,267
800	194,35	354,09	258,45	76,52	-124,83	221,02	-60,378
900	206,26	377,68	270,40	96,56	-125,54	264,33	-64,184
1000	216,53	399,96	282,25	117,72	-125,56	307,69	-67,240

Приняты значения, рассчитанные Скоттом и Мак-Каллохом [1316]. Айвазов, Петров, Хайруллина и Япрынцева [5] отобрали значение $T_b = 473^\circ K$ при 10 мм рт. ст.

№ 880. Динонилдисульфид, $C_{18}H_{38}S_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 318,616

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	109,89	230,00	230,00	0,00	-87,12	32,97	-24,163
300	110,44	230,69	230,01	0,21	-87,26	33,70	-24,550
400	137,79	266,27	234,67	12,64	-94,65	75,07	-41,012
500	162,45	299,73	244,37	27,69	-100,49	118,19	-51,659
600	183,40	331,25	256,25	45,00	-104,99	162,35	-59,134
700	201,31	360,90	269,11	64,26	-108,28	207,25	-64,704
800	216,48	388,79	282,34	85,17	-136,72	249,93	-68,273
900	229,75	415,07	295,64	107,49	-137,55	298,34	-72,443
1000	241,19	439,89	308,84	131,06	-137,60	346,81	-75,792

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические функции путем экстраполяции с помощью метиленовых инкрементов. Айвазов, Петров, Хайруллина и Япрынцева [5] отобрали значение $T_b = 485^\circ K$ при 7 мм рт. ст.

№ 881. Дидецилдисульфид, $C_{20}H_{42}S_2$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 346,668

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	120,82	248,62	248,62	0,00	-96,97	36,99	-27,111
300	121,43	249,37	248,63	0,23	-97,12	37,81	-27,544
400	151,67	288,52	253,76	13,91	-105,15	83,93	-47,877
500	178,94	325,37	264,43	30,47	-111,50	131,96	-57,676
600	202,08	360,09	277,51	49,55	-116,40	181,11	-65,560
700	221,86	392,77	291,67	70,77	-119,98	231,07	-72,156
800	238,61	423,51	306,24	93,82	-148,61	278,82	-76,167
900	253,24	452,48	320,90	118,43	-149,55	332,34	-80,696
1000	265,86	479,83	335,44	144,40	-149,64	385,93	-84,344

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические функции путем прибавления метиленовых инкрементов к значениям для дибутилдисульфида. Айвазов, Петров, Хайруллина и Япрынцева [5] отобрали значения $T_m = 246^\circ K$ и $T_b = 484^\circ K$ при 7 мм рт. ст.

Трициклоалканы. Таблицы для состояния идеального газа

№ 882. Трициклопропан, C_3H_4S (состояние идеального газа).
Мол. вес 60,118

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	12,83	61,01	61,01	0,00	19,65	23,16	-16,974
300	12,90	61,09	61,02	0,03	19,63	23,48	-16,885
400	16,53	65,32	61,57	1,51	18,13	24,53	-13,405
500	19,56	69,34	62,72	3,31	16,96	26,28	-11,484
600	21,99	73,13	64,15	5,40	16,03	28,23	-10,281
700	23,96	76,67	65,68	7,70	15,28	30,35	-9,474
800	25,61	79,98	67,27	10,18	1,60	31,27	-8,514
900	27,03	83,08	68,85	12,81	1,40	34,99	-8,497
1000	28,21	85,99	70,42	15,57	1,28	38,74	-8,466

Гатри, Скотт и Уаддингтон [552] использовали результаты собственных измерений инфракрасного спектра и давления пара в сочетании с данными по определению энтальпии сгорания, полученными

Саннером [1442], для установления термодинамических свойств трициклопропана в состоянии идеального газа. Ими получены следующие результаты: $\Delta H_v = 6,9$ ккал/моль при $T_b = 328,08^\circ K$, $S_{298}^\circ(g) = 61,01$ ккал/(моль·°K) и $S_{298}^\circ(l) = 38,84$ ккал/(моль·°K). Данные Саннера [1447] по определению ΔH_c приводят к значениям $\Delta H_f^\circ(l) = 12,41$ ккал/моль и $\Delta H_f^\circ(g) = 19,65 \pm 0,31$ ккал/моль с учетом нового значения ΔH_f° для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). Россини, Питчер, Арпетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значение $T_m = 164^\circ K$. По данным Айвазова, Петрова, Хайруллиной и Япрынцева [5] $T_b = 328,08^\circ K$.

№ 883. Трициклобутан, C_4H_6S (состояние идеального газа).
Мол. вес 74,144

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	16,57	68,17	68,17	0,00	14,61	25,69	-18,834
300	16,66	68,28	68,18	0,04	14,58	25,76	-18,766
400	21,89	73,80	68,89	1,97	12,59	29,74	-16,248
500	26,56	79,20	70,42	4,40	11,03	34,21	-14,953
600	30,45	84,40	72,32	7,25	9,79	38,97	-14,192
700	33,69	89,34	74,40	10,46	8,83	43,93	-13,716
800	36,40	94,02	76,56	13,97	-4,98	47,73	-13,038
900	38,70	98,44	78,75	17,73	-5,26	54,34	-13,195
1000	40,67	102,63	80,93	21,70	-5,40	60,98	-13,325

Полные термические данные и расчеты всех термодинамических функций для состояния идеального газа трициклобутана приведены в работе Скотта, Финке, Хаббарда, Мак-Каллоха, Катца, Гросса, Бессерли, Пеннингтона и Уаддингтона [1304]. Согласно этим данным $T_t = 176,7^\circ K$, $\Delta H_t = 0,160$ ккал/моль, $T_m = 199,90^\circ K$, $\Delta H_m = 1,971$ ккал/моль, $T_b = 368,42^\circ K$, $\Delta H_v = 7,82$ ккал/моль при температуре кипения, $S_{298}^\circ(l) = 44,72$ ккал/(моль·°K), $S_{298}^\circ(g) = 68,17$ ккал/(моль·°K) и $C_p(l, 270-330^\circ K) = 14,9 + 0,041T$ [кал/(моль·°K)]. Хаббард, Катц и Уаддингтон [633] определяли энтальпию сгорания и ссылались на хорошо согласующееся неопубликованное значение, полученное Саннером в Лундском университете. На основании данных по энтальпии сгорания они рассчитали $\Delta H_f^\circ(l) = 6,04$ ккал/моль и $\Delta H_f^\circ(g) = 14,61$ ккал/моль с учетом нового значения ΔH_f° для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). На основании данных по определению ΔH_c , сравненных аналогичным образом, Саннер [1447] рассчитал $\Delta H_f^\circ(l) = 5,80$ ккал/моль и $\Delta H_f^\circ(g) = 14,38$ ккал/моль. Принято первое из указанных значений для $\Delta H_f^\circ(g)$. Айвазов, Петров, Хайруллина и Япрынцева [5] отобрали значения $T_b = 368,44^\circ K$.

№ 884. Тиадциклопентан, C_4H_8S (состояние идеального газа).

Мол. вес 88,170

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	21,72	73,94	73,94	0,00	-8,08	11,00	-8,059
300	21,85	74,08	73,95	0,05	-8,12	11,11	-8,050
400	28,95	81,36	74,89	2,59	-10,43	17,82	-9,758
500	35,04	88,50	76,90	5,80	-12,23	25,10	-10,972
600	40,05	95,34	79,41	9,56	-13,64	32,70	-11,911
700	44,20	101,84	82,15	13,78	-14,72	40,54	-12,658
800	47,66	107,97	85,00	18,38	-28,61	47,22	-12,000
900	50,60	113,76	87,88	23,30	-28,92	56,73	-12,774
1000	53,14	119,22	90,74	28,49	-29,07	66,26	-14,480

Полные термические данные получены Хаббардом, Финке, Скоттом, Мак-Каллохом, Катцом, Гроссом, Мессерли, Пеннингтоном и Уаддингтоном [628]. Согласно этим данным, $T_m = 176,97^\circ K$, $\Delta H_m = 1,757$ ккал/моль, $T_b = 394,27^\circ K$ и при этой температуре $\Delta H_v = 8,279$ ккал/моль, $S_{298}^\circ(l) = 49,67$ ккал/(моль·°K), $S_{298}^\circ(g) = 73,94$ ккал/(моль·°K) и $C_p(l, 270-340^\circ K) = 16,85 + 0,056T$ [ккал/(моль·°K)]. Хаббард, Катц и Уаддингтон [633] измерили энтальпию сгорания и рассчитали $\Delta H_f^\circ(l) = -17,31$ ккал/моль и $\Delta H_f^\circ(g) = -8,08$ ккал/моль с учетом полого значения ΔH_f° для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). Девис и Саннер [309] также измерили ΔH_c и получили $\Delta H_f^\circ(l) = -17,34$ ккал/моль и $\Delta H_f^\circ(g) = -7,96$ ккал/моль, которые прекрасно согласуются с первоначально указанными величинами даже без учета разницы в использованных значениях ΔH_v . Согласно [1248], $T_m = 176,99^\circ K$ и $T_b = 394,27^\circ K$.

Термодинамические свойства определены Мак-Каллохом, Финке, Хаббардом, Гудом, Пеннингтоном, Мессерли и Уаддингтоном [951]. Эти исследователи экспериментально получили следующие значения: $T_t = 201,4^\circ K$, $\Delta H_t = 0,2624$ ккал/моль, T_t (λ-тип перехода) = $207^\circ K$, $T_t = 240,01^\circ K$, $\Delta H_t = 1,858$ ккал/моль, $T_m = 292,24^\circ K$, $\Delta H_m = 0,585$ ккал/моль, $T_b = 414,90^\circ K$, $\Delta H_v = 8,599$ ккал/моль при температуре кипения, $S_{298}^\circ(l) = 52,16$ ккал/(моль·°K), $S_{298}^\circ(g) = 77,26$ ккал/(моль·°K) и $C_p(l, 292-340^\circ K) = 15,47 + 0,079T$ [ккал/(моль·°K)]. На основании данных, полученных методом калориметрии сгорания, установлено $\Delta H_f^\circ(l) = -25,32$ ккал/моль и $\Delta H_f^\circ(g) = -15,12$ ккал/моль с учетом поправок на новое значение ΔH_f° для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). Мак-Каллох и др. внесли поправку в данные Саннера [1442], связанную с приведением к $25^\circ C$, и получили значение $\Delta H_f^\circ(l) =$

№ 885. Тиадциклогексан, $C_5H_{10}S$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 102,196

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	25,86	77,26	77,26	0,00	-15,12	12,68	-9,292
300	26,03	77,43	77,27	0,05	-15,17	12,85	-9,358
400	35,71	86,26	78,40	3,15	-17,88	22,55	-12,322
500	44,73	95,22	80,87	7,18	-19,87	32,90	-14,381
600	52,37	104,07	84,00	12,04	-21,25	43,59	-15,877
700	58,71	112,63	87,48	17,61	-22,11	54,50	-17,015
800	64,00	120,83	91,14	23,75	-35,62	64,20	-17,538
900	68,49	128,63	94,88	30,38	-35,42	76,68	-18,619
1000	72,34	136,05	98,63	37,43	-34,93	89,12	-19,476

$= -25,57$ ккал/моль, согласующиеся в пределах ошибки опыта (см. также Саннер [1447]). Айвазов, Петров, Хайруллина и Япрынцева [5] отобрали значения $T_m = 292,14^\circ K$ и $T_b = 414,90^\circ K$.

№ 886. Тиадциклогептан, $C_6H_{12}S$ (состояние идеального газа).

Мол. вес 116,222

T, °K	ккал/(моль °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	29,78	86,50	86,50	0,00	-14,66	20,09	-14,728
300	30,00	86,69	86,51	0,06	-14,72	20,31	-14,792
400	42,00	96,96	87,83	3,66	-17,86	32,42	-17,712
500	54,00	107,64	90,72	8,47	-20,09	45,26	-19,783
600	65,00	118,51	94,44	14,44	-21,44	58,47	-21,296
700	73,00	129,15	98,65	21,36	-22,08	71,88	-22,439
800	79,00	139,30	103,10	28,97	-35,29	84,03	-22,955
900	84,00	148,91	107,66	37,13	-34,76	98,93	-24,021
1000	88,00	157,97	112,24	45,74	-33,93	113,75	-24,858

Саннер [1442] определил энтальпию сгорания при $293^\circ K$ методом вращающейся калориметрической бомбы. Приведение его результатов к $298^\circ K$ даст $\Delta H_f^\circ(l) = -26,96$ ккал/моль и $\Delta H_f^\circ(g) = -14,66$ ккал/моль с учетом нового значения ΔH_f° для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). Саннер опубликовал также значения $T_m = 273,65^\circ K$ и $T_b = 446^\circ K$. Термодинамические функции для состояния идеального газа оценены путем сравнения известных тиадциклоалканов с циклоалканами.

Трициклолазены. Таблицы для состояния идеального газа

№ 887. Триофен, C_4H_4S (состояние идеального газа).
Мол. вес 84,138

T, °K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _f
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	17,42	66,65	66,65	0,00	27,66	30,30	-22,208
300	17,52	66,76	66,66	0,04	27,64	30,31	-22,082
400	23,02	72,58	67,41	2,07	26,20	31,37	-17,139
500	27,47	78,21	69,01	4,61	25,13	32,79	-14,332
600	30,95	83,54	71,00	7,53	24,28	34,40	-12,530
700	33,74	88,53	73,15	10,77	23,63	36,17	-11,292
800	36,01	93,19	75,36	14,26	10,04	36,73	-10,033
900	37,91	97,54	77,59	17,96	9,93	40,07	-9,730
1000	39,54	101,62	79,79	21,83	9,91	43,43	-9,490

Низкотемпературные термические данные, а также данные по давлению пара, теплоемкости пара и энтальпии испарения триофена получены Уаддингтоном, Ноултоном, Скоттом, Оливером, Тоддом, Хаббардом, Смитом и Хаффманом [1548]. Эти исследователи установили также два перехода λ-типа при 112 и 138° K и один изотермический переход при T_t = 171,6° K, ΔH_t = 0,152 ккал/моль, T_m = 234,94° K, ΔH_m = 1,2155 ккал/моль, T_b = 357,31° K и при этой температуре ΔH_v = 7,522 ккал/моль, S₂₉₈^o(l) = 43,30 кал/(моль · °K), S₂₉₈^o(g) = 66,62 кал/(моль · °K) и C_p(l, 270—340° K) = 17,7 + 0,040T [кал/(моль · °K)]. Полные термодинамические функции, рассчитанные из спектроскопических данных, пересмотрены Хаббардом, Скоттом, Фроу и Уаддингтоном [636] с целью выяснения исправлений на ангармоничность. Джакобс и Паркс [677] опубликовали результаты измерения теплоемкости в интервале температур от 93 до 293° K, приводящие к оценке энтропии на 1,1 кал/(моль · °K) ниже, чем приведенное выше более точное значение. Саннер [444] и Хаббард, Скотт, Фроу и Уаддингтон [636] определяли энтальпию сгорания методами вращающейся калориметрической бомбы. Полученные результаты прекрасно согласуются и приводят к значениям ΔH_{f298}^o(l) = 19,37 ккал/моль и ΔH_{f298}^o(g) = 27,66 ккал/моль с учетом нового значения ΔH_{f298}^o для H₂SO₄ (водн.) (см. стр. 639). Результаты более ранних измерений Уаддингтона и др. [1548], Мура, Ренквиста и Паркса [1025], а также Франклина и Лампкина [440] получены при работе по методу Хаффмана и Эллиса [646]. Однако все полученные результаты согласуются в пределах 0,5 ккал/моль с данными

более точного метода вращающейся калориметрической бомбы. Термические свойства триофена опубликованы в работе Кобе, Равица Вора [783].

№ 888. 2-Метилтриофен, C_5H_6S (состояние идеального газа).
Мол. вес 98,164

°K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	22,80	76,62	76,62	0,00	20,00	29,38	-21,532
300	22,92	76,77	76,63	0,05	19,97	29,43	-21,441
400	29,43	84,27	77,61	2,67	18,18	32,81	-17,924
500	35,01	91,46	79,66	5,90	16,79	36,63	-16,009
600	39,57	98,26	82,20	9,64	15,68	40,70	-14,824
700	43,32	104,65	84,96	13,79	14,81	44,97	-14,040
800	46,43	110,64	87,80	18,28	1,05	48,06	-13,127
900	49,06	116,26	90,65	23,06	0,82	53,95	-13,100
1000	51,30	121,55	93,48	28,08	0,73	59,86	-13,082

Термодинамические свойства определены и рассчитаны Пеннингтоном, Финке, Хаббардом, Мессерли, Фроу, Хоссенлоплом и Уаддингтоном [1134]. Ими опубликованы следующие результаты: T_m = 209,78° K, ΔH_m = 2,263 ккал/моль, ΔH_v = 8,103 ккал/моль и T_b = 385,71° K, S₂₉₈^o(l) = 52,22 кал/(моль · °K), S₂₉₈^o(g) = 76,62 кал/(моль · °K) и C_p(l, 280—340° K) = 20,90 + 0,05T [кал/(моль · °K)]. Эти исследователи определили ΔH_c по методу Хаббарда, Катца и Уаддингтона [633] и рассчитали ΔH_{f298}^o(l) = 10,70 ккал/моль и ΔH_{f298}^o(g) = 20,00 ккал/моль с учетом нового значения ΔH_{f298}^o для H₂SO₄ (водн.) (см. стр. 639).

№ 889. 3-Метилтриофен, C_5H_6S (состояние идеального газа).
Мол. вес 98,164

°K	кал/(моль · °K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔHf ^o	ΔGf ^o	
298	22,67	76,79	76,79	0,00	19,79	29,12	-21,341
300	22,80	76,94	76,80	0,05	19,76	29,17	-21,251
400	29,38	84,42	77,77	2,66	17,96	32,53	-17,773
500	34,89	91,59	79,82	5,89	16,56	36,34	-15,882
600	39,34	98,36	82,36	9,61	15,43	40,40	-14,714
700	42,95	104,70	85,10	13,73	14,53	44,66	-13,943
800	45,95	110,64	87,92	18,17	0,74	47,74	-13,042
900	48,47	116,20	90,76	22,90	0,45	53,64	-13,025
1000	50,59	121,42	93,57	27,86	0,29	59,56	-13,017

Полные термические данные получены Мак-Каллохом, Саннером, Финке, Хаббардом, Гроссом, Пеннингтоном, Мессерли, Гудом и Уаддингтоном [965]. Наибольший интерес представляют следующие результаты: $T_m = 204,18^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 2,518 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 388,59^\circ \text{K}$, $\Delta H_v = 8,186 \text{ ккал/моль}$ при температуре кипения, $S_{298}^\circ(l) = 52,185 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}$, $S_{298}^\circ(g) = 76,79 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}$ и $C_p(l, 270-340^\circ \text{K}) = 21,40 + 0,049T \text{ [кал/(моль} \cdot \text{K)]}$. Энтальпия сгорания определена по методу Хаббарда, Катца и Уаддингтона [633]; полученные результаты привели к значениям $\Delta H_f^\circ(g) = -10,34 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_f^\circ(g) = 19,79 \text{ ккал/моль}$ с учетом нового значения ΔH_f° для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). Фаусетт [411] опубликовал данные для ряда других физических свойств 3-метилтиофена.

А. метиолы (меркаптаны). Таблицы для состояния идеального газа

№ 890. Метантиол, CH_3S (состояние идеального газа).
Мол. вес 48,108

$T, ^\circ\text{K}$	кал/(моль \cdot K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	12,01	60,96	60,96	0,00	-5,49	-2,37	1,733
300	12,05	61,04	60,97	0,03	-5,51	-2,35	1,715
400	14,04	64,78	61,46	1,33	-6,94	-1,14	0,625
500	15,91	68,12	62,47	2,83	-8,09	0,44	-0,192
600	17,57	71,17	63,67	4,51	-9,05	2,24	-0,815
700	19,03	73,99	64,94	6,34	-9,85	4,21	-1,314
800	20,32	76,62	66,24	8,31	-23,57	4,99	-1,364
900	21,46	79,08	67,53	10,40	-23,83	8,58	-2,064
1000	22,48	81,39	68,80	12,60	-24,01	12,20	-2,565

Низкотемпературные термические данные, а также данные по давлению пара получены Расселом, Осборном и Иостом [1271], согласно которым $T_m = 150,15^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 1,411 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 279,14^\circ \text{K}$, $\Delta H_v = 5,872 \text{ ккал/моль}$ при T_b и $S_{279,11}^\circ(g) = 60,16 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}$. Биндер [131, 132] рассчитал термодинамические функции на основании спектроскопических данных и барьера внутреннего вращения, установленного по экспериментальному значению энтропии. С этими результатами хорошо согласуются соответствующие значения, полученные Барроу и Шитцером [78]. Данные по спектрам комбинационного рассеяния, полученные Венкатесвараном [1531, 1532], Фогель-Хёглером [1543] и Вагнером [1563], а также данные инфракрасной спектроскопии, полученные Томпсо-

ном и Миллером [1491], Томпсоном и Скерреттом [1492], Троттером и Томпсоном [1517], использованы Скоттом и Мак-Каллохом [1316] для определения частот основных колебаний. Структурные данные и барьеры внутреннего вращения, полученные методом микроволновой спектроскопии, опубликованы Солименом и Дейли [1393], Килбом [749], Коимой [789] и Коимой и Нисикавой [790]. Скотт и Мак-Каллох использовали также данные последних из упомянутых авторов для определения произведения главных моментов инерции $35,95 \cdot 10^{-117} \text{ г}^3 \cdot \text{см}^6$, приведенного момента внутреннего вращения $1,853 \cdot 10^{-40} \text{ г} \cdot \text{см}^2$ и барьера внутреннего вращения $(1,270 \pm 0,003 \text{ ккал/моль})$. Результаты измерения колебательного спектра, полученные Томпсоном и Миллером [1491], подтверждают ранее сделанные отнесения. Расчетное значение энтропии метантиола в состоянии идеального газа, равное $60,17 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}$ при $279,12^\circ \text{K}$, получено без учета эффектов ангармоничности колебаний. Значения термодинамических функций взяты из работы Скотта и Мак-Каллоха [1316]. Гуд, Лейцина и Мак-Каллох [511] определили ΔH_c и ΔH_v на основании этих величин рассчитали $\Delta H_f^\circ(l) = -11,18 \pm 0,13 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_f^\circ(g) = -5,49 \pm 0,14 \text{ ккал/моль}$ с учетом нового значения ΔH_f° для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). Эти результаты приняты вместо значения, полученного ранее Томпсоном [1495], которое нельзя считать достоверным.

№ 891. Этантиол, $\text{C}_2\text{H}_5\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 62,134

$T, ^\circ\text{K}$	кал/(моль \cdot K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	17,37	70,77	70,77	0,00	-11,02	-1,12	0,818
300	17,44	70,88	70,78	0,04	-11,04	-1,06	0,770
400	21,08	76,41	71,50	1,97	-12,79	2,48	-1,356
500	24,36	81,47	73,00	4,24	-14,19	6,47	-2,826
600	27,21	86,17	74,81	6,82	-15,32	10,70	-3,899
700	29,68	90,55	76,75	9,67	-16,22	15,14	-4,727
800	31,83	94,66	78,73	12,75	-30,01	18,40	-5,027
900	33,71	98,52	80,72	16,03	-30,27	24,47	-5,943
1000	35,38	102,16	82,68	19,48	-30,42	30,57	-6,681

Термодинамические свойства тщательно измерены Мак-Каллохом, Скоттом, Финке, Гроссом, Уильямсом, Пеннингтоном, Уаддингтоном и Хаффманом [962], а также Мак-Каллохом, Хаббардом, Фроу, Хоссенлопом и Уаддингтоном [958]. Получены следующие результаты: $T_m = 125,26^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 1,189 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 308,15^\circ \text{K}$, $\Delta H_v = 6,401 \text{ ккал/моль}$ при T_b , $S_{298}^\circ(l) = 49,48 \text{ кал/(моль} \cdot \text{K)}$,

$S_{298}^{\circ}(g) = 70,77$ ккал/(моль·°K), $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -17,60$ ккал/моль, $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -11,02$ ккал/моль и $C_p(l, 290-345^{\circ}K) = 19,22 + 0,030T$ [ккал/(моль·°K)]. Энтальпии образования исправлены с учетом нового значения ΔH_{298}° для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). В перечисленных выше работах приведены ссылки на более ранние, но менее точные исследования.

№ 892. 1-Пропантиол, C_3H_8S (состояние идеального газа).
Мол. вес 76,160

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	22,65	80,40	80,40	0,00	-16,22	0,52	-0,384
300	22,75	80,55	80,41	0,05	-16,25	0,63	-0,456
400	27,86	87,80	81,36	2,58	-18,33	6,51	-3,559
500	32,56	94,53	83,33	5,61	-20,00	12,92	-5,649
600	36,72	100,84	85,73	9,07	-21,32	19,63	-7,152
700	40,37	106,78	88,32	12,93	-22,34	26,57	-8,296
800	43,60	112,39	90,98	17,13	-36,17	32,34	-8,834
900	46,47	117,69	93,65	21,64	-36,40	40,92	-9,937
1000	49,01	122,72	96,31	26,42	-36,45	49,53	-10,823

Полные и достаточно точные данные о термодинамических свойствах опубликованы в работе Пеннингтона, Скотта, Финке, Мак-Каллоха, Мессерли, Хоссенлоппа и Уаддингтона [1136]. Представляют интерес следующие данные: $Tl = 142,09^{\circ}K$, $\Delta Hl = 0,9491$ ккал/моль, $Tm = 159,99^{\circ}K$, $\Delta Hm = 1,309$ ккал/моль, $\Delta Hv = 7,059$ ккал/моль при $Tb = 340,87^{\circ}K$, $S_{298}^{\circ}(l) = 57,96$ ккал/(моль·°K), $S_{298}^{\circ}(g) = 80,40$ ккал/(моль·°K) и $C_p(l, 270-320^{\circ}K) = 23,55 + 0,037T$ [ккал/(моль·°K)]. Хаббард и Уаддингтон [638] приводят результаты определения энтальпии сгорания, с использованием которых рассчитаны $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -23,87$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -16,22$ ккал/моль, исходя из значений, указанных Скоттом и Мак-Каллохом [1316], с учетом новой величины ΔH_{298}° для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). Ссылки на более ранние работы по изучению данного соединения приведены Пеннингтоном и др. [1136].

№ 893. 2-Пропантиол, C_3H_8S (состояние идеального газа).
Мол. вес 76,160

На основании полного и тщательного изучения термодинамических свойств Мак-Каллох, Финке, Скотт, Гросс, Мессерли, Пеннингтон и Уаддингтон [955] опубликовали следующие результаты: $Tm = 142,63^{\circ}K$, $\Delta Hm = 1,371$ ккал/моль, $Tb = 325,71^{\circ}K$ и при этой

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	22,94	77,51	77,51	0,00	-18,22	-0,61	0,451
300	23,04	77,66	77,52	0,05	-18,25	-0,51	0,370
400	28,35	85,03	78,48	2,62	-20,29	5,67	-3,095
500	33,06	91,87	80,49	5,70	-21,90	12,35	-5,396
600	37,02	98,26	82,92	9,21	-23,19	19,32	-7,036
700	40,38	104,22	85,54	13,08	-24,19	26,51	-8,277
800	43,26	109,81	88,23	17,27	-38,03	32,54	-8,888
900	45,74	115,05	90,92	21,72	-38,32	41,38	-10,048
1000	47,92	119,99	93,59	26,41	-38,46	50,25	-10,982

температуре $\Delta Hv = 6,670$ ккал/моль, $S_{298}^{\circ}(l) = 55,82$ ккал/(моль·°K), $S_{298}^{\circ}(g) = 77,51$ ккал/(моль·°K) и $C_p(l, 270-330^{\circ}K) = 22,85 + 0,40T$ [ккал/(моль·°K)]. Данные по давлению пара использованы в сочетании с экспериментальным значением энтропии для расчета термодинамических функций 2-пропантиола в состоянии идеального газа на основании результатов, полученных спектроскопическим методом. Подробное описание способа определения энтальпии сгорания приведено в работе Хаббарда и Уаддингтона [638]. Энтальпия образования $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -25,30$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -18,22$ ккал/моль рассчитаны с учетом нового значения ΔH_{298}° для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639).

№ 894. 1-Бутантиол, $C_4H_{10}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 90,186

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	28,24	89,68	89,68	0,00	-21,05	2,64	-1,934
300	28,37	89,86	89,69	0,06	-21,09	2,78	-2,027
400	34,95	98,93	90,88	3,23	-23,48	11,05	-6,038
500	41,07	107,40	93,34	7,03	-25,37	19,91	-8,702
600	46,54	115,38	96,36	11,42	-26,86	29,11	-10,602
700	51,37	122,93	99,62	16,32	-27,96	38,56	-12,037
800	55,68	130,07	102,98	21,68	-41,80	46,84	-12,795
900	59,54	136,86	106,37	27,41	-41,97	57,94	-14,068
1000	62,95	143,31	109,75	33,57	-41,90	69,04	-15,089

Полное термодинамическое исследование выполнено Скоттом, Финке, Мак-Каллохом, Мессерли, Пеннингтоном, Хоссенлопом и Уаддингтоном [1309]. Получены следующие результаты: $T_m = 157,46^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 2,500 \text{ ккал/моль}$, $\Delta H_v = 7,702 \text{ ккал/моль}$ при $T_b = 371,61^\circ \text{K}$, $S_{298}^\circ(l) = 65,96 \text{ кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$, $S_{298}^\circ(g) = 89,68 \text{ кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$, $C_p(l, 270-320^\circ \text{K}) = 27,5 + 0,046T \text{ [кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)]}$, $\Delta H_f^{298^\circ}(l) = -29,79 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_f^{298^\circ}(g) = -21,05 \text{ ккал/моль}$ с учетом нового значения $\Delta H_f^{298^\circ}$ для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). Эти теплоты образования подтверждаются данными Хаббарда, Гуда и Уаддингтона [631], согласно которым $\Delta H_f^{298^\circ}(l) = -29,77 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_f^{298^\circ}(g) = -21,03 \text{ ккал/моль}$ с учетом нового значения энтальпии образования H_2SO_4 (водн.). Термодинамические свойства рассчитаны по усовершенствованному методу инкрементов на основании экспериментальных величин теплоемкости пара и данных для соединений серы, имеющих низкий молекулярный вес.

№ 895. 2-Бутантиол, $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 90,186

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	28,51	87,65	87,65	0,00	-23,00	1,29	-0,948
300	28,64	87,83	87,66	0,06	-23,04	1,44	-1,050
400	35,38	97,01	88,86	3,27	-25,39	9,91	-5,413
500	41,37	105,57	91,36	7,11	-27,25	18,95	-8,284
600	46,42	113,57	94,40	11,51	-28,72	28,33	-10,320
700	50,68	121,05	97,68	16,37	-29,86	37,97	-11,853
800	54,29	128,06	101,04	21,62	-43,80	46,44	-12,686
900	57,37	134,64	104,41	27,21	-44,16	57,75	-14,023
1000	60,02	140,82	107,75	33,08	-44,34	69,09	-15,100

На основании полного изучения термодинамических свойств Мак-Каллох, Финке, Скотт, Пеннингтон, Гросс, Мессерли и Уаддингтон [956] опубликовали следующие данные: $T_m = 133,02^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 1,548 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 358,13^\circ \text{K}$ и при этой температуре $\Delta H_v = 7,312 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}^\circ(l) = 64,87 \text{ кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$, $S_{298}^\circ(g) = 87,65 \text{ кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$, $C_p(l, 270-310^\circ \text{K}) = 27,51 + 0,045T \text{ [кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)]}$, $\Delta H_f^{298^\circ}(l) = -31,13 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_f^{298^\circ}(g) = -23,00 \text{ ккал/моль}$ с учетом нового значения $\Delta H_f^{298^\circ}$ для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). Хаббард, Гуд и Уаддингтон [631] подтвердили эти результаты (после соответствующего приведения они получили $\Delta H_f^{298^\circ}(l) = -31,27 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_f^{298^\circ}(g) =$

$-23,14 \text{ ккал/моль}$). Термодинамические функции для состояния идеального газа рассчитаны из спектроскопических данных с использованием соответствующих параметров, подобранных таким образом, чтобы отвечать экспериментальным результатам.

№ 896. 2-Метил-1-пропантиол, $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 90,186

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	28,28	86,73	86,73	0,00	-23,24	1,33	-0,973
300	28,41	86,91	86,74	0,06	-23,28	1,48	-1,076
400	35,31	96,05	87,94	3,25	-25,64	10,04	-5,485
500	41,30	104,59	90,42	7,09	-27,51	19,18	-8,384
600	46,26	112,57	93,46	11,48	-28,99	28,66	-10,439
700	50,35	120,02	96,73	16,31	-30,16	38,39	-11,986
800	53,77	126,97	100,08	21,52	-44,14	46,97	-12,832
900	56,68	133,48	103,43	27,05	-44,56	58,40	-14,180
1000	59,17	139,58	106,74	32,84	-44,81	69,86	-15,267

Полные термодинамические данные опубликованы Скоттом, Мак-Каллохом, Мессерли, Пеннингтоном, Хоссенлопом, Финке и Уаддингтоном [1320]. Получены следующие результаты: $T_m = 128,31^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 1,191 \text{ ккал/моль}$, $T_b = 361,64^\circ \text{K}$ и при этой температуре $\Delta H_v = 7,412 \text{ ккал/моль}$, $S_{298}^\circ(l) = 63,66 \text{ кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$, $S_{298}^\circ(g) = 86,73 \text{ кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)}$ и $C_p(l, 270-350^\circ \text{K}) = 26,26 + 0,050T \text{ [кал/(моль}\cdot^\circ\text{K)]}$. Энтальпия сгорания, измеренная методом вращающейся калориметрической бомбы, приводит к значениям $\Delta H_f^{298^\circ}(l) = -31,54 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_f^{298^\circ}(g) = -23,24 \text{ ккал/моль}$ с учетом нового значения $\Delta H_f^{298^\circ}$ для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). Эти данные подтверждаются результатами Хаббарда, Гуда и Уаддингтона [631], согласно которым $\Delta H_f^{298^\circ}(l) = -31,52 \text{ ккал/моль}$ и $\Delta H_f^{298^\circ}(g) = -23,22 \text{ ккал/моль}$ с учетом нового значения $\Delta H_f^{298^\circ}$ для H_2SO_4 (водн.).

№ 897. 2-Метил-2-пропантиол, $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 90,186

Полные термические данные, полученные Мак-Каллохом, Скоттом, Финке, Хаббардом, Гроссом, Катцем, Пеннингтоном, Мессерли и Уаддингтоном [963], использованы для расчета термодинамических свойств идеального газа. Наблюдается три перехода в твердом

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	28,91	80,79	80,79	0,00	-26,17	0,17	-1,124
300	29,04	80,97	80,80	0,06	-26,21	0,33	-0,246
400	36,13	90,32	82,02	3,32	-28,50	9,47	-5,176
500	42,39	99,07	84,57	7,26	-30,27	19,18	-8,383
600	47,60	107,28	87,68	11,77	-31,63	29,20	-10,635
700	51,92	114,95	91,03	16,75	-32,65	39,45	-12,316
800	55,53	122,12	94,47	22,12	-46,47	48,53	-13,256
900	58,61	128,84	97,92	27,84	-46,70	60,42	-14,672
1000	61,24	135,16	101,33	33,83	-46,75	72,34	-15,809

состоянии: $T_m = 274,41^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 0,593$ ккал/моль, $T_b = 337,37^\circ \text{K}$ и при этой температуре $\Delta H_v = 6,797$ ккал/моль, $S_{298}^\circ(l) = 58,90$ кал/(моль·°K), $S_{298}^\circ(g) = 80,79$ кал/(моль·°K) и $C_p(l, 280-330^\circ \text{K}) = 27,24 + 0,049T$ [кал/(моль·°K)]. Хаббард, Гуд и Уаддингтон [631] опубликовали данные по энтальпии сгорания, приводящие к значениям $\Delta H_{f_{298}}^\circ(l) = -33,56$ ккал/моль и $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -26,17$ ккал/моль с учетом нового значения $\Delta H_{f_{298}}^\circ$ для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). Менее точное значение Франклина и Лампкина [440] согласуется в пределах ошибки эксперимента.

№ 898. 2-Метил-2-бутантол, $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 104,212

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	34,30	92,48	92,48	0,00	-30,36	2,20	-1,616
300	34,46	92,70	92,49	0,07	-30,40	2,40	-1,751
400	42,79	103,77	93,94	3,94	-33,03	13,69	-7,481
500	50,28	114,15	96,95	8,60	-35,09	25,62	-11,197
600	56,58	123,89	100,64	13,95	-36,69	37,91	-13,899
700	61,84	133,01	104,62	19,88	-37,89	50,47	-15,758
800	66,28	141,57	108,71	26,29	-51,84	61,88	-16,905
900	70,05	149,60	112,81	33,11	-52,15	76,13	-18,485
1000	73,30	157,15	116,87	40,29	-52,25	90,40	-19,755

Термодинамические свойства определены Скоттом, Доуслином, Финке, Хаббардом, Мессерли, Хоссенлопом и Мак-Каллохом [1299]. По сообщению этих исследователей $T_t = 159,1^\circ \text{K}$, $\Delta H_t =$

$= 1,9071$ ккал/моль, $T_m = 169,36^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 145,4$ ккал/моль, $T_b = 372,28^\circ \text{K}$ и при этой температуре $\Delta H_v = 7,497$ ккал/моль, $S_{298}^\circ(l) = 69,34$ кал/(моль·°K), $S_{298}^\circ(g) = 92,48$ кал/(моль·°K) и $C_p(l, 200-350^\circ \text{K}) = 53,373 - 0,14093T + 5,425 \cdot 10^{-4}T^2 - 4,6094 \cdot 10^{-7}T^3$ [кал/(моль·°K)]. Из данных калориметри сгорания эти исследователи определили $\Delta H_{f_{298}}^\circ(l) = -33,90$ ккал/моль и $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -30,36$ ккал/моль с учетом нового значения $\Delta H_{f_{298}}^\circ$ для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). Термодинамические функции для газообразного состояния были вычислены также из данных, полученных при изучении инфракрасных спектров кристаллической, твердой и газообразной фаз в сочетании с результатами, рассчитанными по уравнению состояния. Высоты барьеров приняты равными 1,5 ккал/моль для тиольной группы, 3,4 ккал/моль для метильной группы, входящей в состав этильной группы, и 5,0 ккал/моль для двух других метильных групп.

№ 899. 1-Пентантиол, $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 104,212

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Cp°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	33,75	99,28	99,28	0,00	-25,91	4,63	-3,392
300	33,91	99,49	99,29	0,07	-25,96	4,81	-3,507
400	41,93	110,36	100,71	3,86	-28,66	15,43	-8,431
500	49,36	120,53	103,67	8,44	-30,81	26,71	-11,675
600	55,92	130,12	107,29	13,71	-32,48	38,37	-13,977
700	61,69	139,19	111,20	19,59	-33,72	50,32	-15,709
800	66,78	147,76	115,24	26,02	-47,66	61,11	-16,693
900	71,33	155,90	119,31	32,93	-47,88	74,73	-18,145
1000	75,32	163,62	123,36	40,27	-47,82	88,36	-19,310

Данные, характеризующие низкотемпературные свойства пара 1-пентантиола, получены Финке, Скоттом, Гроссом, Уаддингтоном и Хаффманом [425]. Эти исследователи установили, что $T_m = 197,45^\circ \text{K}$, $\Delta H_m = 4,190$ ккал/моль, $\Delta H_v = 8,4$ ккал/моль при $T_b = 399,79^\circ \text{K}$, $S_{298}^\circ(l) = 74,18$ кал/(моль·°K), $S_{298}^\circ(g) = 99,28$ кал/(моль·°K) и $C_p(l, 270-320^\circ \text{K}) = 31,2 + 0,057T$ [кал/(моль·°K)]. Результаты определения энтальпии сгорания, полученные Саннером [1443], а также Хаббардом, Катцем и Уаддингтоном [633] (см. Мак-Каллох и Гуд [957]) хорошо согласуются между собой и приводят к значениям $\Delta H_{f_{298}}^\circ(l) = -35,74$ ккал/моль и $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -25,91$ ккал/моль после приведения в соответствие с новым значением $\Delta H_{f_{298}}^\circ$ для H_2SO_4 (водн.)

(см. стр. 639). Термодинамические функции для состояния идеального газа рассчитаны Скоттом и Мак-Каллохом [1316] по усовершенствованному методу инкрементов, в котором вычисленные величины C_p и S эмпирически приводились в соответствие с данными калориметрического изучения паровой фазы, полученными Финке, Хоссенлопом и Бергом [422]. По сообщению этих исследователей $\Delta H_f^\circ = 9,014$ ккал/моль при $356,08^\circ\text{K}$. Айвазов, Петров, Хайруллина и Япрынцева [5] отобрали значения $T_m = 197,45^\circ\text{K}$ и $T_b = 399,79^\circ\text{K}$.

№ 900. 1-Гексантиол, $\text{C}_6\text{H}_{14}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 118,238

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	39,21	108,58	108,58	0,00	-30,83	6,65	-4,871
300	39,40	108,83	108,59	0,08	-30,88	6,87	-5,008
400	48,87	121,48	110,25	4,50	-33,90	19,87	-10,858
500	57,60	133,34	113,69	9,83	-36,31	33,60	-14,687
600	65,26	144,53	117,91	15,98	-38,18	47,76	-17,997
700	71,96	155,11	122,47	22,85	-39,57	62,23	-19,439
800	77,84	165,11	127,18	30,34	-53,60	75,57	-20,633
900	83,07	174,58	131,93	38,39	-53,88	91,74	-22,277
1000	87,65	183,58	136,65	46,94	-53,84	107,94	-23,588

Термодинамические функции рассчитаны Скоттом и Мак-Каллохом [1316] по методу метиленовых инкрементов. Финке, Гатри, Тодд, Мессерли и Мак-Каллох [421] измеряли C_s ($12-370^\circ\text{K}$) и ΔH_m (приблизительно при 193°K), но полученные результаты не были опубликованы. Согласно Моррису, Лейнаму, Хелму, Хайнесу, Куку и Боллу [1028], $T_m = 192,66^\circ\text{K}$ и $T_b = 425,75^\circ\text{K}$. По сообщению Гуда и Де Пратера [507] $\Delta H_f^\circ(l) = -41,97$ ккал/моль и $\Delta H_f^\circ(g) = -30,83$ ккал/моль с учетом нового значения ΔH_f° для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639).

№ 901. 1-Гептантиол, $\text{C}_7\text{H}_{16}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 132,264

Термодинамические функции рассчитаны Скоттом и Мак-Каллохом [1316] по методу метиленовых инкрементов. Величины C_s ($13-359^\circ\text{K}$) и ΔH_m (приблизительно при 230°K) измеряли Финке, Гатри, Тодд, Мессерли и Мак-Каллох [421], однако полученные

°K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	44,68	117,89	117,89	0,00	-35,76	8,65	-6,341
300	44,90	118,17	117,90	0,09	-35,82	8,92	-6,500
400	55,81	132,60	119,79	5,13	-39,16	24,30	-13,276
500	65,85	146,16	123,72	11,22	-41,82	40,48	-17,694
600	74,60	158,96	128,54	18,26	-43,89	57,14	-20,811
700	82,24	171,04	133,75	26,11	-45,42	74,14	-23,145
800	88,91	182,47	139,14	34,67	-59,55	90,01	-24,588
900	94,82	193,29	144,56	43,86	-59,89	108,74	-26,404
1000	99,98	203,55	149,95	53,61	-59,86	127,49	-27,861

ми результаты не были опубликованы. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 230,1^\circ\text{K}$ и $T_b = 449,4^\circ\text{K}$. Согласно Моррису, Лейнаму, Хелму, Хайнесу, Куку и Боллу [1028], температура плавления и температура кипения равны соответственно $229,88$ и $450,0^\circ\text{K}$. Гуд и Де Пратер [507] установили, что $\Delta H_f^\circ(l) = -47,85$ ккал/моль и $\Delta H_f^\circ(g) = -35,76$ ккал/моль с учетом нового значения ΔH_f° для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639).

№ 902. 1-Октантиол, $\text{C}_8\text{H}_{18}\text{S}$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 146,290

°K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	50,14	127,20	127,20	0,00	-40,68	10,67	-7,819
300	50,39	127,52	127,21	0,10	-40,75	10,98	-7,999
400	62,75	143,73	129,33	5,76	-44,40	28,74	-15,701
500	74,09	158,98	133,75	12,62	-47,32	47,37	-20,704
600	83,94	173,38	139,17	20,53	-49,59	66,52	-24,230
700	92,51	186,97	145,03	29,36	-51,26	86,05	-26,864
800	99,97	199,82	151,09	38,99	-65,49	104,46	-28,537
900	106,56	211,99	157,18	49,33	-65,89	125,75	-30,534
1000	112,31	223,52	163,25	60,28	-65,88	147,06	-32,138

Термодинамические функции рассчитаны Скоттом и Мак-Каллохом [1316] по методу метиленовых инкрементов. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 224,0^\circ\text{K}$ и $T_b = 472,2^\circ\text{K}$.

№ 903. 1-Нонантиол, $C_9H_{20}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 160,316

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	55,61	136,51	136,51	0,00	-45,61	12,67	-9,289
300	55,89	136,86	136,52	0,11	-45,68	13,03	-9,491
400	69,69	154,86	138,88	6,40	-49,66	33,16	-18,119
500	82,34	171,80	143,78	14,01	-52,83	54,25	-23,711
600	93,28	187,80	149,80	22,81	-55,30	75,90	-27,644
700	102,79	202,91	156,32	32,62	-57,11	97,95	-30,579
800	111,04	217,18	163,04	43,32	-71,43	118,90	-32,482
900	118,31	230,69	169,81	54,79	-71,89	142,74	-34,661
1000	124,65	243,49	176,55	66,95	-71,90	166,61	-36,411

Термодинамические функции рассчитаны Скоттом и Мак-Каллохом [1316] по методу метиленовых инкрементов. Значения $T_m = 253,0^\circ K$ и $T_b = 493,4^\circ K$ отобраны Россини, Питцером, Арнеттом, Брауном и Пиментелом [1248].

№ 904. 1-Декантиол, $C_{10}H_{22}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 174,342

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kf
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	61,08	145,82	145,82	0,00	-50,54	14,68	-10,759
300	61,38	146,20	145,83	0,12	-50,62	15,08	-10,983
400	76,63	165,98	148,42	7,03	-54,91	37,59	-20,538
500	90,59	184,62	153,81	15,41	-58,34	61,13	-26,717
600	102,63	202,22	160,43	25,08	-61,00	85,27	-31,058
700	113,07	218,84	167,60	35,88	-62,96	109,85	-34,295
800	122,10	234,54	174,99	47,65	-77,38	133,35	-36,427
900	130,06	249,39	182,44	60,26	-77,89	159,74	-38,788
1000	136,98	263,46	189,85	73,62	-77,92	186,17	-40,681

Скотт и Мак-Каллох [1316] рассчитали термодинамические функции по методу инкрементов. Финке, Гатри, Тодд, Мессерли и Мак-Каллох [421] определили C_s (12-363° K) и ΔH_m (приблизительно при 248° K), однако полученные результаты не опубликованы. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 247^\circ K$ и $T_b = 513,8^\circ K$. Определение $\Delta H_c(l)$ выполнено

удом и Де Пратером [507]; эти исследователи сообщили, что $\Delta H_{298}^{\circ}(l) = -66,40$ ккал/моль и $\Delta H_{298}^{\circ}(g) = -50,54$ ккал/моль с учетом нового значения ΔH_{298}° для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639).

№ 905. 1-Ундекантиол, $C_{11}H_{24}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 188,368

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	66,54	155,13	155,13	0,00	-55,46	16,69	-12,236
300	66,88	155,55	155,14	0,13	-55,55	17,14	-12,482
400	83,57	177,11	157,96	7,66	-60,16	42,03	-22,962
500	98,83	197,43	163,84	16,80	-63,84	68,01	-29,728
600	111,97	216,64	171,06	27,36	-66,70	94,66	-34,476
700	123,34	234,78	178,88	39,13	-68,80	121,76	-38,013
800	133,17	251,90	186,95	51,97	-83,32	147,80	-40,375
900	141,80	268,09	195,07	65,73	-83,89	176,74	-42,917
1000	149,31	283,43	203,15	80,29	-83,94	205,73	-44,960

Термодинамические функции рассчитаны Скоттом и Мак-Каллохом [1316] по методу метиленовых инкрементов. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 270^\circ K$ и $T_b = 532,6^\circ K$.

№ 906. 1-Додекантиол, $C_{12}H_{26}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 202,394

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	-(G°-H° ₂₉₈)/T	H°-H° ₂₉₈	ΔHf°	ΔGf°	
298	72,04	164,44	164,44	0,00	-60,39	18,70	-13,706
300	72,37	164,89	164,45	0,14	-60,48	19,18	-13,974
400	90,51	188,23	167,51	8,30	-65,41	46,46	-25,381
500	107,08	210,25	173,87	18,19	-69,35	74,89	-32,734
600	121,31	231,06	181,69	29,63	-72,41	104,03	-37,891
700	133,62	250,71	190,16	42,39	-74,65	133,66	-41,729
800	144,23	269,26	198,90	56,29	-89,27	162,24	-44,320
900	153,55	286,80	207,70	71,19	-89,90	193,74	-47,044
1000	161,65	303,40	216,45	86,96	-89,96	225,29	-49,234

Термодинамические функции рассчитаны Скоттом и Мак-Каллохом [1316] по методу метиленовых инкрементов. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 266^\circ K$ и $T_b = 550,4^\circ K$.

№ 907. 1-Тридекантиол, $C_{13}H_{28}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 216,420

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔHf°	ΔGf°	
298	77,47	173,75	173,75	0,00	-65,31	20,71	-15,483
300	77,87	174,24	173,76	0,15	-65,41	21,24	-15,473
400	97,45	199,36	177,05	8,93	-70,66	50,89	-27,805
500	115,32	223,07	183,90	19,59	-74,85	81,78	-35,745
600	130,65	245,48	192,32	31,90	-78,11	113,41	-41,309
700	143,89	266,64	201,44	45,65	-80,49	145,57	-45,448
800	155,30	286,62	210,85	60,62	-95,21	176,70	-48,268
900	165,29	305,50	220,33	76,66	-95,89	210,75	-51,174
1000	173,98	323,37	229,75	93,63	-95,98	244,85	-53,510

Термодинамические функции рассчитаны Скоттом и Мак-Каллохом [1316] по методу метиленовых инкрементов. Россини, Питпер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 282^{\circ}K$ и $T_b = 567,2^{\circ}K$.

№ 908. 1-Тетрадекантиол, $C_{14}H_{30}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 230,446

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔHf°	ΔGf°	
298	82,94	183,06	183,06	0,00	-70,24	22,72	-16,654
300	83,36	183,58	183,07	0,16	-70,35	23,29	-16,965
400	104,39	210,48	186,59	9,56	-75,91	55,32	-30,224
500	123,57	235,89	193,94	20,98	-80,37	88,66	-38,751
600	139,99	259,91	202,95	34,18	-83,82	122,79	-44,723
700	154,17	282,58	212,72	48,90	-86,35	157,47	-49,163
800	166,36	303,97	222,80	64,94	-101,16	191,14	-52,214
900	177,04	324,20	232,96	82,12	-101,90	227,74	-55,301
1000	186,31	343,34	243,05	100,30	-102,00	264,41	-57,783

Термодинамические функции рассчитаны Скоттом и Мак-Каллохом [1316] по методу метиленовых инкрементов. Россини, Питпер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 279^{\circ}K$ и $T_b = 583^{\circ}K$.

№ 909. 1-Пентадекантиол, $C_{15}H_{32}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 244,472

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔHf°	ΔGf°	
298	88,41	192,37	192,37	0,00	-75,17	24,73	-18,124
300	88,86	192,92	192,38	0,17	-75,28	25,34	-18,457
400	111,34	221,61	196,14	10,20	-81,17	59,75	-32,643
500	131,82	248,71	203,97	22,38	-85,87	95,54	-41,757
600	149,34	274,33	213,58	36,46	-89,52	132,16	-48,138
700	164,45	298,51	224,00	52,16	-92,19	169,37	-52,878
800	177,43	321,34	234,76	69,27	-107,11	205,58	-56,159
900	188,79	342,91	245,59	87,59	-107,90	244,74	-59,428
1000	198,65	363,32	256,35	106,98	-108,02	283,96	-62,056

Термодинамические функции рассчитаны Скоттом и Мак-Каллохом [1316] по методу метиленовых инкрементов. Россини, Питпер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 291^{\circ}K$ и $T_b = 598^{\circ}K$.

№ 910. 1-Гексадекантиол, $C_{16}H_{34}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 258,498

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	Ср°	S°	$-(G^{\circ}-H_{298}^{\circ})/T$	$H^{\circ}-H_{298}^{\circ}$	ΔHf°	ΔGf°	
298	93,87	201,67	201,67	0,00	-80,09	26,74	-19,603
300	94,35	202,26	201,68	0,18	-80,21	27,40	-19,959
400	118,28	232,73	205,67	10,83	-86,41	64,19	-35,069
500	140,06	261,52	213,99	23,77	-91,38	102,43	-44,770
600	158,68	288,74	224,20	38,73	-95,22	141,55	-51,558
700	174,72	314,44	235,27	55,42	-98,04	181,29	-56,599
800	188,49	338,68	246,70	73,59	-113,05	220,04	-60,109
900	200,53	361,60	258,20	93,06	-113,90	261,75	-63,560
1000	210,98	383,28	269,64	113,65	-114,04	303,54	-66,334

Термодинамические функции рассчитаны Скоттом и Мак-Каллохом [1316] по методу метиленовых инкрементов. Россини, Питпер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 291^{\circ}K$ и $T_b = 612^{\circ}K$.

№ 911. 1-Гептадекантиол, $C_{17}H_{36}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 272,524

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	99,34	210,98	210,98	0,00	-85,02	28,75	-21,073
300	99,85	211,60	210,99	0,19	-85,15	29,45	-21,451
400	125,22	243,86	215,21	11,46	-91,67	68,62	-37,488
500	148,31	274,34	224,02	25,17	-96,89	109,31	-47,776
600	168,02	303,16	234,83	41,01	-100,93	150,93	-54,972
700	185,00	330,37	246,55	58,68	-103,89	193,19	-60,315
800	199,56	356,04	258,65	77,92	-119,00	234,48	-64,054
900	212,28	380,30	270,83	98,53	-119,90	278,75	-67,686
1000	223,31	403,25	282,94	120,32	-120,06	323,09	-70,608

Термодинамические функции рассчитаны Скоттом и Мак-Каллохом [1316] по методу метиленовых инкрементов. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 300^\circ K$ и $T_b = 626^\circ K$.

№ 912. 1-Октадекантиол, $C_{18}H_{38}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 286,550

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	104,80	220,29	220,29	0,00	-89,94	30,77	-22,551
300	105,34	220,94	220,30	0,20	-90,07	31,50	-22,950
400	132,16	254,98	224,76	12,09	-96,91	73,05	-39,912
500	156,55	287,16	234,05	26,56	-102,39	116,20	-50,787
600	177,36	317,58	245,46	43,28	-106,63	160,31	-58,390
700	195,27	346,30	257,83	61,93	-109,73	205,11	-64,034
800	210,62	373,40	270,60	82,24	-124,94	248,94	-68,003
900	224,02	399,00	283,46	103,99	-125,90	295,76	-71,816
1000	235,64	423,22	296,24	126,99	-126,08	342,66	-74,884

Термодинамические функции рассчитаны Скоттом и Мак-Каллохом [1316] по методу метиленовых инкрементов. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 301^\circ K$ и $T_b = 639^\circ K$.

№ 913. 1-Нонадекантиол, $C_{19}H_{40}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 300,576

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	110,37	229,60	229,60	0,00	-94,87	32,77	-24,021
300	110,84	230,29	229,61	0,21	-95,01	33,55	-24,442
400	139,10	266,11	234,30	12,73	-102,17	77,48	-42,331
500	164,80	299,98	244,08	27,95	-107,90	123,08	-53,793
600	186,70	332,01	256,09	45,56	-112,34	169,69	-61,805
700	205,55	362,24	269,12	65,19	-115,58	217,01	-67,749
800	221,69	390,76	282,56	86,57	-130,88	263,38	-71,948
900	235,77	417,70	296,09	109,46	-131,91	312,75	-75,943
1000	247,98	443,19	309,54	133,66	-132,10	362,21	-79,157

Термодинамические функции рассчитаны Скоттом и Мак-Каллохом [1316] по методу метиленовых инкрементов. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 307^\circ K$ и $T_b = 651^\circ K$.

№ 914. 1-Эйкозантиол, $C_{20}H_{42}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 314,602

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	115,74	238,91	238,91	0,00	-99,80	34,78	-25,491
300	116,33	239,63	238,92	0,22	-99,95	35,60	-25,934
400	146,04	277,23	243,84	13,36	-107,42	81,91	-44,749
500	173,05	312,80	254,11	29,35	-113,41	129,95	-56,800
600	196,05	346,43	266,72	47,83	-118,04	179,06	-65,219
700	215,83	378,17	280,40	68,45	-121,43	228,91	-71,465
800	232,75	408,12	294,51	90,90	-136,83	277,82	-75,893
900	247,52	436,41	308,72	114,93	-137,91	329,75	-80,070
1000	260,31	463,17	322,84	140,33	-138,12	381,77	-83,431

Термодинамические функции рассчитаны Скоттом и Мак-Каллохом [1316] по методу метиленовых инкрементов. Россини, Питцер, Арнетт, Браун и Пиментел [1248] отобрали значения $T_m = 310^\circ K$ и $T_b = 662^\circ K$.

Циклопентантиолы. Таблицы для состояния идеального газа

№ 915. Циклопентантиол, $C_5H_{10}S$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 102,196

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	25,79	86,38	86,38	0,00	-11,45	13,63	-9,989
300	25,94	86,54	86,39	0,05	-11,50	13,78	-10,039
400	34,53	95,21	87,51	3,08	-14,27	22,58	-12,337
500	42,20	103,76	89,91	6,93	-16,45	32,05	-14,010
600	48,65	112,04	92,91	11,48	-18,14	41,92	-15,267
700	54,05	119,95	96,21	16,62	-19,43	52,06	-16,233
800	58,61	127,48	99,65	22,26	-33,44	61,06	-16,681
900	62,51	134,61	103,15	28,32	-33,81	72,91	-17,704
1000	65,84	141,37	106,63	34,75	-33,94	84,78	-18,528

Берг, Скотт, Хаббард, Тодд, Мессерли, Хоссенлопп, Осборн, Доуслин и Мак-Каллох [111] изучали термические и термохимические свойства циклопентантиола. Этими исследователями получены следующие результаты: $T_m = 155,39^\circ K$, $\Delta H_m = 1,872$ ккал/моль, $T_b = 132,16^\circ K$ и при этой температуре $\Delta H_v = 8,443$ ккал/моль, $S_{298}^\circ(l) = 61,39$ кал/(моль·°K), $S_{298}^\circ(g) = 86,38$ кал/(моль·°K) и $C_p(l, 162-366^\circ K) = 55,249 - 0,24225T + 8,8181 \cdot 10^{-4}T^2 - 8,2702 \cdot 10^{-7}T^3$ [кал/(моль·°K)]. Данные калориметрии сгорания, полученные этими авторами, приводят к величинам $\Delta H_{f_{298}}^\circ(l) = -21,35$ ккал/моль и $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = -11,45$ ккал/моль с учетом нового значения $\Delta H_{f_{298}}^\circ$ для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). Термодинамические функции рассчитаны также на основании всех доступных данных по спектрам комбинационного рассеяния, инфракрасным спектрам и численным значениям молекулярных структурных постоянных.

Потенциальный барьер внутреннего вращения тиольной группы (1,2 ккал/моль), потенциальный барьер псевдообращения пятичленного кольца (равный нулю, что соответствует свободному вращению), эффективный момент инерции для этого псевдообращения ($18,9 \cdot 10^{-40}$ г·см²) и параметры для эмпирического уравнения ангармоничности подбирались таким образом, чтобы они находились в соответствии с экспериментальными значениями теплоемкости и энтропии.

Ароматические тиолы. Таблицы для состояния идеального газа

№ 916. Бензолтиол, C_6H_6S (состояние идеального газа).
Мол. вес 110,174

T, °K	кал/(моль·°K)			ккал/моль			lg Kp
	C_p°	S°	$-(G^\circ - H_{298}^\circ)/T$	$H^\circ - H_{298}^\circ$	ΔH_f°	ΔG_f°	
298	25,07	80,51	80,51	0,00	26,66	35,28	-25,861
300	25,22	80,67	80,52	0,05	26,63	35,33	-25,740
400	32,76	88,99	81,60	2,96	24,88	38,45	-21,007
500	39,07	97,00	83,88	6,56	23,54	42,00	-18,359
600	44,13	104,58	86,71	10,73	22,48	45,79	-16,679
700	48,23	111,70	89,78	15,35	21,66	49,78	-15,540
800	51,59	118,37	92,94	20,35	7,95	52,56	-14,359
900	54,41	124,61	96,11	25,65	7,76	58,16	-14,121
1000	56,79	130,47	99,26	31,22	7,70	63,76	-13,935

Полные термодинамические свойства приведены в работе Скотта, Мак-Каллоха, Хаббарда, Мессерли, Хоссенлоппа, Фроу и Уаддингтона [1319]. Этими исследователями получены следующие результаты: $T_m = 258,26^\circ K$, $\Delta H_m = 2,736$ ккал/моль, $T_b = 442,29^\circ K$ и при этой температуре $\Delta H_v = 9,53$ ккал/моль, $S_{298}^\circ(l) = 53,25$ кал/(моль·°K), $S_{298}^\circ(g) = 80,51$ кал/(моль·°K) и $C_p(l, 300-370^\circ K) = 27,65 + 0,46T$ [кал/(моль·°K)]. Энтальпия разования определена по методу вращающейся калориметрической бомбы и равна $\Delta H_{f_{298}}^\circ(l) = 15,27$ ккал/моль и $\Delta H_{f_{298}}^\circ(g) = 26,66$ ккал/моль с учетом нового значения $\Delta H_{f_{298}}^\circ$ для H_2SO_4 (водн.) (см. стр. 639). С этими данными удовлетворительно согласуются величины теплоемкости при низкой температуре и энтропия, рассчитанная Парксом, Тоддом и Муром [1118].

Другие органические соединения серы. Таблицы для состояния идеального газа

№ 917. Изотиоциановая кислота, $CHNS$ (состояние идеального газа).
Мол. вес 59,092

Термодинамические свойства изотиоциановой кислоты в состоянии идеального газа рассчитаны Мейклом и О'Хэйром [911] из молекулярных параметров, табулированных Саттоном [1449], и отенсивные колебаний по Баракагу, Легге и Паллину [72]. Величина энтальпии образования в газовой фазе, равная 30,5 ккал/моль, определена Вагманом, Эвансом, Халоу, Паркером, Бейли и Шаммом [1460], вероятно, на основе работы Бранденбурга [160].

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	11,09	59,28	59,28	0,00	30,50	26,98	-19,777
300	11,11	59,35	59,29	0,03	30,49	26,96	-19,639
400	12,71	62,78	59,74	1,22	29,65	25,85	-14,124
500	13,78	65,74	60,65	2,55	29,02	24,98	-10,917
600	14,57	68,32	61,72	3,97	28,49	24,22	-8,821
700	15,21	70,62	62,83	5,46	28,05	23,57	-7,358
800	15,74	72,68	63,93	7,00	14,59	21,69	-5,924
900	16,18	74,56	65,01	8,60	14,52	22,58	-5,483
1000	16,57	76,29	66,06	10,24	14,47	23,48	-5,131

№ 918. Тиоуксусная кислота, C₂H₄OS (состояние идеального газа).
Мол. вес 76,118

T, °K	ккал/(моль·°K)			ккал/моль			lg K _p
	C _p ^o	S ^o	-(G ^o -H ₂₉₈ ^o)/T	H ^o -H ₂₉₈ ^o	ΔH _f ^o	ΔG _f ^o	
298	19,33	74,86	74,86	0,00	-43,49	-36,81	26,979
300	19,41	74,98	74,87	0,04	-43,50	-36,77	26,782
400	22,25	80,97	75,66	2,13	-44,75	-34,39	18,787
500	24,61	86,19	77,26	4,47	-45,75	-31,68	13,846
600	26,72	90,87	79,14	7,04	-46,57	-28,79	10,485
700	28,68	95,14	81,13	9,81	-47,24	-25,74	8,037
800	30,41	99,09	83,13	12,77	-60,83	-23,91	6,530
900	31,39	102,72	85,11	15,86	-60,98	-19,28	4,681
1000	32,62	106,09	87,04	19,06	-61,09	-14,63	3,198

Мейкл и О'Хэйр [909] произвели статистическо-механические расчеты термодинамических функций для тиоуксусной кислоты в состоянии идеального газа на основании молекулярных параметров, табулированных Саттоном [1449], и исходя из допущения, что $\angle \text{HSC} = 100^\circ$ по аналогии с метантиолом и с использованной отнесения основных частот по Шеппарду [1342]. Барьер внутреннего вращения вокруг связи C—C принят равным 2,5 ккал/моль, т. е. такой же, как и барьер, отобранный Велтнером [1586] для уксусной кислоты; барьер внутреннего вращения вокруг связи C—S тот же, что и в тиолах ($1,5 \pm 0,2$ ккал/моль). Согласно расчетам Саннера [1447], $\Delta H_{f,298}^\circ(g) = -43,49$ ккал/моль и $\Delta H_{f,298}^\circ(l) = -52,39$ ккал/моль с учетом нового значения $\Delta H_{f,298}^\circ$ для H₂SO₄ (водн.) (см. стр. 639).

Термические и термодинамические данные при 298° K

Глава XIV

ОТОБРАННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ И ЭНТРОПИИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ПРИ 298° K

Введение

Была проделана большая работа по сбору и оценке огромной массы термодинамической информации, относящейся к органическим соединениям. Приблизительно до 1930 г. мы зависели от табличных данных Паркса и Хаффмана [1105] и Караша [744]. Начиная с 1930 г. и до 1965 г. в журнале «Кемикал абстрактс» систематически отбирались и публиковались соответствующие данные с указанием литературных источников. Эти ссылки впоследствии проверялись, а термодинамические данные для индивидуальных соединений выписывались и вносились в картотеку. Полнота и точность информации выверялась для углеводородов по данным, собранным Россинд, Питцером, Арлеттом, Брауном и Пиментелом [1248], для соединений серы по таблицам Скотта и Мак-Каллоха [1316], а общая полнота сведений выверялась по пересмотренным таблицам справочника Ландольта — Бернштейна, изданным Ауэром [52].

Для ограниченного числа соединений имелась достаточная информация, позволявшая рассчитать полные таблицы термодинамических данных для состояния идеального газа в том виде, в котором они приведены в гл. VIII — XIII. Значительно чаще, однако, удалось найти лишь отдельные данные, обычно энтальпии образования и (или) энтропии для конденсированного состояния при 298° K. Эти данные табулированы в настоящей главе. Здесь также повторно даны значения, относящиеся к 298° K, взятые из таблиц для состояния идеального газа, помещенных в гл. VIII — XIII. Таким образом, сводная таблица к настоящей главе [помещенная в конце книги (стр. I—CXXXVI)] служит одновременно указателем всех соединений, которые рассматриваются в данной книге.

Последовательность расположения соединений в таблицах соответствует системе обозначений Хилла [601], используемой журналом «Кемикал абстрактс». Символы атомов в химических формулах расположены в алфавитном порядке, исключение составляют углерод и водород. Углерод C всегда стоит на первом месте, непосредственно за ним идет H в случае присутствия водорода, а уже за H

следуют все другие элементы в обычном алфавитном порядке. Число атомов данного элемента в молекуле также определяет последовательность расположения соединений. Все формулы с одним атомом углерода предшествуют формулам с двумя атомами углерода; в ряду формул с одним атомом углерода сначала идут соединения с одним атомом водорода, затем с двумя и т. д. Применение этих правил иллюстрируется следующим рядом: CBrCl_3 , CCl_2O , CCl_4 , CHBrCl_2 , CHCl_3 , CH_2Cl_2 , CH_3Cl , CH_4 , Cl_4 , C_2Cl_4 , C_2Cl_6 , $\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_4$, C_2H_4 , C_2H_6 . «Неорганические» соединения (подобные тем, которые рассматривались в гл. VIII) помещены в начале сводной таблицы.

Рядом с эмпирической формулой в таблице дается название соединения, которое почти во всех случаях соответствует терминологии, принятой в «Кемикал абстрактс». Затем указывается физическое состояние данного соединения: газообразное состояние обозначается (G), жидкость — (L) и твердое кристаллическое состояние — (S). Молекулярные веса рассчитаны на основании атомных весов 1957 г.; исключение составляет углерод, для которого сохранено значение атомного веса 12,010. Отобранные значения энтальпии образования и абсолютной энтропии приведены в колонках, озаглавленных соответственно «Энтальпия» (ΔH_{298}°) и «Энтропия» (S_{298}°).

Сразу же после энтальпии образования и энтропии в скобках дается ссылка на литературу. Перед этим номером литературной ссылки поставлены буквы, которые служат для качественной и методологической классификации цитируемых работ. Если ссылке на энтальпию образования предшествует буква А, то это означает, что данная работа выполнена тщательно с указанием необходимых подробных сведений, благодаря чему результаты могут быть пересчитаны в соответствии с современными значениями констант, указанных в гл. VIII. Если ссылке на энтальпию образования предшествует буква В, значит указанные в данной работе результаты считаются достаточно точными, но не содержат указаний на важные детали, в работе не дается удовлетворительной характеристики исследуемого образца или же отмечается тот факт, что значения для других соединений, приводимые в той же работе, не находятся в хорошем согласии с результатами других исследований. Когда в цитируемой работе не указаны детали и сравнительные данные недоступны, перед ссылкой ставится буква С, показывающая, что окончательного суждения не вынесено. Таким образом, индекс С призван настораживать читателя. Если литературной ссылке предшествует буква Е, то это означает, что указанная в таблице величина энтальпии образования является оценочной. Многие из значений, отмеченных буквой Е, достаточно точные, например, приводимые Проzenом и Россини [1203]. Однако в общем случае ко всем оценочным значениям это не относится, и заинтересованному читателю следует обращаться к оригинальным работам.

Ссылке, в которой приводится значение энтропии, полученное из измерений теплоемкости, предшествует буква М, а ссылкам, в которых даются значения энтропии, вычисленные из спектроскопических данных, предшествует буква S. Перед ссылками, в которых указываются оценки, стоит буква Е. В соответствии с целями этой книги к оценочным значениям энтропии отнесены величины, рассчитанные из спектроскопических данных, которые, в свою очередь, в значительной мере являются оценочными.

В очень редких случаях значения энтальпии и энтропии получены из температурной зависимости измеренных констант равновесия. Такие данные отмечены буквой F перед соответствующей литературной ссылкой.

Соединения, для которых рассчитаны таблицы идеального газового состояния, приведенные в гл. VIII — XIII, имеют ссылки на номер соответствующей таблицы, которому предшествует буква T. Таблицы под номерами 1—48 помещены в гл. VIII, таблицы 101—476 в гл. IX, табл. 501—569 в гл. X, табл. 601—633 в гл. XI, табл. 701—786 в гл. XII, табл. 800—918 в гл. XIII. Источники данных читатель может найти в комментариях, которыми сопровождаются соответствующие таблицы для состояния идеального газа. В отдельных случаях выбор значений для конденсированной фазы был компромиссным и номер таблицы дан как ссылка на обсуждение (или) на источник данных.

Если в нескольких литературных источниках описывается работа по изучению того или иного соединения, то возможно несколько вариантов. Когда в одном из литературных источников указываются данные, отличающиеся явно более высокой точностью, то дается ссылка на этот источник. В тех случаях, когда источники качественно приблизительно одинаковы, указывается ссылка на наиболее позднюю работу. Почти во всех случаях цитируемые публикации содержат перечень более ранних работ. Наконец, если те или иные значения опубликованы одновременно или почти одновременно в качестве приблизительно одинаковых источников, то они цитируются отдельно.

Отобранные данные для каждого конкретного соединения перфоровались на карты и вводились в счетные машины. Данные по энтропии и энтальпии элементов брались из гл. VIII и вводились в счетную машину. Соответствующее программирование обеспечивало затем получение отпечатанных результатов, воспроизводимых здесь, которые включают значения энергии образования Гиббса в тех случаях, когда исходные данные достаточно точны для расчета этих величин. Ограниченные возможности счетной машины в выдаче отпечатанной информации очевидны, однако они компенсируются быстротой, точностью и экономичностью операций счетной машины. При описании соединений приняты следующие условные обозначения:

ANG — угловая структура
 C — градусы Цельсия
 CALC — рассчитанное значение
 CIS — *цис*-изомер
 D — правовращающий оптический изомер
 ENDO — *эндо*-изомер
 EXO — *экзо*-изомер
 (G) — газообразное состояние
 (HB) — изомер с высшей точкой кипения
 (LB) — изомер с низшей точкой кипения
 L — левовращающий оптический изомер
 (L) — жидкое состояние
 LIN — линейная структура
 M — *мета*-изомер
 M. P. — точка плавления
 O — *орто*-изомер
 P — *пара*-изомер
 (S) — твердое кристаллическое состояние
 SYM — симметричная структура
 TRANS — *транс*-изомер
 (U) — структура не определена

Обранные значения энтальпии образования и энтропии органических и некоторых неорганических соединений при 298° К помещены в виде сводной таблицы* в конце книги (стр. I—CXXXVI).

* Эта таблица воспроизведена в том виде, в котором она приводится в английском оригинале книги, т. е. в виде табулированной информации, отпечатанной счетной машиной.— *Прим. перев.*

Обозначения*

Основные термодинамические величины**

A — энергия Гельмгольца [потенциал Гельмгольца, изо-
хорно-изотермический потенциал, изохорный потен-
циал]
 C_p — молярная теплоемкость при постоянном давлении
 C_v — молярная теплоемкость при постоянном объеме
 E — энергия [внутренняя энергия]
 ΔE_c — изменение энергии для процесса сгорания
 G — энергия Гиббса [потенциал Гиббса, свободная энер-
гия при постоянном давлении, свободная энтальпия,
изобарно-изотермический потенциал, изобарный
потенциал, термодинамический потенциал]
 ΔG_f — энергия Гиббса образования соединения из элемен-
тов
 $-H_{298}/T$ — приведенная функция энергии Гиббса [приведенный
изобарный потенциал, приведенный термодинами-
ческий потенциал]
 H — энтальпия [теплосодержание]
 $H_T - H_{298}$ — изменение энтальпии между T° К и 298,15° К
 ΔH_c — изменение энтальпии для процесса сгорания
 ΔH_f — энтальпия образования соединения из элементов
 ΔH_m — изменение энтальпии при плавлении [энтальпия
плавления]
 ΔH_r — изменение энтальпии при реакции [энтальпия реак-
ции]
 ΔH_s — изменение энтальпии при сублимации [энтальпия
сублимации]
 ΔH_t — изменение энтальпии при полиморфном превращении
 ΔH_v — изменение энтальпии при испарении [энтальпия
парообразования]

* В гл. XIV ввиду ограничений, налагаемых возможностями счетных машин, пришлось для обозначения веществ и их характеристических свойств использовать только заглавные буквы. Хотя большую часть из таких упрощенных обозначений понять нетрудно, тем не менее необходимые разъяснения даны во введении к гл. XIV.

** Более подробно термодинамические функции и символы описаны в гл. VIII [Другие наиболее часто встречающиеся в литературе наименования термодинамических функций указаны в квадратных скобках.— *Прим. перев.*]

- K_f — константа равновесия реакции (выраженная через летучести)
 K_n — константа равновесия реакции (выраженная через число молей)
 K_p — константа равновесия реакции (выраженная через единицы атмосферного давления)
 P — давление
 Q — количество теплоты
 S — энтропия
 V — объем

Другие величины, обозначаемые курсивными латинскими буквами

- a — активность
 a, b, c — константы в уравнениях теплоемкости
 $B_p (C_p, D_p...)$ } — вторые и более высокие вириальные коэффициенты
 $B_v (C_v, D_v...)$ }
 c — скорость света
 d — межатомное расстояние в сантиметрах
 dc — критическая плотность
 f — летучесть (фугативность)
 g — газообразное состояние
 g_i — вырожденность i -го уровня
 h — постоянная Планка
 I_A, I_B, I_C — главные моменты инерции молекулы
 k — постоянная Больцмана
 l — жидкое состояние
 M — молекулярный вес
 m — масса атомов (в граммах)
 N — число Авогадро; мольная доля
 n — число максимумов потенциальной энергии на один оборот вращающейся группы
 P_c — критическое давление
 Q_f — функция распределения для свободного вращения
 R — газовая постоянная
 s — твердое или кристаллическое состояние
 T — температура в градусах Кельвина (градусы Цельсия + 273,15°)
 t — температура в градусах Цельсия
 T_b — точка кипения при давлении 1 атм
 T_c — критическая температура
 T_m — точка плавления при давлении 1 атм
 T_t — температура фазового перехода (полиморфного превращения)
 T_{tp} — температура тройной точки

- u — $h\nu/kT = hc\omega/kT = 1,4386\omega/T$
 V — барьер потенциальной энергии
 x — $h\nu_{\max}/kT$ (или для другого значения ν)
 Z — коэффициент сжимаемости

Величины, обозначаемые греческими буквами

- γ — коэффициент летучести
 Δ — обозначение изменения данного свойства для процесса или реакции
 ν_i — стехиометрический коэффициент i -го компонента
 σ — число симметрии
 σ_i — волновое число («частота») в обратных сантиметрах

Верхние (надстрочные) индексы

- $^{\circ}$ — обозначает стандартное состояние единицы летучести или единицы активности при любой термодинамической величине
 $*$ — обозначает термодинамическое свойство без учета эффектов симметрии (например, $S^* = S^{\circ} + R \ln \sigma_i$); этот символ используется также для обозначения количеств рассматриваемого вещества
 $'$ — свойство (например, f' — летучесть, K_f' — константа равновесия), относящееся к чистому компоненту при суммарном давлении смеси

Нижние (подстрочные) индексы

- исленные (например, $_{298}$) — обозначают температуру в градусах Кельвина (следует обратить внимание на то, что 298 в нижнем индексе повсюду дается вместо 298,15)
 D — Параметр по Дебаю, например θ_D — характеристическая температура Дебая, f_D — функция Дебая)
 E — Параметр по Эйнштейну, например θ_E
 el — электронная
 ir — внутреннее вращение
 or — полное вращательное
 r — вращательное
 tot, t — общее, суммарное
 tr — поступательное
 vib — колебательное
 w — полное

Значения функции теплоемкости по Эйнштейну Cv^0/R в зависимости от $x = \theta_L/T^3$

x	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
0,0	1,0000	0,9992	0,9967	0,9925	0,9868	0,9794	0,9705	0,9602	0,9483	0,9352
1,0	0,9207	0,9050	0,8882	0,8703	0,8515	0,8318	0,8114	0,7903	0,7687	0,7466
2,0	0,7241	0,7013	0,6783	0,6552	0,6320	0,6089	0,5859	0,5631	0,5405	0,5182
3,0	0,4963	0,4747	0,4536	0,4330	0,4129	0,3933	0,3743	0,3558	0,3380	0,3207
4,0	0,3041	0,2881	0,2726	0,2578	0,2436	0,2300	0,2170	0,2046	0,1928	0,1815
5,0	0,1707	0,1605	0,1508	0,1416	0,1329	0,1246	0,1168	0,1094	0,1025	0,09588
6,0	0,08968	0,08383	0,07833	0,07315	0,06828	0,06371	0,05942	0,05539	0,05162	0,04808
7,0	0,04476	0,04166	0,03876	0,03605	0,03351	0,03115	0,02894	0,02687	0,02495	0,02316
8,0	0,02148	0,01993	0,01848	0,01713	0,01587	0,01471	0,01362	0,01261	0,01168	0,01081
9,0	0,01000	0,00925	0,00855	0,00791	0,00731	0,00676	0,00624	0,00577	0,00533	0,00492
10,0	0,00454		0,00387		0,00329		0,00280		0,00238	
11,0	0,00202		0,00172		0,00145		0,00123		0,00104	
12,0	0,00088		0,00075		0,00063		0,00054		0,00045	
13,0	0,00038		0,00032		0,00027		0,00023		0,00019	
14,0	0,00016		0,00014		0,00012		0,00010		0,00008	
15,0	0,00007		0,00006		0,00005		0,00004		0,00003	

*) Из более подробных таблиц Хильснера и Циглера [605]

Значения функции энергии по Эйнштейну $(E^0 - E_0^0)/RT$ в зависимости от $x = \theta_E/T^3$

x	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
0,0	0,9995	0,9508	0,9033	0,8575	0,8133	0,7708	0,7298	0,6905	0,6528	0,6166
1,0	0,5820	0,5489	0,5172	0,4870	0,4582	0,4308	0,4048	0,3800	0,3565	0,3342
2,0	0,3130	0,2930	0,2741	0,2563	0,2394	0,2236	0,2086	0,1945	0,1813	0,1689
3,0	0,1572	0,1462	0,1360	0,1264	0,1174	0,1090	0,1011	0,09380	0,08695	0,08057
4,0	0,07463	0,06909	0,06394	0,05915	0,05469	0,05055	0,04671	0,04314	0,03983	0,03676
5,0	0,03392	0,03128	0,02885	0,02659	0,02450	0,02257	0,02078	0,01914	0,01761	0,01621
6,0	0,01491	0,01371	0,01261	0,01159	0,01065	0,00979	0,00899	0,00826	0,00758	0,00696
7,0	0,00639	0,00586	0,00538	0,00493	0,00453	0,00415	0,00381	0,00349	0,00320	0,00293
8,0	0,00268	0,00246	0,00225	0,00206	0,00189	0,00173	0,00158	0,00145	0,00133	0,00121
9,0	0,00111	0,00102	0,00093	0,00085	0,00078	0,00071	0,00065	0,00059	0,00054	0,00050
10,0	0,00045		0,00038		0,00032		0,00026		0,00022	
11,0	0,00018		0,00015		0,00013		0,00011		0,00009	
12,0	0,00007		0,00006		0,00005		0,00004		0,00004	
13,0	0,00003		0,00002		0,00002		0,00002		0,00001	
14,0	0,00001		0,00001		0,00001		0,00001		0,00001	
15,0	0,00001		0,00000		0,00000		0,00000		0,00000	

*) Из более подробных таблиц Хильснера и Циглера [605]

Значения функции энтропии по Эйнштейну S^0/R в зависимости от $x = \theta_E/T^a$

x	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
0,0	7,9078	3,3030	2,6111	2,2077	1,9229	1,7035	1,5257	1,3768	1,2494	1,1384
1,0	1,0406	0,9536	0,8756	0,8052	0,7414	0,6833	0,6303	0,5817	0,5371	0,4962
2,0	0,4584	0,4237	0,3916	0,3619	0,3346	0,3092	0,2858	0,2641	0,2440	0,2254
3,0	0,2083	0,1923	0,1776	0,1640	0,1513	0,1396	0,1288	0,1188	0,1096	0,1010
4,0	0,09311	0,08580	0,07905	0,07281	0,06705	0,06172	0,05681	0,05228	0,04809	0,04424
5,0	0,04068	0,03740	0,03438	0,03159	0,02903	0,02666	0,02449	0,02249	0,02065	0,01895
6,0	0,01739	0,01596	0,01464	0,01343	0,01231	0,01129	0,01035	0,00949	0,00870	0,00797
7,0	0,00730	0,00669	0,00613	0,00561	0,00514	0,00470	0,00431	0,00394	0,00361	0,00330
8,0	0,00302	0,00276	0,00253	0,00231	0,00211	0,00193	0,00177	0,00162	0,00148	0,00135
9,0	0,00123	0,00113	0,00103	0,00094	0,00086	0,00079	0,00072	0,00066	0,00060	0,00055
10,0	0,00050		0,00042		0,00035		0,00029		0,00024	
11,0	0,00020		0,00017		0,00014		0,00012		0,00010	
12,0	0,00008		0,00007		0,00006		0,00005		0,00004	
13,0	0,00003		0,00003		0,00002		0,00002		0,00001	
14,0	0,00001		0,00001		0,00001		0,00001		0,00001	
15,0	0,00001		0,00000		0,00000		0,00000		0,00000	

^{a)} Из более подробных таблиц Хильсепрата и Циглера [605]

Значения функции теплоемкости по Дебаю $C_v/3R$ в зависимости от θ_D/T^a

θ_D/T	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
0,0	1,0000	0,9995	0,9980	0,9955	0,9920	0,9876	0,9822	0,9759	0,9687	0,9606
1,0	0,9517	0,9420	0,9315	0,9203	0,9085	0,8960	0,8828	0,8692	0,8550	0,8404
2,0	0,8254	0,8100	0,7943	0,7784	0,7622	0,7459	0,7294	0,7128	0,6961	0,6794
3,0	0,6628	0,6461	0,6296	0,6132	0,5968	0,5807	0,5647	0,5490	0,5334	0,5181
4,0	0,5031	0,4883	0,4738	0,4595	0,4456	0,4320	0,4187	0,4057	0,3930	0,3807
5,0	0,3686	0,3569	0,3455	0,3345	0,3237	0,3133	0,3031	0,2933	0,2838	0,2745
6,0	0,2656	0,2569	0,2486	0,2405	0,2326	0,2251	0,2177	0,2107	0,2038	0,1972
7,0	0,1909	0,1847	0,1788	0,1730	0,1675	0,1622	0,1570	0,1521	0,1473	0,1426
8,0	0,1382	0,1339	0,1297	0,1257	0,1219	0,1182	0,1146	0,1111	0,1078	0,1046
9,0	0,1015	0,09847	0,09558	0,09280	0,09011	0,08751	0,08500	0,08259	0,08025	0,07800
10,0	0,07582	0,07372	0,07169	0,06973	0,06783	0,06600	0,06424	0,06253	0,06087	0,05928
11,0	0,05773	0,05624	0,05479	0,05339	0,05204	0,05073	0,04946	0,04823	0,04705	0,04590
12,0	0,04478	0,04370	0,04265	0,04164	0,04066	0,03970	0,03878	0,03788	0,03701	0,03617
13,0	0,03535	0,03455	0,03378	0,03303	0,03230	0,03160	0,03091	0,03024	0,02959	0,02896
14,0	0,02835	0,02776	0,02718	0,02661	0,02607	0,02553	0,02501	0,02451	0,02402	0,02354
15,0	0,02307	0,02262	0,02218	0,02174	0,02132	0,02092	0,02052	0,02013	0,01975	0,01938

^{a)} Если $\theta_D/T \geq 16$, то $C_v/3R = 77,927 (T/\theta_D)^3$; по Питперу и Брюеру [1158].

Значения функции энергии по Дебаю ($E^\circ - E_0^\circ)/3RT$ в зависимости от θ_D/T^a

θ_D/T	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
0,0	1,0000	0,9630	0,9270	0,8920	0,8580	0,8250	0,7929	0,7619	0,7318	0,7026
1,0	0,6744	0,6471	0,6208	0,5954	0,5708	0,5471	0,5243	0,5023	0,4811	0,4607
2,0	0,4411	0,4223	0,4042	0,3868	0,3701	0,3541	0,3388	0,3241	0,3100	0,2965
3,0	0,2836	0,2712	0,2594	0,2481	0,2373	0,2269	0,2170	0,2076	0,1986	0,1900
4,0	0,1817	0,1739	0,1664	0,1592	0,1524	0,1459	0,1397	0,1338	0,1281	0,1227
5,0	0,1176	0,1127	0,1080	0,1036	0,09930	0,09524	0,09137	0,08768	0,08415	0,08079
6,0	0,07758	0,07452	0,07160	0,06881	0,06615	0,06360	0,06118	0,05886	0,05664	0,05453
7,0	0,05251	0,05057	0,04873	0,04696	0,04527	0,04366	0,04211	0,04063	0,03921	0,03786
8,0	0,03656	0,03532	0,03413	0,03298	0,03189	0,03084	0,02983	0,02887	0,02794	0,02705
9,0	0,02620	0,02538	0,02459	0,02384	0,02311	0,02241	0,02174	0,02109	0,02047	0,01987
10,0	0,01930	0,01874	0,01821	0,01769	0,01720	0,01672	0,01626	0,01581	0,01538	0,01497
11,0	0,01457	0,01418	0,01381	0,01345	0,01311	0,01277	0,01245	0,01213	0,01183	0,01153
12,0	0,01125	0,01098	0,01071	0,01045	0,01020	0,00996	0,00973	0,00950	0,00928	0,00907
13,0	0,00886	0,00866	0,00846	0,00827	0,00809	0,00791	0,00774	0,00757	0,00741	0,00725
14,0	0,00710	0,00695	0,00680	0,00666	0,00652	0,00639	0,00626	0,00613	0,00601	0,00589
15,0	0,00577	0,00566	0,00555	0,00544	0,00533	0,00523	0,00513	0,00503	0,00494	0,00485

^{a)} Если $\theta_D/T \geq 16$, то $(E^\circ - E_0^\circ)/3RT = 19,482 (T/\theta_D)^3$, по Питцеру и Брюсеру [1158].

Значения функции энтропии по Дебаю $S^\circ/3R$ в зависимости от θ_D/T^a

θ_D/T	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
0,0	∞	3,6362	2,9438	2,5396	2,2536	2,0327	1,8531	1,7022	1,5723	1,4587
1,0	1,3579	1,2676	1,1861	1,1120	1,0442	0,9820	0,9246	0,8714	0,8222	0,7763
2,0	0,7336	0,6937	0,6564	0,6214	0,5886	0,5578	0,5289	0,5017	0,4761	0,4519
3,0	0,4292	0,4077	0,3875	0,3683	0,3503	0,3332	0,3171	0,3018	0,2874	0,2737
4,0	0,2608	0,2486	0,2370	0,2260	0,2156	0,2057	0,1964	0,1875	0,1791	0,1711
5,0	0,1636	0,1564	0,1496	0,1434	0,1369	0,1311	0,1255	0,1203	0,1152	0,1105
6,0	0,1059	0,1016	0,09750	0,09358	0,08986	0,08631	0,08293	0,07971	0,07664	0,07371
7,0	0,07092	0,06826	0,06572	0,06329	0,06097	0,05876	0,05665	0,05463	0,05270	0,05085
8,0	0,04908	0,04739	0,04578	0,04423	0,04274	0,04132	0,03996	0,03866	0,03741	0,03621
9,0	0,03506	0,03395	0,03289	0,03187	0,03090	0,02996	0,02905	0,02818	0,02735	0,02655
10,0	0,02577	0,02503	0,02431	0,02362	0,02296	0,02232	0,02170	0,02111	0,02053	0,01998
11,0	0,01941	0,01893	0,01843	0,01795	0,01749	0,01704	0,01660	0,01618	0,01578	0,01539
12,0	0,01501	0,01464	0,01428	0,01394	0,01361	0,01328	0,01297	0,01267	0,01237	0,01209
13,0	0,01181	0,01155	0,01129	0,01103	0,01079	0,01055	0,01032	0,01010	0,00988	0,00967
14,0	0,00946	0,00926	0,00907	0,00888	0,00870	0,00852	0,00834	0,00818	0,00801	0,00785
15,0	0,00770	0,00754	0,00740	0,00725	0,00711	0,00697	0,00684	0,00671	0,00659	0,00646

^{a)} Если $\theta_D/T \geq 16$, то $S/3R = 25,976 (T/\theta_D)^3$, по Питцеру и Брюсеру [1158].

Таблица П.7

Значения теплоемкости C для затопленного вращения^{а)}, кал/(моль·°К)

V/RT	1/Q ₁																			
	0,0	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	0,80	0,85	0,90	0,95
0,0	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994
0,2	1,0035	1,003	1,003	1,002	1,001	1,000	0,999	0,998	0,998	0,998	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	0,999	0,999	0,999
0,4	1,0328	1,033	1,032	1,030	1,028	1,025	1,024	1,021	1,019	0,997	1,018	1,017	1,015	1,013	1,012	1,010	1,008	1,007	1,005	1,004
0,6	1,0801	1,080	1,079	1,076	1,073	1,068	1,065	1,060	1,056	0,995	1,049	1,046	1,041	1,036	1,031	1,026	1,021	1,017	1,014	1,011
0,8	1,1435	1,143	1,141	1,138	1,133	1,128	1,121	1,114	1,106	0,999	1,092	1,084	1,075	1,067	1,058	1,049	1,040	1,031	1,025	1,020
1,0	1,2203	1,219	1,217	1,212	1,206	1,199	1,190	1,180	1,169	0,994	1,144	1,131	1,118	1,105	1,091	1,078	1,065	1,052	1,040	1,031
1,5	1,4508	1,449	1,444	1,435	1,423	1,408	1,391	1,370	1,348	0,998	1,299	1,273	1,247	1,218	1,192	1,165	1,141	1,115	1,090	1,070
2,0	1,6778	1,695	1,687	1,673	1,655	1,632	1,606	1,574	1,541	0,997	1,465	1,424	1,382	1,341	1,300	1,258	1,218	1,180	1,146	1,113
2,5	1,9213	1,917	1,908	1,888	1,866	1,840	1,801	1,756	1,717	0,999	1,619	1,562	1,504	1,448	1,393	1,341	1,289	1,238	1,190	1,146
3,0	2,0989	2,095	2,082	2,062	2,033	1,996	1,952	1,900	1,846	0,994	1,732	1,663	1,597	1,532	1,466	1,401	1,337	1,276	1,217	1,164
3,5	2,2226	2,218	2,204	2,180	2,146	2,106	2,054	1,995	1,934	0,999	1,803	1,727	1,654	1,580	1,506	1,432	1,361	1,293	1,226	1,165
4,0	2,2989	2,294	2,276	2,249	2,213	2,168	2,110	2,048	1,980	0,997	1,834	1,754	1,674	1,593	1,513	1,435	1,359	1,286	1,215	1,148
4,5	2,3358	2,330	2,312	2,280	2,238	2,190	2,129	2,062	1,990	0,999	1,832	1,749	1,664	1,578	1,496	1,413	1,333	1,259	1,185	1,115
5,0	2,3447	2,338	2,318	2,285	2,241	2,186	2,120	2,056	1,972	0,999	1,808	1,718	1,631	1,543	1,457	1,373	1,292	1,214	1,140	1,068
6,0	2,3158	2,307	2,283	2,245	2,192	2,130	2,059	1,979	1,893	0,994	1,711	1,614	1,520	1,429	1,342	1,255	1,173	1,096	1,022	0,954
7,0	2,2650	2,256	2,228	2,185	2,126	2,055	1,973	1,883	1,787	0,998	1,588	1,487	1,390	1,296	1,207	1,120	1,040	0,962	0,890	0,826
8,0	2,2160	2,205	2,174	2,125	2,058	1,979	1,888	1,788	1,684	0,997	1,468	1,366	1,262	1,164	1,074	0,988	0,908	0,834	0,765	0,704
9,0	2,1762	2,164	2,130	2,074	1,999	1,909	1,808	1,699	1,587	0,999	1,362	1,250	1,144	1,048	0,956	0,869	0,789	0,717	0,652	0,593
10,0	2,1457	2,133	2,094	2,033	1,951	1,854	1,745	1,630	1,507	0,999	1,262	1,151	1,045	0,943	0,850	0,765	0,688	0,618	0,556	0,499
12,0	2,1053	2,089	2,043	1,972	1,877	1,763	1,636	1,502	1,365	0,994	1,107	0,989	0,877	0,774	0,682	0,600	0,528	0,463	0,407	0,358
14,0	2,0813	2,063	2,009	1,923	1,814	1,686	1,546	1,400	1,254	0,999	1,012	0,978	0,855	0,744	0,644	0,554	0,479	0,411	0,352	0,303
16,0	2,0657	2,044	1,983	1,887	1,764	1,622	1,468	1,311	1,156	0,999	0,873	0,749	0,639	0,542	0,457	0,387	0,324	0,272	0,229	0,194
18,0	2,0547	2,031	1,961	1,853	1,717	1,562	1,397	1,232	1,070	0,999	0,780	0,657	0,549	0,456	0,378	0,312	0,259	0,215	0,175	0,144
20,0	2,0465	2,020	1,944	1,827	1,678	1,510	1,333	1,158	0,991	0,999	0,737	0,601	0,477	0,389	0,316	0,256	0,208	0,168	0,135	0,109

а) По Пятцеру и Брюеру [1158].

Значения функции энергии $(E_T^* - E_0^*)/T$ для заторможенного вращения^{a)}, кал/(моль·°К)

Таблица П.8

V/RT	1/0 ₁																				
	0,0	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40		0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	0,80	0,85	0,90	0,95
0,0	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994
0,2	1,1824	1,142	1,106	1,074	1,050	1,032	1,022	1,015	1,008	1,004	1,000	0,996	0,994	0,994	0,994	0,992	0,992	0,991	0,990	0,989	0,989
0,4	1,3515	1,300	1,249	1,200	1,151	1,106	1,073	1,051	1,036	1,025	1,015	1,006	0,999	0,994	0,992	0,990	0,988	0,988	0,986	0,985	0,985
0,6	1,5013	1,437	1,374	1,311	1,251	1,190	1,138	1,099	1,072	1,049	1,030	1,014	1,004	0,995	0,990	0,987	0,984	0,982	0,980	0,979	0,979
0,8	1,6326	1,556	1,482	1,411	1,340	1,272	1,211	1,157	1,114	1,077	1,048	1,026	1,009	0,996	0,984	0,980	0,976	0,974	0,972	0,971	0,971
1,0	1,7463	1,660	1,576	1,495	1,418	1,344	1,275	1,211	1,155	1,106	1,065	1,038	1,014	0,996	0,982	0,972	0,965	0,962	0,960	0,959	0,959
1,5	1,9610	1,856	1,753	1,654	1,561	1,472	1,385	1,306	1,230	1,164	1,103	1,059	1,019	0,987	0,962	0,945	0,932	0,922	0,916	0,915	0,915
2,0	2,0937	1,971	1,854	1,742	1,636	1,536	1,440	1,350	1,265	1,190	1,120	1,057	1,005	0,962	0,928	0,904	0,886	0,873	0,864	0,860	0,860
2,5	2,1660	2,031	1,900	1,779	1,662	1,550	1,448	1,351	1,260	1,179	1,104	1,032	0,972	0,922	0,882	0,850	0,827	0,811	0,801	0,796	0,796
3,0	2,1974	2,049	1,909	1,777	1,651	1,535	1,426	1,321	1,224	1,140	1,060	0,988	0,924	0,870	0,828	0,791	0,763	0,744	0,732	0,728	0,728
3,5	2,2033	2,043	1,893	1,753	1,624	1,497	1,382	1,275	1,176	1,088	1,006	0,933	0,868	0,811	0,765	0,727	0,697	0,676	0,663	0,659	0,659
4,0	2,1947	2,024	1,864	1,715	1,577	1,448	1,329	1,221	1,121	1,030	0,947	0,872	0,806	0,749	0,701	0,661	0,630	0,609	0,595	0,590	0,590
4,5	2,1791	1,998	1,829	1,673	1,529	1,394	1,273	1,162	1,061	0,968	0,884	0,810	0,744	0,687	0,638	0,599	0,567	0,545	0,531	0,526	0,526
5,0	2,1610	1,971	1,794	1,631	1,481	1,344	1,218	1,104	1,002	0,909	0,824	0,750	0,685	0,628	0,580	0,540	0,508	0,485	0,470	0,465	0,465
6,0	2,1264	1,918	1,727	1,552	1,392	1,247	1,115	0,999	0,893	0,799	0,714	0,644	0,580	0,523	0,476	0,437	0,406	0,383	0,368	0,361	0,361
7,0	2,0987	1,875	1,670	1,484	1,315	1,164	1,029	0,908	0,802	0,708	0,624	0,554	0,491	0,437	0,392	0,354	0,324	0,302	0,286	0,279	0,279
8,0	2,0784	1,840	1,623	1,427	1,251	1,095	0,955	0,833	0,725	0,631	0,549	0,480	0,420	0,368	0,326	0,290	0,261	0,239	0,223	0,215	0,215
9,0	2,0637	1,811	1,583	1,379	1,196	1,035	0,892	0,768	0,661	0,569	0,488	0,421	0,363	0,312	0,273	0,240	0,211	0,191	0,176	0,168	0,168
10,0	2,0529	1,787	1,548	1,335	1,147	0,982	0,838	0,715	0,608	0,515	0,437	0,370	0,314	0,269	0,231	0,200	0,174	0,154	0,140	0,132	0,132
12,0	2,0385	1,749	1,492	1,264	1,067	0,896	0,745	0,624	0,519	0,431	0,356	0,296	0,244	0,202	0,170	0,143	0,121	0,104	0,091	0,084	0,084
14,0	2,0295	1,717	1,441	1,202	0,997	0,823	0,672	0,551	0,450	0,365	0,297	0,240	0,195	0,158	0,127	0,103	0,084	0,072	0,062	0,056	0,056
16,0	2,0232	1,690	1,401	1,150	0,937	0,760	0,613	0,493	0,394	0,314	0,249	0,198	0,157	0,127	0,098	0,076	0,061	0,051	0,044	0,038	0,038
18,0	2,0185	1,666	1,363	1,102	0,886	0,707	0,561	0,443	0,347	0,271	0,211	0,164	0,128	0,099	0,077	0,060	0,047	0,036	0,029	0,026	0,026
20,0	2,0150	1,646	1,329	1,061	0,841	0,660	0,515	0,399	0,307	0,236	0,181	0,138	0,105	0,080	0,061	0,047	0,036	0,028	0,022	0,018	0,018

^{a)} По Питцеру и Брюеру [1158].

Значения энтропии S° для заторможен

V/RT	10^4						
	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55
0,0	3,748	3,386	3,079	2,814	2,580	2,371	2,182
0,2	3,743	3,382	3,076	2,811	2,578	2,369	2,180
0,4	3,730	3,370	3,065	2,801	2,568	2,359	2,170
0,6	3,709	3,347	3,043	2,780	2,547	2,340	2,151
0,8	3,679	3,318	3,013	2,750	2,519	2,315	2,125
1,0	3,638	3,279	2,974	2,714	2,485	2,279	2,094
1,5	3,512	3,156	2,854	2,600	2,376	2,173	1,997
2,0	3,355	3,004	2,709	2,458	2,241	2,048	1,874
2,5	3,180	2,836	2,548	2,303	2,091	1,907	1,739
3,0	3,008	2,667	2,380	2,138	1,933	1,756	1,576
3,5	2,838	2,500	2,218	1,978	1,782	1,610	1,458
4,0	2,678	2,343	2,069	1,834	1,643	1,475	1,328
4,5	2,528	2,199	1,926	1,698	1,511	1,348	1,209
5,0	2,396	2,068	1,798	1,579	1,392	1,233	1,097
6,0	2,166	1,844	1,585	1,370	1,192	1,040	0,915
7,0	1,983	1,665	1,411	1,204	1,033	0,891	0,774
8,0	1,830	1,519	1,272	1,071	0,906	0,770	0,660
9,0	1,703	1,397	1,156	0,962	0,804	0,674	0,570
10,0	1,593	1,295	1,060	0,872	0,719	0,596	0,496
12,0	1,417	1,125	0,904	0,728	0,588	0,476	0,388
14,0	1,275	0,994	0,783	0,620	0,492	0,388	0,309
16,0	1,157	0,890	0,688	0,533	0,414	0,322	0,251
18,0	1,058	0,801	0,609	0,464	0,353	0,270	0,205
20,0	0,975	0,727	0,542	0,405	0,303	0,228	0,170

а) По Питцеру и Брюеру [1158].

Таблица П.9

го вращения^{а)}, кал/(моль·°К)

0,60	0,65	0,70	0,75	0,80	0,85	0,90	0,95
2,009	1,850	1,703	1,567	1,438	1,316	1,203	1,097
2,003	1,848	1,701	1,563	1,433	1,312	1,196	1,091
1,996	1,837	1,691	1,555	1,428	1,307	1,193	1,085
1,980	1,823	1,677	1,541	1,415	1,295	1,184	1,076
1,957	1,800	1,654	1,523	1,399	1,284	1,171	1,068
1,928	1,774	1,629	1,499	1,377	1,262	1,153	1,052
1,833	1,685	1,552	1,428	1,310	1,201	1,094	1,000
1,718	1,578	1,450	1,332	1,224	1,122	1,024	0,936
1,589	1,456	1,335	1,224	1,126	1,031	0,942	0,860
1,456	1,330	1,217	1,114	1,021	0,936	0,855	0,779
1,323	1,206	1,100	1,004	0,919	0,841	0,769	0,703
1,199	1,087	0,988	0,901	0,821	0,748	0,683	0,623
1,086	0,978	0,884	0,804	0,730	0,662	0,607	0,551
0,982	0,881	0,794	0,716	0,648	0,588	0,535	0,486
0,808	0,715	0,637	0,568	0,509	0,457	0,412	0,372
0,672	0,588	0,516	0,453	0,401	0,357	0,319	0,285
0,566	0,486	0,422	0,366	0,320	0,281	0,248	0,220
0,483	0,407	0,350	0,300	0,258	0,223	0,195	0,171
0,414	0,348	0,293	0,248	0,211	0,180	0,154	0,134
0,315	0,255	0,213	0,176	0,146	0,122	0,101	0,084
0,247	0,196	0,157	0,126	0,100	0,084	0,069	0,056
0,196	0,155	0,119	0,092	0,075	0,059	0,048	0,038
0,158	0,121	0,093	0,072	0,056	0,042	0,034	0,026
0,129	0,097	0,073	0,056	0,042	0,032	0,024	0,018

Снижение энтропии при свободном вращении, $S_f - S^a$, кал/(моль·°К)

V/RT	1/Q _f											
	0,0	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55
0,0	0,0000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
0,2	0,0049	0,005	0,004	0,004	0,004	0,004	0,004	0,003	0,003	0,002	0,002	0,002
0,4	0,0198	0,020	0,018	0,018	0,018	0,018	0,016	0,014	0,013	0,012	0,012	0,010
0,6	0,0440	0,044	0,043	0,043	0,040	0,039	0,039	0,036	0,034	0,033	0,031	0,028
0,8	0,0771	0,077	0,077	0,075	0,072	0,069	0,068	0,066	0,064	0,061	0,056	0,053
1,0	0,1185	0,118	0,117	0,115	0,112	0,110	0,107	0,105	0,100	0,095	0,092	0,086
1,5	0,2527	0,252	0,250	0,248	0,242	0,236	0,230	0,225	0,214	0,204	0,198	0,189
2,0	0,4182	0,417	0,415	0,410	0,402	0,393	0,382	0,370	0,356	0,339	0,323	0,308
2,5	0,6001	0,599	0,594	0,585	0,577	0,568	0,550	0,531	0,511	0,489	0,464	0,440
3,0	0,7856	0,783	0,777	0,768	0,757	0,740	0,719	0,699	0,676	0,647	0,615	0,581
3,5	0,9660	0,964	0,957	0,944	0,929	0,910	0,886	0,861	0,836	0,798	0,761	0,722
4,0	1,1356	1,133	1,126	1,111	1,094	1,070	1,043	1,011	0,980	0,937	0,896	0,855
4,5	1,2918	1,289	1,280	1,265	1,244	1,220	1,187	1,153	1,116	1,069	1,023	0,977
5,0	1,4339	1,431	1,421	1,404	1,380	1,352	1,318	1,281	1,235	1,188	1,138	1,086
6,0	1,6781	1,674	1,662	1,643	1,616	1,582	1,542	1,494	1,444	1,388	1,331	1,268
7,0	1,8783	1,874	1,860	1,837	1,807	1,765	1,721	1,668	1,610	1,547	1,480	1,411
8,0	2,0447	2,040	2,024	1,998	1,962	1,918	1,867	1,807	1,743	1,674	1,601	1,525
9,0	2,1864	2,180	2,163	2,134	2,095	2,045	1,989	1,923	1,852	1,776	1,697	1,612
10,0	2,3095	2,303	2,284	2,252	2,208	2,155	2,091	2,019	1,942	1,861	1,775	1,686
12,0	2,5155	2,508	2,485	2,447	2,394	2,331	2,261	2,175	2,086	1,992	1,895	1,793
14,0	2,6847	2,676	2,650	2,607	2,547	2,473	2,392	2,296	2,194	2,088	1,983	1,872
16,0	2,8289	2,819	2,788	2,740	2,674	2,591	2,496	2,391	2,281	2,166	2,049	1,930
18,0	2,9545	2,943	2,910	2,855	2,781	2,690	2,585	2,470	2,350	2,227	2,101	1,976
20,0	3,0659	3,054	3,017	2,956	2,872	2,773	2,659	2,537	2,400	2,277	2,143	2,011

^{a)} $S_f - R (1/2 + \ln Q_f)$; по Пирнеру и Брюеру [1458].

Сравнение термодинамических свойств заторможенного и гармонического осцилляторов ^{a)}

Таблица П.11

RT	S-S _h	$\frac{-(G-G_h)}{T}$	$\frac{(H-H_h)}{T}$	C-C _h	V/RT	S-S _h	$\frac{-(G-G_h)}{T}$	$\frac{(H-H_h)}{T}$	C-C _h
6	-0,45	0,03	-0,48	-0,90	6,0	0,21	0,08	0,13	0,32
8	-0,02	0,22	-0,24	-0,76	9,0	0,11	0,03	0,08	0,19
10	0,37	0,27	0,10	-0,29	12,0	0,06	0,02	0,04	0,12
15	0,41	0,20	0,21	0,10	16,0	0,04	0,01	0,03	0,07
20	0,35	0,14	0,21	0,30	20,0	0,02	0,0	0,02	0,05

^{a)} Индекс h относится к гармоническому осциллятору. $\frac{h\nu}{RT} = (1,74/Q_f) (V/RT)^{1/2}$.
Жаффарду (563).

Вклад гармонического осциллятора в теплоемкость (табулировано для колебательных частот ω)^{a)}

ω , см ⁻¹	C°/R								
	298,15° К	300° К	400° К	500° К	600° К	700° К	800° К	900° К	1000° К
100	0,9808	0,9811	0,9893	0,9931	0,9952	0,9965	0,9973	0,9979	0,9983
110	0,9769	0,9771	0,9871	0,9917	0,9942	0,9957	0,9967	0,9974	0,9979
120	0,9725	0,9729	0,9846	0,9901	0,9931	0,9949	0,9961	0,9969	0,9975
130	0,9678	0,9682	0,9820	0,9884	0,9919	0,9940	0,9955	0,9964	0,9971
140	0,9628	0,9633	0,9791	0,9866	0,9907	0,9931	0,9947	0,9958	0,9966
150	0,9575	0,9580	0,9761	0,9846	0,9893	0,9921	0,9940	0,9952	0,9961
160	0,9518	0,9523	0,9729	0,9825	0,9878	0,9910	0,9931	0,9946	0,9956
170	0,9458	0,9464	0,9694	0,9803	0,9863	0,9899	0,9922	0,9939	0,9950
180	0,9394	0,9401	0,9658	0,9780	0,9846	0,9887	0,9913	0,9931	0,9944
190	0,9328	0,9336	0,9620	0,9755	0,9829	0,9874	0,9903	0,9923	0,9938
200	0,9259	0,9267	0,9580	0,9729	0,9811	0,9860	0,9893	0,9915	0,9931
210	0,9187	0,9196	0,9538	0,9701	0,9791	0,9846	0,9882	0,9907	0,9924
220	0,9112	0,9120	0,9494	0,9673	0,9770	0,9831	0,9871	0,9898	0,9917
230	0,9034	0,9045	0,9449	0,9643	0,9750	0,9816	0,9859	0,9888	0,9909
240	0,8954	0,8966	0,9402	0,9612	0,9729	0,9800	0,9846	0,9878	0,9901
250	0,8871	0,8884	0,9353	0,9580	0,9706	0,9783	0,9833	0,9868	0,9893
260	0,8786	0,8800	0,9302	0,9546	0,9682	0,9765	0,9820	0,9857	0,9884
270	0,8698	0,8713	0,9250	0,9512	0,9658	0,9747	0,9806	0,9846	0,9875
280	0,8608	0,8624	0,9196	0,9476	0,9633	0,9729	0,9791	0,9835	0,9866
290	0,8517	0,8533	0,9141	0,9440	0,9607	0,9709	0,9776	0,9823	0,9856
300	0,8423	0,8440	0,9084	0,9402	0,9580	0,9686	0,9761	0,9811	0,9846
310	0,8327	0,8345	0,9025	0,9363	0,9553	0,9669	0,9745	0,9798	0,9836
320	0,8229	0,8249	0,8966	0,9323	0,9524	0,9647	0,9729	0,9785	0,9826
330	0,8130	0,8151	0,8904	0,9281	0,9494	0,9625	0,9712	0,9771	0,9814
340	0,8030	0,8051	0,8842	0,9239	0,9464	0,9603	0,9694	0,9758	0,9803
360	0,7824	0,7847	0,8713	0,9152	0,9402	0,9556	0,9658	0,9729	0,9780
370	0,7719	0,7743	0,8646	0,9107	0,9369	0,9532	0,9639	0,9714	0,9767
380	0,7613	0,7638	0,8579	0,9061	0,9336	0,9507	0,9620	0,9698	0,9755
390	0,7510	0,7532	0,8510	0,9014	0,9302	0,9481	0,9600	0,9682	0,9742
400	0,7398	0,7425	0,8440	0,8966	0,9268	0,9456	0,9580	0,9666	0,9729
410	0,7290	0,7317	0,8369	0,8917	0,9232	0,9429	0,9559	0,9650	0,9715
420	0,7180	0,7208	0,8297	0,8867	0,9196	0,9402	0,9538	0,9633	0,9701
430	0,7070	0,7100	0,8224	0,8816	0,9159	0,9374	0,9516	0,9616	0,9687
440	0,6960	0,6990	0,8151	0,8765	0,9122	0,9346	0,9494	0,9598	0,9673
450	0,6849	0,6880	0,8076	0,8713	0,9084	0,9317	0,9472	0,9580	0,9658
460	0,6738	0,6769	0,8000	0,8660	0,9043	0,9287	0,9449	0,9561	0,9643
470	0,6626	0,6658	0,7924	0,8606	0,9005	0,9258	0,9425	0,9543	0,9628
480	0,6514	0,6548	0,7847	0,8551	0,8967	0,9227	0,9402	0,9524	0,9612
490	0,6403	0,6437	0,7769	0,8495	0,8925	0,9196	0,9378	0,9504	0,9596
500	0,6291	0,6326	0,7691	0,8440	0,8884	0,9165	0,9353	0,9484	0,9580
510	0,6179	0,6215	0,7612	0,8384	0,8844	0,9133	0,9328	0,9464	0,9563
520	0,6068	0,6104	0,7532	0,8326	0,8799	0,9100	0,9302	0,9444	0,9546
530	0,5957	0,5993	0,7452	0,8268	0,8756	0,9067	0,9276	0,9423	0,9529
540	0,5846	0,5883	0,7371	0,8210	0,8713	0,9034	0,9250	0,9402	0,9512
550	0,5736	0,5773	0,7290	0,8151	0,8669	0,9000	0,9223	0,9380	0,9494
560	0,5626	0,5664	0,7209	0,8091	0,8624	0,8966	0,9196	0,9358	0,9476
570	0,5517	0,5555	0,7127	0,8031	0,8579	0,8931	0,9169	0,9336	0,9458
580	0,5408	0,5447	0,7045	0,7970	0,8533	0,8896	0,9141	0,9314	0,9439
590	0,5300	0,5340	0,6962	0,7909	0,8487	0,8860	0,9113	0,9291	0,9421
600	0,5193	0,5233	0,6879	0,7847	0,8440	0,8824	0,9084	0,9268	0,9402
610	0,5087	0,5127	0,6797	0,7785	0,8393	0,8787	0,9055	0,9244	0,9382
620	0,4981	0,5021	0,6716	0,7722	0,8345	0,8750	0,9025	0,9220	0,9363
630	0,4876	0,4917	0,6631	0,7659	0,8297	0,8713	0,8996	0,9196	0,9343
640	0,4773	0,4814	0,6547	0,7596	0,8249	0,8675	0,8966	0,9172	0,9323

ω , см ⁻¹	C°/R								
	298,15° K	300° K	400° K	500° K	600° K	700° K	800° K	900° K	1000° K
650	0,4670	0,4712	0,6467	0,7532	0,8200	0,8637	0,8935	0,9147	0,9302
660	0,4569	0,4610	0,6381	0,7468	0,8151	0,8598	0,8905	0,9122	0,9282
670	0,4468	0,4510	0,6298	0,7404	0,8101	0,8559	0,8873	0,9097	0,9261
680	0,4369	0,4410	0,6215	0,7339	0,8051	0,8520	0,8842	0,9071	0,9239
690	0,4271	0,4312	0,6132	0,7274	0,8000	0,8480	0,8810	0,9045	0,9218
700	0,4174	0,4215	0,6048	0,7209	0,7950	0,8440	0,8778	0,9019	0,9196
710	0,4079	0,4120	0,5966	0,7142	0,7898	0,8400	0,8746	0,8992	0,9174
720	0,3983	0,4025	0,5883	0,7078	0,7847	0,8359	0,8713	0,8966	0,9152
730	0,3890	0,3932	0,5801	0,7012	0,7795	0,8318	0,8680	0,8939	0,9130
740	0,3798	0,3840	0,5719	0,6946	0,7743	0,8277	0,8646	0,8911	0,9107
750	0,3708	0,3750	0,5637	0,6880	0,7691	0,8234	0,8613	0,8884	0,9084
760	0,3619	0,3660	0,5555	0,6813	0,7638	0,8193	0,8579	0,8856	0,9061
770	0,3531	0,3572	0,5474	0,6747	0,7585	0,8151	0,8545	0,8828	0,9037
780	0,3444	0,3486	0,5393	0,6681	0,7532	0,8108	0,8510	0,8800	0,9014
790	0,3359	0,3401	0,5313	0,6614	0,7479	0,8065	0,8475	0,8771	0,8990
800	0,3275	0,3317	0,5233	0,6548	0,7425	0,8022	0,8440	0,8742	0,8966
810	0,3193	0,3234	0,5153	0,6481	0,7371	0,7979	0,8405	0,8713	0,8941
820	0,3112	0,3153	0,5074	0,6414	0,7317	0,7935	0,8369	0,8684	0,8917
830	0,3033	0,3074	0,4995	0,6348	0,7263	0,7891	0,8334	0,8654	0,8892
840	0,2955	0,2995	0,4917	0,6284	0,7209	0,7847	0,8297	0,8624	0,8867
850	0,2879	0,2919	0,4839	0,6214	0,7154	0,7803	0,8261	0,8594	0,8842
860	0,2803	0,2843	0,4762	0,6148	0,7100	0,7758	0,8224	0,8564	0,8816
870	0,2730	0,2769	0,4686	0,6082	0,7045	0,7713	0,8188	0,8533	0,8791
880	0,2657	0,2697	0,4610	0,6015	0,6990	0,7668	0,8151	0,8502	0,8765
890	0,2587	0,2625	0,4535	0,5949	0,6935	0,7623	0,8111	0,8471	0,8739
900	0,2517	0,2556	0,4460	0,5883	0,6880	0,7578	0,8076	0,8430	0,8713

910	0,2447	0,2487	0,4386	0,5817	0,6827	0,7482	0,8000	0,8377	0,8660
920	0,2383	0,2420	0,4312	0,5751	0,6769	0,7487	0,8001	0,8377	0,8660
930	0,2317	0,2355	0,4240	0,5686	0,6714	0,7441	0,7964	0,8346	0,8633
940	0,2253	0,2290	0,4167	0,5620	0,6658	0,7395	0,7924	0,8314	0,8606
950	0,2191	0,2228	0,4096	0,5555	0,6603	0,7348	0,7886	0,8281	0,8579
960	0,2130	0,2166	0,4025	0,5490	0,6548	0,7302	0,7847	0,8249	0,8551
970	0,2070	0,2106	0,3955	0,5425	0,6492	0,7255	0,7808	0,8216	0,8524
980	0,2012	0,2047	0,3886	0,5361	0,6436	0,7209	0,7769	0,8184	0,8496
990	0,1955	0,1990	0,3817	0,5297	0,6381	0,7162	0,7730	0,8151	0,8468
1000	0,1899	0,1933	0,3750	0,5233	0,6326	0,7115	0,7691	0,8118	0,8440
1010	0,1844	0,1878	0,3683	0,5169	0,6270	0,7068	0,7651	0,8084	0,8412
1020	0,1791	0,1825	0,3616	0,5105	0,6214	0,7021	0,7612	0,8051	0,8384
1030	0,1739	0,1772	0,3550	0,5042	0,6159	0,6974	0,7572	0,8017	0,8355
1040	0,1689	0,1721	0,3488	0,4980	0,6104	0,6927	0,7532	0,7984	0,8326
1050	0,1639	0,1671	0,3422	0,4917	0,6048	0,6880	0,7492	0,7950	0,8297
1060	0,1591	0,1622	0,3358	0,4855	0,5993	0,6832	0,7452	0,7916	0,8268
1070	0,1544	0,1575	0,3306	0,4793	0,5938	0,6785	0,7412	0,7881	0,8239
1080	0,1498	0,1528	0,3234	0,4732	0,5883	0,6738	0,7372	0,7847	0,8210
1090	0,1453	0,1483	0,3173	0,4671	0,5828	0,6690	0,7331	0,7813	0,8180
1100	0,1411	0,1439	0,3113	0,4610	0,5773	0,6643	0,7290	0,7778	0,8151
1110	0,1367	0,1396	0,3055	0,4550	0,5718	0,6595	0,7250	0,7743	0,8121
1120	0,1326	0,1354	0,2995	0,4490	0,5664	0,6548	0,7209	0,7708	0,8091
1130	0,1285	0,1313	0,2938	0,4430	0,5609	0,6500	0,7168	0,7673	0,8061
1140	0,1246	0,1274	0,2881	0,4371	0,5555	0,6452	0,7127	0,7638	0,8031
1150	0,1208	0,1235	0,2825	0,4312	0,5501	0,6405	0,7086	0,7603	0,8000
1160	0,1170	0,1197	0,2769	0,4254	0,5447	0,6357	0,7045	0,7568	0,7970
1170	0,1134	0,1160	0,2715	0,4196	0,5393	0,6310	0,7004	0,7532	0,7939
1180	0,1099	0,1125	0,2661	0,4139	0,5339	0,6262	0,6963	0,7497	0,7909
1190	0,1065	0,1090	0,2608	0,4082	0,5286	0,6215	0,6921	0,7461	0,7878

ω , см ⁻¹	C°/R								
	298,15° K	300° K	400° K	500° K	600° K	700° K	800° K	900° K	1000° K
1200	0,1031	0,1056	0,2556	0,4025	0,5232	0,6167	0,6880	0,7425	0,7847
1210	0,0999	0,1023	0,2504	0,3969	0,5179	0,6120	0,6838	0,7389	0,7816
1220	0,0967	0,0991	0,2454	0,3914	0,5127	0,6072	0,6797	0,7354	0,7785
1230	0,0937	0,0960	0,2404	0,3859	0,5074	0,6025	0,6756	0,7318	0,7754
1240	0,0907	0,0930	0,2355	0,3804	0,5021	0,5978	0,6714	0,7281	0,7722
1250	0,0878	0,0900	0,2306	0,3750	0,4969	0,5930	0,6672	0,7245	0,7691
1260	0,0850	0,0872	0,2259	0,3696	0,4917	0,5883	0,6631	0,7209	0,7659
1270	0,0823	0,0844	0,2212	0,3643	0,4865	0,5836	0,6589	0,7172	0,7628
1280	0,0796	0,0817	0,2166	0,3590	0,4814	0,5789	0,6548	0,7136	0,7596
1290	0,0770	0,0791	0,2121	0,3537	0,4762	0,5742	0,6506	0,7100	0,7564
1300	0,0745	0,0765	0,2076	0,3486	0,4711	0,5695	0,6464	0,7063	0,7532
1310	0,0721	0,0741	0,2032	0,3434	0,4661	0,5649	0,6423	0,7027	0,7500
1320	0,0697	0,0717	0,1989	0,3384	0,4610	0,5603	0,6381	0,6990	0,7468
1330	0,0675	0,0693	0,1947	0,3333	0,4560	0,5555	0,6340	0,6953	0,7436
1340	0,0653	0,0671	0,1906	0,3284	0,4510	0,5509	0,6298	0,6917	0,7404
1350	0,0631	0,0649	0,1865	0,3234	0,4460	0,5462	0,6256	0,6880	0,7371
1360	0,0610	0,0628	0,1825	0,3185	0,4410	0,5416	0,6215	0,6843	0,7339
1370	0,0590	0,0607	0,1785	0,3137	0,4361	0,5370	0,6173	0,6806	0,7307
1380	0,0570	0,0587	0,1746	0,3089	0,4312	0,5324	0,6132	0,6769	0,7274
1390	0,0551	0,0568	0,1708	0,3042	0,4264	0,5278	0,6090	0,6732	0,7241
1400	0,0533	0,0549	0,1671	0,2995	0,4215	0,5233	0,6049	0,6696	0,7209
1410	0,0512	0,0531	0,1634	0,2949	0,4167	0,5187	0,6007	0,6659	0,7176
1420	0,0498	0,0513	0,1598	0,2903	0,4120	0,5142	0,5966	0,6622	0,7143
1430	0,0481	0,0496	0,1563	0,2858	0,4072	0,5096	0,5924	0,6585	0,7111
1440	0,0465	0,0479	0,1528	0,2813	0,4025	0,5052	0,5883	0,6548	0,7078
1450	0,0449	0,0463	0,1494	0,2769	0,3979	0,5007	0,5842	0,6511	0,7045

1470	0,0419	0,0432	0,1428	0,2682	0,3886	0,4917	0,5760	0,6437	0,6979
1480	0,0405	0,0418	0,1396	0,2640	0,3840	0,4873	0,5719	0,6400	0,6946
1490	0,0391	0,0403	0,1364	0,2597	0,3794	0,4829	0,5678	0,6364	0,6913
1500	0,0377	0,0390	0,1334	0,2556	0,3750	0,4785	0,5637	0,6326	0,6880
1510	0,0364	0,0376	0,1303	0,2514	0,3705	0,4741	0,5596	0,6289	0,6847
1520	0,0352	0,0363	0,1273	0,2474	0,3660	0,4697	0,5555	0,6252	0,6814
1530	0,0340	0,0351	0,1244	0,2434	0,3616	0,4653	0,5515	0,6217	0,6780
1540	0,0328	0,0339	0,1216	0,2394	0,3572	0,4610	0,5474	0,6178	0,6747
1550	0,0316	0,0327	0,1188	0,2355	0,3529	0,4568	0,5434	0,6141	0,6714
1560	0,0306	0,0316	0,1160	0,2316	0,3486	0,4524	0,5393	0,6100	0,6681
1570	0,0295	0,0305	0,1133	0,2278	0,3443	0,4481	0,5353	0,6067	0,6647
1580	0,0285	0,0294	0,1107	0,2240	0,3400	0,4439	0,5313	0,6030	0,6614
1590	0,0275	0,0284	0,1081	0,2203	0,3358	0,4396	0,5273	0,5993	0,6581
1600	0,0265	0,0274	0,1056	0,2166	0,3317	0,4354	0,5233	0,5957	0,6548
1610	0,0255	0,0265	0,1031	0,2130	0,3275	0,4313	0,5193	0,5920	0,6513
1620	0,0246	0,0255	0,1007	0,2094	0,3234	0,4271	0,5153	0,5883	0,6481
1630	0,0238	0,0246	0,0983	0,2058	0,3193	0,4229	0,5114	0,5847	0,6448
1640	0,0229	0,0238	0,0960	0,2024	0,3153	0,4188	0,5074	0,5810	0,6414
1650	0,0221	0,0229	0,0936	0,1989	0,3113	0,4147	0,5035	0,5773	0,6381
1660	0,0213	0,0221	0,0915	0,1956	0,3073	0,4106	0,4995	0,5737	0,6348
1670	0,0206	0,0214	0,0893	0,1922	0,3034	0,4066	0,4956	0,5700	0,6314
1680	0,0198	0,0206	0,0872	0,1889	0,2995	0,4026	0,4917	0,5664	0,6281
1690	0,0191	0,0199	0,0850	0,1857	0,2957	0,3985	0,4879	0,5628	0,6248
1700	0,0184	0,0192	0,0831	0,1825	0,2918	0,3945	0,4840	0,5592	0,6215
1710	0,0178	0,0185	0,0810	0,1793	0,2881	0,3916	0,4801	0,5555	0,6181
1720	0,0171	0,0178	0,0791	0,1762	0,2843	0,3866	0,4763	0,5519	0,6148
1730	0,0165	0,0172	0,0772	0,1732	0,2806	0,3827	0,4724	0,5483	0,6115
1740	0,0159	0,0166	0,0753	0,1701	0,2769	0,3788	0,4686	0,5447	0,6082

ω, см ⁻¹	C°/R								
	298, 15° K	300° K	400° K	500° K	600° K	700° K	800° K	900° K	1000° K
1750	0,0154	0,0160	0,0735	0,1671	0,2732	0,3750	0,4648	0,5411	0,6048
1760	0,0148	0,0154	0,0717	0,1642	0,2696	0,3711	0,4611	0,5375	0,6015
1770	0,0143	0,0149	0,0699	0,1613	0,2661	0,3673	0,4572	0,5340	0,5982
1780	0,0138	0,0143	0,0682	0,1584	0,2625	0,3635	0,4535	0,5304	0,5949
1790	0,0134	0,0138	0,0665	0,1556	0,2590	0,3598	0,4497	0,5268	0,5916
1800	0,0128	0,0133	0,0649	0,1528	0,2555	0,3560	0,4460	0,5233	0,5883
1810	0,0123	0,0128	0,0633	0,1501	0,2521	0,3523	0,4423	0,5197	0,5853
1820	0,0118	0,0124	0,0617	0,1474	0,2487	0,3486	0,4386	0,5162	0,5817
1830	0,0114	0,0119	0,0602	0,1448	0,2453	0,3449	0,4349	0,5127	0,5784
1840	0,0110	0,0115	0,0587	0,1422	0,2420	0,3413	0,4312	0,5092	0,5751
1850	0,0106	0,0111	0,0572	0,1396	0,2387	0,3377	0,4276	0,5057	0,5719
1860	0,0102	0,0107	0,0558	0,1371	0,2355	0,3341	0,4240	0,5022	0,5686
1870	0,0098	0,0103	0,0544	0,1346	0,2322	0,3305	0,4204	0,4987	0,5653
1880	0,0095	0,0099	0,0531	0,1321	0,2290	0,3270	0,4168	0,4952	0,5620
1890	0,0091	0,0095	0,0517	0,1297	0,2259	0,3234	0,4132	0,4917	0,5588
1900	0,0088	0,0092	0,0504	0,1273	0,2227	0,3199	0,4096	0,4883	0,5555
1910	0,0084	0,0088	0,0492	0,1250	0,2196	0,3165	0,4061	0,4848	0,5523
1920	0,0081	0,0085	0,0479	0,1227	0,2166	0,3130	0,4026	0,4814	0,5490
1930	0,0078	0,0082	0,0467	0,1205	0,2136	0,3096	0,3990	0,4780	0,5458
1940	0,0075	0,0079	0,0455	0,1182	0,2106	0,3063	0,3955	0,4745	0,5425
1950	0,0073	0,0076	0,0443	0,1160	0,2076	0,3029	0,3921	0,4711	0,5393
1960	0,0070	0,0073	0,0432	0,1139	0,2047	0,2995	0,3886	0,4678	0,5361
1970	0,0067	0,0070	0,0421	0,1118	0,2018	0,2962	0,3852	0,4644	0,5329
1980	0,0065	0,0068	0,0410	0,1097	0,1989	0,2929	0,3819	0,4610	0,5297
1990	0,0062	0,0065	0,0400	0,1076	0,1961	0,2897	0,3784	0,4577	0,5264
2000	0,0060	0,0063	0,0390	0,1056	0,1933	0,2865	0,3750	0,4543	0,5233

2010	0,0058	0,0061	0,0370	0,1017	0,1878	0,2801	0,3683	0,4477	0,5169
2020	0,0056	0,0058	0,0360	0,0998	0,1851	0,2769	0,3649	0,4444	0,5137
2030	0,0054	0,0056	0,0360	0,0998	0,1851	0,2769	0,3649	0,4444	0,5137
2040	0,0052	0,0054	0,0351	0,0979	0,1825	0,2738	0,3616	0,4410	0,5105
2050	0,0050	0,0052	0,0342	0,0942	0,1798	0,2707	0,3583	0,4378	0,5074
2060	0,0048	0,0050	0,0333	0,0924	0,1772	0,2676	0,3551	0,4345	0,5042
2070	0,0046	0,0048	0,0324	0,0906	0,1746	0,2646	0,3518	0,4312	0,5011
2080	0,0044	0,0046	0,0316	0,0889	0,1721	0,2615	0,3486	0,4280	0,4980
2090	0,0043	0,0045	0,0308	0,0872	0,1696	0,2585	0,3454	0,4248	0,4948
2100	0,0041	0,0043	0,0300	0,0855	0,1671	0,2556	0,3422	0,4216	0,4917
2110	0,0039	0,0041	0,0292	0,0839	0,1647	0,2526	0,3390	0,4184	0,4886
2120	0,0038	0,0040	0,0284	0,0822	0,1622	0,2496	0,3359	0,4152	0,4855
2130	0,0036	0,0038	0,0277	0,0806	0,1598	0,2468	0,3327	0,4120	0,4824
2140	0,0035	0,0037	0,0269	0,0791	0,1575	0,2439	0,3296	0,4088	0,4793
2150	0,0033	0,0035	0,0262	0,0776	0,1551	0,2412	0,3265	0,4057	0,4762
2160	0,0032	0,0034	0,0255	0,0760	0,1528	0,2383	0,3234	0,4026	0,4732
2170	0,0031	0,0032	0,0249	0,0746	0,1506	0,2355	0,3204	0,3995	0,4701
2180	0,0030	0,0031	0,0242	0,0731	0,1483	0,2327	0,3174	0,3963	0,4671
2190	0,0029	0,0030	0,0236	0,0717	0,1461	0,2300	0,3143	0,3932	0,4640
2200	0,0028	0,0029	0,0229	0,0703	0,1439	0,2272	0,3113	0,3901	0,4610
2210	0,0027	0,0028	0,0224	0,0689	0,1417	0,2246	0,3084	0,3871	0,4580
2220	0,0026	0,0027	0,0217	0,0675	0,1396	0,2219	0,3054	0,3840	0,4550
2230	0,0025	0,0026	0,0212	0,0662	0,1375	0,2192	0,3025	0,3810	0,4520
2240	0,0024	0,0025	0,0206	0,0649	0,1354	0,2166	0,2995	0,3780	0,4490
2250	0,0023	0,0024	0,0201	0,0636	0,1333	0,2140	0,2967	0,3750	0,4460
2260	0,0022	0,0023	0,0195	0,0624	0,1313	0,2114	0,2938	0,3720	0,4430
2270	0,0021	0,0022	0,0190	0,0611	0,1293	0,2089	0,2909	0,3690	0,4401
2280	0,0020	0,0021	0,0185	0,0599	0,1273	0,2064	0,2881	0,3660	0,4371
2290	0,0019	0,0021	0,0180	0,0587	0,1254	0,2039	0,2853	0,3631	0,4342

ω , см ⁻¹	C°/R								
	298,15° K	300° K	400° K	500° K	600° K	700° K	800° K	900° K	1000° K
2300	0,0018	0,0020	0,0175	0,0575	0,1235	0,2014	0,2825	0,3602	0,4312
2310	0,0018	0,0019	0,0170	0,0564	0,1216	0,1990	0,2797	0,3572	0,4283
2320	0,0017	0,0018	0,0166	0,0552	0,1197	0,1965	0,2769	0,3543	0,4254
2330	0,0017	0,0018	0,0162	0,0541	0,1179	0,1941	0,2742	0,3515	0,4225
2340	0,0016	0,0017	0,0157	0,0531	0,1160	0,1918	0,2715	0,3486	0,4196
2350	0,0015	0,0016	0,0153	0,0520	0,1142	0,1894	0,2688	0,3457	0,4167
2360	0,0015	0,0016	0,0149	0,0509	0,1125	0,1871	0,2661	0,3429	0,4139
2370	0,0014	0,0015	0,0144	0,0499	0,1107	0,1848	0,2634	0,3401	0,4110
2380	0,0014	0,0014	0,0140	0,0489	0,1090	0,1825	0,2608	0,3373	0,4082
2390	0,0013	0,0014	0,0137	0,0479	0,1073	0,1802	0,2582	0,3344	0,4054
2400	0,0013	0,0013	0,0133	0,0469	0,1056	0,1780	0,2556	0,3317	0,4025
2410	0,0012	0,0013	0,0129	0,0460	0,1039	0,1758	0,2530	0,3289	0,3997
2420	0,0012	0,0012	0,0126	0,0450	0,1023	0,1736	0,2504	0,3262	0,3969
2430	0,0011	0,0012	0,0122	0,0441	0,1007	0,1714	0,2479	0,3234	0,3941
2440	0,0011	0,0011	0,0119	0,0431	0,0991	0,1692	0,2454	0,3207	0,3914
2450	0,0010	0,0011	0,0116	0,0423	0,0975	0,1671	0,2429	0,3180	0,3886
2460	0,0010	0,0011	0,0113	0,0415	0,0960	0,1650	0,2404	0,3153	0,3858
2470	0,0010	0,0010	0,0109	0,0406	0,0945	0,1629	0,2379	0,3127	0,3831
2480	0,0009	0,0010	0,0106	0,0398	0,0930	0,1609	0,2354	0,3100	0,3804
2490	0,0009	0,0009	0,0104	0,0390	0,0915	0,1588	0,2331	0,3074	0,3777
2500	0,0008	0,0009	0,0101	0,0382	0,0900	0,1568	0,2306	0,3047	0,3750
2510	0,0008	0,0009	0,0098	0,0374	0,0886	0,1548	0,2283	0,3021	0,3723
2520	0,0008	0,0008	0,0095	0,0366	0,0872	0,1529	0,2259	0,2995	0,3696
2530	0,0007	0,0008	0,0093	0,0358	0,0858	0,1509	0,2236	0,2970	0,3669
2540	0,0007	0,0008	0,0090	0,0351	0,0844	0,1490	0,2212	0,2944	0,3643
2550	0,0007	0,0007	0,0088	0,0344	0,0830	0,1471	0,2189	0,2919	0,3616

2560	0,0007	0,0007	0,0086	0,0337	0,0817	0,1452	0,2168	0,2893	0,3590
2570	0,0006	0,0007	0,0083	0,0330	0,0804	0,1433	0,2143	0,2868	0,3564
2580	0,0006	0,0007	0,0080	0,0323	0,0791	0,1414	0,2121	0,2834	0,3539
2590	0,0006	0,0006	0,0078	0,0316	0,0778	0,1396	0,2099	0,2819	0,3511
2600	0,0006	0,0006	0,0076	0,0309	0,0765	0,1378	0,2076	0,2794	0,3486
2610	0,0005	0,0006	0,0074	0,0303	0,0753	0,1360	0,2054	0,2769	0,3460
2620	0,0005	0,0006	0,0072	0,0297	0,0741	0,1342	0,2033	0,2745	0,3435
2630	0,0005	0,0005	0,0070	0,0290	0,0729	0,1325	0,2011	0,2721	0,3409
2640	0,0005	0,0005	0,0068	0,0284	0,0717	0,1308	0,1990	0,2697	0,3383
2650	0,0005	0,0005	0,0066	0,0278	0,0705	0,1291	0,1968	0,2673	0,3358
2660	0,0004	0,0005	0,0064	0,0272	0,0693	0,1274	0,1947	0,2649	0,3333
2670	0,0004	0,0005	0,0062	0,0267	0,0682	0,1257	0,1926	0,2626	0,3308
2680	0,0004	0,0004	0,0060	0,0261	0,0671	0,1240	0,1906	0,2602	0,3284
2690	0,0004	0,0004	0,0059	0,0255	0,0660	0,1224	0,1885	0,2579	0,3259
2700	0,0004	0,0004	0,0057	0,0250	0,0649	0,1208	0,1865	0,2556	0,3234
2710	0,0004	0,0004	0,0056	0,0245	0,0638	0,1192	0,1845	0,2533	0,3210
2720	0,0003	0,0004	0,0054	0,0240	0,0628	0,1176	0,1825	0,2510	0,3185
2730	0,0003	0,0004	0,0052	0,0235	0,0617	0,1160	0,1805	0,2487	0,3161
2740	0,0003	0,0003	0,0051	0,0229	0,0607	0,1145	0,1785	0,2465	0,3137
2750	0,0003	0,0003	0,0050	0,0224	0,0597	0,1130	0,1766	0,2443	0,3113
2760	0,0003	0,0003	0,0048	0,0220	0,0587	0,1115	0,1747	0,2420	0,3088
2770	0,0003	0,0003	0,0046	0,0215	0,0577	0,1100	0,1727	0,2398	0,3066
2780	0,0003	0,0003	0,0045	0,0210	0,0568	0,1085	0,1708	0,2377	0,3042
2790	0,0003	0,0003	0,0044	0,0206	0,0558	0,1070	0,1690	0,2355	0,3019
2800	0,0003	0,0003	0,0043	0,0202	0,0549	0,1056	0,1671	0,2333	0,2995
2810	0,0002	0,0003	0,0042	0,0197	0,0540	0,1042	0,1653	0,2312	0,2972
2820	0,0002	0,0003	0,0041	0,0193	0,0531	0,1028	0,1635	0,2290	0,2949
2830	0,0002	0,0002	0,0039	0,0189	0,0522	0,1014	0,1616	0,2269	0,2926
2840	0,0002	0,0002	0,0038	0,0185	0,0513	0,1000	0,1598	0,2248	0,2903

ω , см ⁻¹	C°/R								
	298,15° K	300° K	400° K	500° K	600° K	700° K	800° K	900° K	1000° K
2850	0,0002	0,0002	0,0037	0,0181	0,0504	0,0987	0,1581	0,2228	0,2881
2860	0,0002	0,0002	0,0036	0,0177	0,0496	0,0973	0,1563	0,2207	0,2858
2870	0,0002	0,0002	0,0035	0,0173	0,0487	0,0960	0,1546	0,2186	0,2836
2880	0,0002	0,0002	0,0034	0,0169	0,0479	0,0947	0,1529	0,2166	0,2813
2890	0,0002	0,0002	0,0033	0,0166	0,0471	0,0934	0,1511	0,2146	0,2791
2900	0,0002	0,0002	0,0032	0,0162	0,0462	0,0921	0,1494	0,2126	0,2769
2910	0,0002	0,0002	0,0031	0,0159	0,0455	0,0909	0,1478	0,2106	0,2747
2920	0,0002	0,0002	0,0030	0,0155	0,0447	0,0896	0,1461	0,2086	0,2725
2930	0,0002	0,0002	0,0029	0,0152	0,0440	0,0884	0,1445	0,2067	0,2704
2940	0,0001	0,0002	0,0029	0,0148	0,0432	0,0872	0,1428	0,2047	0,2682
2950	0,0001	0,0002	0,0028	0,0145	0,0425	0,0860	0,1412	0,2028	0,2661
2960	0,0001	0,0001	0,0027	0,0142	0,0417	0,0848	0,1396	0,2009	0,2639
2970	0,0001	0,0001	0,0026	0,0139	0,0410	0,0836	0,1380	0,1990	0,2618
2980	0,0001	0,0001	0,0025	0,0136	0,0403	0,0825	0,1365	0,1971	0,2597
2990	0,0001	0,0001	0,0025	0,0133	0,0396	0,0813	0,1349	0,1952	0,2576
3000	0,0001	0,0001	0,0024	0,0130	0,0390	0,0802	0,1334	0,1933	0,2556
3010	0,0001	0,0001	0,0023	0,0127	0,0383	0,0791	0,1318	0,1915	0,2535
3020	0,0001	0,0001	0,0023	0,0124	0,0376	0,0780	0,1303	0,1897	0,2514
3030	0,0001	0,0001	0,0022	0,0122	0,0370	0,0769	0,1288	0,1878	0,2494
3040	0,0001	0,0001	0,0021	0,0119	0,0363	0,0758	0,1274	0,1860	0,2474
3050	0,0001	0,0001	0,0021	0,0116	0,0357	0,0748	0,1259	0,1842	0,2454
3060	0,0001	0,0001	0,0020	0,0114	0,0351	0,0737	0,1244	0,1825	0,2434
3080	0,0001	0,0001	0,0019	0,0109	0,0339	0,0717	0,1216	0,1790	0,2394
3090	0,0001	0,0001	0,0019	0,0106	0,0333	0,0707	0,1202	0,1772	0,2374
3100	0,0001	0,0001	0,0018	0,0104	0,0327	0,0697	0,1189	0,1755	0,2355
3110	0,0001	0,0001	0,0017	0,0102	0,0321	0,0687	0,1174	0,1738	0,2335
3120	0,0001	0,0001	0,0017	0,0100	0,0316	0,0677	0,1161	0,1721	0,2316
3130	0,0001	0,0001	0,0016	0,0097	0,0310	0,0668	0,1148	0,1704	0,2297
3140	0,0001	0,0001	0,0016	0,0095	0,0305	0,0658	0,1134	0,1688	0,2278
3150	0,0001	0,0001	0,0015	0,0093	0,0300	0,0649	0,1120	0,1671	0,2259
3160	0,0001	0,0001	0,0015	0,0091	0,0294	0,0640	0,1107	0,1655	0,2240
3170	0,0001	0,0001	0,0015	0,0089	0,0289	0,0631	0,1094	0,1639	0,2221
3180	0,0000	0,0001	0,0014	0,0087	0,0284	0,0622	0,1081	0,1622	0,2203
3190	0,0000	0,0001	0,0014	0,0085	0,0279	0,0613	0,1069	0,1606	0,2184
3200	0,0000	0,0000	0,0013	0,0083	0,0274	0,0604	0,1056	0,1590	0,2166
3210	0,0000	0,0000	0,0013	0,0081	0,0269	0,0596	0,1044	0,1575	0,2148
3220	0,0000	0,0000	0,0012	0,0080	0,0265	0,0587	0,1031	0,1559	0,2130
3230	0,0000	0,0000	0,0012	0,0078	0,0260	0,0579	0,1019	0,1544	0,2112
3240	0,0000	0,0000	0,0012	0,0076	0,0255	0,0570	0,1007	0,1528	0,2094
3250	0,0000	0,0000	0,0012	0,0074	0,0251	0,0562	0,0995	0,1513	0,2076
3260	0,0000	0,0000	0,0011	0,0073	0,0246	0,0554	0,0984	0,1498	0,2059
3270	0,0000	0,0000	0,0011	0,0071	0,0242	0,0546	0,0972	0,1483	0,2041
3280	0,0000	0,0000	0,0011	0,0069	0,0238	0,0538	0,0960	0,1468	0,2024
3290	0,0000	0,0000	0,0010	0,0068	0,0234	0,0531	0,0949	0,1454	0,2007
3300	0,0000	0,0000	0,0010	0,0066	0,0229	0,0523	0,0937	0,1439	0,1989
3310	0,0000	0,0000	0,0010	0,0065	0,0225	0,0515	0,0926	0,1425	0,1972

ω , см ⁻¹	C^e/R								
	298,15° K	300° K	400° K	500° K	600° K	700° K	800° K	900° K	1000° K
3320	0,0000	0,0000	0,0009	0,0063	0,0221	0,0508	0,0915	0,1410	0,1956
3330	0,0000	0,0000	0,0009	0,0062	0,0217	0,0501	0,0904	0,1396	0,1939
3340	0,0000	0,0000	0,0009	0,0061	0,0213	0,0493	0,0893	0,1383	0,1922
3350	0,0000	0,0000	0,0009	0,0059	0,0210	0,0486	0,0882	0,1368	0,1905
3360	0,0000	0,0000	0,0008	0,0058	0,0206	0,0479	0,0872	0,1354	0,1889
3370	0,0000	0,0000	0,0008	0,0056	0,0202	0,0472	0,0861	0,1340	0,1873
3380	0,0000	0,0000	0,0008	0,0055	0,0199	0,0465	0,0851	0,1327	0,1857
3390	0,0000	0,0000	0,0008	0,0054	0,0195	0,0458	0,0841	0,1313	0,1841
3400	0,0000	0,0000	0,0007	0,0053	0,0192	0,0452	0,0831	0,1300	0,1825
3410	0,0000	0,0000	0,0007	0,0052	0,0188	0,0445	0,0821	0,1287	0,1809
3420	0,0000	0,0000	0,0007	0,0050	0,0185	0,0439	0,0811	0,1274	0,1793
3430	0,0000	0,0000	0,0007	0,0049	0,0181	0,0432	0,0801	0,1261	0,1777
3440	0,0000	0,0000	0,0007	0,0048	0,0178	0,0426	0,0791	0,1248	0,1762
3450	0,0000	0,0000	0,0006	0,0047	0,0175	0,0420	0,0781	0,1235	0,1746
3460	0,0000	0,0000	0,0006	0,0046	0,0172	0,0413	0,0772	0,1222	0,1731
3470	0,0000	0,0000	0,0006	0,0045	0,0169	0,0407	0,0762	0,1210	0,1716
3480	0,0000	0,0000	0,0006	0,0044	0,0166	0,0401	0,0753	0,1197	0,1701
3490	0,0000	0,0000	0,0006	0,0043	0,0163	0,0396	0,0744	0,1185	0,1686
3500	0,0000	0,0000	0,0005	0,0042	0,0160	0,0390	0,0735	0,1173	0,1671
3510	0,0000	0,0000	0,0005	0,0041	0,0157	0,0384	0,0726	0,1160	0,1656
3520	0,0000	0,0000	0,0005	0,0040	0,0154	0,0378	0,0717	0,1148	0,1642
3530	0,0000	0,0000	0,0005	0,0039	0,0151	0,0373	0,0708	0,1137	0,1627

3550	0,0000	0,0000	0,0005	0,0038	0,0146	0,0362	0,0691	0,1113	0,1599
3560	0,0000	0,0000	0,0005	0,0037	0,0143	0,0356	0,0682	0,1101	0,1584
3570	0,0000	0,0000	0,0004	0,0036	0,0141	0,0351	0,0674	0,1090	0,1570
3580	0,0000	0,0000	0,0004	0,0035	0,0138	0,0346	0,0665	0,1079	0,1556
3590	0,0000	0,0000	0,0004	0,0034	0,0135	0,0341	0,0657	0,1067	0,1542
3600	0,0000	0,0000	0,0004	0,0033	0,0133	0,0336	0,0649	0,1056	0,1528
3610	0,0000	0,0000	0,0004	0,0033	0,0131	0,0331	0,0641	0,1045	0,1515
3620	0,0000	0,0000	0,0004	0,0032	0,0128	0,0326	0,0633	0,1034	0,1501
3630	0,0000	0,0000	0,0004	0,0031	0,0126	0,0321	0,0625	0,1023	0,1488
3640	0,0000	0,0000	0,0004	0,0030	0,0124	0,0316	0,0617	0,1012	0,1474
3650	0,0000	0,0000	0,0004	0,0030	0,0121	0,0311	0,0610	0,1002	0,1461
3660	0,0000	0,0000	0,0003	0,0029	0,0119	0,0307	0,0602	0,0991	0,1448
3670	0,0000	0,0000	0,0003	0,0028	0,0117	0,0302	0,0594	0,0981	0,1435
3680	0,0000	0,0000	0,0003	0,0028	0,0115	0,0297	0,0587	0,0970	0,1422
3690	0,0000	0,0000	0,0003	0,0027	0,0113	0,0293	0,0580	0,0960	0,1409

^{a)} Рассчитано по таблице Дрокстона, Саведофа и Белцера [695], $hc/k = 1,4386$.

Литература

1. *Abrams A. and Davis T. W.*, J. Am. Chem. Soc., **76**, 5993—5995 (1954).
2. *Adams R., Bramlet H. B. and Tendick F. H.*, J. Am. Chem. Soc., **42**, 2369—2374 (1920).
3. *Adriaanse N., Dekker H. and Coops J.*, Rec. Trav. Chim., **84**, 393—407 (1965).
4. *Ahlberg J. E., Blanchard E. R. and Lundberg W. O.*, J. Chem. Phys., **5**, 539—551 (1937).
5. *Айвазов В. В., Петров С. М., Хайрулина В. Р., Япрынцева В. Г.*, в кн. «Физико-химические константы сераорганических соединений», изд-во «Химия», М., 1964.
6. *Aitken P. B., Boxall H. L. and Cook I. G.*, Rev. Sci. Instr., **25**, 967—970 (1954).
7. *Акишин И. А., Вилков Л. В., Веснин Ю. И.*, ДАН СССР, **126**, 310—313 (1959).
8. *Albright L. F., Galegar W. C. and Innes K. K.*, J. Am. Chem. Soc., **76**, 6017—6019 (1954).
9. *Allen G. and Bernstein H. J.*, Can. J. Chem., **32**, 1044—1046 (1954).
10. *Allen T. L.*, J. Chem. Phys., **31**, 1039—1049 (1959).
11. *Amador A., Lacher J. R. and Park J. D.*, «Heats of Hydrogenation of Alkyl Chlorides», presented at the 20th Calorimetry Conference, Amcs, Iowa, 1965.
12. *Ambler H. R.*, J. Soc. Chem. Ind. (London), **55**, 291T—292T (1936).
13. *Ambrose D., Cox J. D. and Townsend R.*, Trans. Faraday Soc., **56**, 1432—1459 (1960).
14. *Ambrose D. and Townsend R.*, J. Chem. Soc., 3614—3625 (1963).
15. *Anderson A. G., Stegeman G.*, J. Am. Chem. Soc., **63**, 2119—2121 (1941).
16. *Anderson C. M., Cole L. G. and Gilbert E. C.*, J. Am. Chem. Soc., **72**, 1263—1264 (1950).
17. *Anderson C. M. and Gilbert E. C.*, J. Am. Chem. Soc., **64**, 2369—2372 (1942).
18. *Anderson J. W., Beyer G. H. and Walson K. M.*, Natl. Petrol. News, **36**, R476—R484 (1944).
19. *Andon R. J. L., Counsell J. F., Herington E. F. G. and Martin J. F.*, Trans. Faraday Soc., **59**, 830—835 (1963).
20. *Andon R. J. L., Counsell J. F. and Martin J. F.*, Trans. Faraday Soc., **59**, 1555—1558 (1963).
21. *Andon R. J. L., Cox J. D., Herington E. F. G. and Martin J. F.*, Trans. Faraday Soc., **53**, 1074—1082 (1957).
22. *Андреевский Д. Н., Рожнов А. М., Нефтехимия*, **2**, 378—383 (1962).
23. *Andrychuk D.*, Can. J. Phys., **29**, 151—158 (1951).
24. *Antoine C.*, Compt. Rend., **107**, 681—684, 836—837, 1143—1145 (1888).
25. *Arendale W. F. and Fletcher W. H.*, J. Chem. Phys., **26**, 793—797 (1957).
26. *Armstrong G. T. and Marantz S.*, J. Phys. Chem., **64**, 1776—1778 (1960).
27. *Ashcroft S. J., Carson A. S., Carter W. and Laye P. G.*, Trans. Faraday Soc., **61**, 225—229 (1965).
28. *Astle M. J.*, Industrial Organic Nitrogen Compounds, Reinhold, New York, 1961.
29. *Aston J. G.*, Ind. Eng. Chem., **34**, 514—521 (1942).
30. *Aston J. G.*, «The Third Law of Thermodynamics and Statistical Mechanics», in H. S. Taylor and S. Glasstone (Eds), A Treatise on Physical Chemistry, Vol. I, 3rd Ed., Van Nostrand, New York, 1942, Chap. IV.
31. *Aston J. G.*, Discussions Faraday Soc., **10**, 73—79 (1951).
32. *Aston J. G., Fidinoff M. L. and Forster W. S.*, J. Am. Chem. Soc., **61**, 1539—1543 (1939).
33. *Aston J. G., Fink H. L., Bestul A. B., Pace F. L. and Szasz G. J.*, J. Am. Chem. Soc., **68**, 52—57 (1946).
34. *Aston J. G., Fink H. L., Janz G. J. and Russel K. E.*, J. Am. Chem. Soc., **73**, 1939—1945 (1951).
35. *Aston J. G., Fink H. L., and Schumann S. C.*, J. Am. Chem. Soc., **65**, 341—346 (1943).
36. *Aston J. G., Fink H. L., Tooke J. W. and Cines M. R.*, Anal. Chem., **19**, 218—221 (1947).
37. *Aston J. G., Janz G. J. and Russell K. E.*, J. Am. Chem. Soc., **73**, 1943—1945 (1951).
38. *Aston J. G., Kennedy R. M. and Schumann S. C.*, J. Am. Chem. Soc., **62**, 2059—2063 (1940).
39. *Aston J. G., Mastrangelo S. V. R. and Moessen G. W.*, J. Am. Chem. Soc., **72**, 5287—5291 (1950).
40. *Aston J. G. and Messerly G. H.*, J. Am. Chem. Soc., **58**, 2354—2361 (1936).
41. *Aston J. G. and Messerly G. H.*, J. Am. Chem. Soc., **62**, 1917—1923 (1940).
42. *Aston J. G., Rock E. J. and Isserow S.*, J. Am. Chem. Soc., **74**, 2484—2486 (1952).
43. *Aston J. G., Sagenkahn M. L., Szasz G. J., Moessen G. W. and Zuhr H. F.*, J. Am. Chem. Soc., **66**, 1171—1177 (1944).
44. *Aston J. G., Siller C. W. and Messerly G. H.*, J. Am. Chem. Soc., **59**, 1743—1751 (1937).
45. *Aston J. G. and Szasz G. J.*, J. Am. Chem. Soc., **69**, 3108—3114 (1947).
46. *Aston J. G., Wills P. E. and Zolki T. P.*, J. Am. Chem. Soc., **77**, 3939—3941 (1955).
47. *Aston J. G., Wood J. L. and Zolki T. P.*, J. Am. Chem. Soc., **75**, 6202—6204 (1953).
48. *Aston J. G. and Ziemer C. W.*, J. Am. Chem. Soc., **68**, 1405—1413 (1946).
49. *Aston L. G., Zolki T. P. and Wood J. L.*, J. Am. Chem. Soc., **77**, 281—284 (1955).
50. *Atherton P. G. and Appl B.*, Sci. Thesis, University of Queensland, Brisbane, Australia, 1952.
51. *Atkinson B. and Stedman M.*, J. Chem. Soc., 512—519 (1962).
52. *Atkinson B. and Trenwith A. B.*, J. Chem. Phys., **20**, 754—755 (1952).
53. *Auer W.*, in K. Schafer and E. Lax (Eds), Landolt-Börnstein: Zahlenwerte und Funktionen aus Physik, Chemie, Astronomie, Geophysik und Technik, Band 11, Teil 4, Springer-Verlag, Berlin, 1961, pp. 179—393.
54. *Ayers G. W., Jr. and Agruss M. S.*, J. Am. Chem. Soc., **61**, 83—85 (1939).
55. *Badoche M.*, Bull. Soc. Chim. France, **4**, 549—558 (1937).
56. *Badoche M.*, Bull. Soc. Chim. France, **6**, 570—579 (1939).
57. *Badoche M.*, Bull. Soc. Chim. France, **8**, 212—220 (1941).
58. *Badoche M.*, Bull. Soc. Chim. France, **9**, 86—95 (1942).
59. *Badoche M.*, Bull. Soc. Chim. France, **37—43** (1946).
60. *Бабицз В. Ф.*, ДАН СССР, **140**, 1358—1360 (1961).
61. *Bak B.*, Kgl. Danske Videnskab. Selskab., Mat.-Fys. Medd., **24**, 3—14 (1948).
62. *Bak B. and Andersen F. A.*, J. Chem. Phys., **22**, 1050—1053 (1954).
63. *Bak B., Brodersen S. and Hansen L.*, Acta Chem. Scand., **9**, 749—762 (1955).
64. *Baker A. W. and Lord R. C.*, J. Chem. Phys., **23**, 1636—1643 (1955).
65. *Baker G., Littlefair J. H., Shaw R. and Thynne J. C. J.*, J. Chem. Soc., 6970—6972 (1965).
66. *Backer J. W. and Tweed W. T.*, J. Chem. Soc., 796—802 (1941).

66. *Balandin A. A.*, Катализ в высшей школе, т. I, № 5, Изд-во МГУ, М., 1962.
67. *Balandin A. A., Klabunovskiy E. I., Oberezhok-Yanubova A. P., Bryusov H. H.*, Изв. АН СССР, ОХН, 5, 784—786 (1960).
68. *Vambach G.*, Kältetechnik, 8, 334—339 (1956).
69. *Vanerjee S. C., Bigg D. C. and Doraiswamy L. K.*, Brit. Chem. Eng., 9, 688—689 (1964).
70. *Vanerjee S. C. and Doraiswamy L. K.*, Brit. Chem. Eng., 9, 311—313 (1964).
71. *Banse H. and Parks G. S.*, J. Am. Chem. Soc., 55, 3223—3226 (1933).
72. *Barakat T. M., Legge N. and Pullin A. D. E.*, Trans. Faraday Soc., 59, 1764—1772 (1963).
73. *Barber C. M. and Westrum E. F., Jr.*, J. Phys. Chem., 67, 2373—2376 (1963).
74. *Barrett J. W. and Linstead R. P.*, J. Chem. Soc., 436—442 (1935).
75. *Barrett J. W. and Linstead R. P.*, J. Chem. Soc., 611—616 (1936).
76. *Barrow G. M.*, J. Chem. Phys., 20, 1739—1744 (1952).
77. *Barrow G. M. and McClellan A. L.*, J. Am. Chem. Soc., 73, 573—575 (1951).
78. *Barrow G. M. and Pitzer K. S.*, Ind. Eng. Chem., 41, 2737—2740 (1949).
79. *Bartell L. S. and Brockway L. O.*, J. Chem. Phys., 23, 1860—1862 (1955).
80. *Bartolo H. F. and Rossini F. D.*, J. Phys. Chem., 64, 1685—1689 (1960).
81. *Bastiansen O. and Smedvik L.*, Acta Chem. Scand., 7, 652—656 (1953).
82. *Bauder A. and Günthard H. H.*, Helv. Chim. Acta, 41, 670—673 (1958).
83. *Baur E. and Frater S.*, Helv. Chim. Acta, 24, 768—782 (1941).
84. *Baxter G. P., Bezenberger F. K. and Wilson C. H.*, J. Am. Chem. Soc., 42, 1386—1393 (1920).
85. *Baxter G. P. and Grose M. R.*, J. Am. Chem. Soc., 37, 1061—1072 (1915).
86. *Baxter G. P., Hickey C. H. and Holmes W. C.*, J. Am. Chem. Soc., 29, 127—136 (1907).
87. *Beard G. V.*, Univ. Microfilms Publ. No. 867, 34 pp.; Microfilm Abstr., 7 (2), 42—44 (1947).
88. *Beattie J. A., Su G.-J. and Simard G. L.*, J. Am. Chem. Soc., 61 924—925 (1939).
89. *Becker E. D., Charney E. and Anno T.*, J. Chem. Phys. 42, 942—949 (1965).
90. *Becker G. and Roth W. A.*, Ber., 67B, 627—632 (1934).
91. *Becker G. and Roth W. A.*, Z. Phys. Chem. (Leipzig), A169, 287—296 (1934).
92. *Beckett C. W., Freeman N. K. and Pitzer K. S.*, J. Am. Chem. Soc., 70, 4227—4230 (1948).
93. *Bedford A. F., Beezer A. E. and Mortimer C. T.*, J. Chem. Soc., 2039—2043 (1963).
94. *Bedford A. F., Beezer A. E., Mortimer C. T. and Springall H. D.*, J. Chem. Soc., 3823—3828 (1963).
95. *Bedford A. F., Carey J. G., Millar I. T., Mortimer C. T. and Springall H. D.*, J. Chem. Soc., 3895—3898 (1962).
96. *Bedford A. F., Edmondson P. B. and Mortimer C. T.*, J. Chem. Soc., 2927—2931 (1962).
97. *Beeck O.*, Discussions Faraday Soc., 8, 118—128 (1950).
98. *Beezer A. E., Mortimer C. T., Springall H. D., Sondheimer F. and Wolovsky R.*, J. Chem. Soc., 216—220 (1965).
99. *Bekkedahl N. and Wood L. A.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 19, 551—558 (1937).
100. *Bekkedahl N., Wood L. A. and Wojciechowski M.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 17, 883—894 (1936).
101. *Bellis H. E. and Slowinski E. J., Jr.*, Spectrochim. Acta, 15, 1103—1117 (1959).
102. *Bender P. and Farber J.*, J. Am. Chem. Soc., 74, 1450—1452 (1952).
103. *Bennewitz K. and Rossner W.*, Z. Phys. Chem. (Leipzig), B39, 126—144 (1938).
104. *Benson S. W.*, J. Chem. Phys., 43, 2044—2046 (1965).
105. *Benson S. W. and Amano A.*, J. Chem. Phys., 36, 3464—3471 (1962).

66. *Benson S. W. and Bose A. N.*, J. Chem. Phys., 37, 2935—2940 (1962).
67. *Benson S. W. and Buss J. H.*, J. Phys. Chem., 61, 104—109 (1957).
68. *Benson S. W., Buss J. H.*, J. Chem. Phys., 29, 546—572 (1958).
69. *Bent H. A.*, «Electron Correlation and Bond Properties in Some Selected Sulfur Compounds», in N. Kharasch and C. Y. Meyers (Eds.), Chemistry of Organic Sulfur Compounds, Vol. II, Pergamon Press, London, 1966, pp. 1—34.
70. *Berg L., Carpenter H. C., Daly J. B., Dev R., Herzog H. A., Hippely P. R., Kindschy E. O. and Popovac D. C.*, Proc. Montana Acad. Sci., 7/8, 85—125 (1947—1948).
1. *Berg W. T., Scott D. W., Hubbard W. N., Todd S. S., Messerly J. F., Hosenlopp I. A., Osborn A., Doustin D. R. and McCullough J. P.*, J. Phys. Chem., 65, 1425—1430 (1961).
2. *Berliner E.*, J. Am. Chem. Soc., 68, 49—51 (1946).
3. *Berman N. S., Larkam C. W. and McKetta J. J.*, J. Chem. Eng. Data, 9, 218—219 (1964).
4. *Berman N. S. and McKetta J. J.*, J. Phys. Chem., 66, 1444—1448 (1962).
5. *Berman N. S. and McKetta J. J.*, private communication, June, 1962.
6. *Bernstein H. J.*, J. Chem. Phys., 24, 911—912 (1956).
7. *Bernstein H. J.*, Trans. Faraday Soc., 58, 2285—2306 (1962).
8. *Bernstein H. J. and Herzberg G.*, J. Chem. Phys., 16, 30—39 (1948).
9. *Bernstein H. J. and Ramsay D. A.*, J. Chem. Phys., 17, 556—565 (1949).
10. *Berthelot D.*, J. Phys., 8, 263—271 (1899).
1. *Berthelot M.*, Thermochemie: Données et Lois Numériques, Gauthier-Villars, Paris, 1897.
2. *Berthelot M.*, Ann. Chim. Phys., 22, 322—326 (1901).
3. *Berthelot M. P. E., Andre G. and Matignon C.*, Compt. Rend., 111, 6—9 (1890).
4. *Reynold E. T., Jr. and McKetta J. J.*, J. Phys. Chem., 67, 2761—2765 (1963).
5. *Bichowsky F. R. and Rossini F. D.*, The Thermochemistry of the Chemical Substances, Reinhold, New York, 1936.
6. *Biddiscombe D. P., Collerson R. R., Handley R., Herington E. F. G., Martin J. F. and Sprake C. H. S.*, J. Chem. Soc., 1954—1957 (1963).
7. *Biddiscombe D. P., Coulson E. A., Handley R. and Herington E. F. G.*, J. Chem. Soc., 1957—1967 (1954).
8. *Biddiscombe D. P., Handley R., Harrop D., Head A. J., Lewis G. B., Martin J. F. and Sprake C. H. S.*, J. Chem. Soc., 5764—5768 (1963).
9. *Biddiscombe D. P. and Martin J. F.*, Trans. Faraday Soc., 54, 1316—1322 (1958).
10. *Bills C. E., McDonald F. G., BeMiller L. N., Steel G. E. and Nussmeier M.*, J. Biol. Chem., 93, 775—785 (1931).
1. *Binder J. L.*, J. Chem. Phys., 17, 499—500 (1949).
2. *Binder J. L.*, J. Chem. Phys. 18, 77—78 (1950).
3. *Birdsall C. M., Jenkins A. C., DiPaolo F. S., Beattie J. A. and Apt C. M.*, J. Chem. Phys., 23, 441—452 (1955).
4. *Bjellerup L.*, unpublished work, quoted by *Smith L., Bjellerup L., Krook S. and Westermark H.*, Acta Chem. Scand., 7, 65—86 (1953).
5. *Bjellerup L.*, Acta Chem. Scand., 13, 1511—1514 (1959).
6. *Bjellerup L.*, Acta Chem. Scand., 14, 617—624 (1960).
7. *Bjellerup L.*, Acta Chem. Scand., 15, 121—140 (1961).
8. *Bjellerup L.*, Acta Chem. Scand., 15, 231—241 (1961).
9. *Bjellerup L.*, Svensk Kem. Tidskr., 73, 144—152 (1961).
10. *Bjellerup L.*, «Combustion in a Bomb of Organic Bromine Compounds», in H. A. Skinner (Ed.), Experimental Thermochemistry, Vol. II, Interscience Publishers, New York, 1962, pp. 41—55, Chap. 3.
41. *Bjellerup L. and Smith L.*, Kgl. Fysiograf. Sällskap. Lund., Forh., 24, 21—33 (1954).

142. Bjellerup L., Sunner S. and Wadsö I., Acta Chem. Scand., 11, 1761—1765 (1957).
143. Blau H. H., Jr., and Nielsen H. H., J. Mol. Spectrosc., 1, 124—132 (1957).
144. Bodenstein M., Günther P. and Hoffmeister F., Z. Angew. Chem., 39, 875—880 (1926).
145. Borino G. B., Manzoni-Ansidei R. and Rolla M. Ric. Sci., 8, 357—361 (1937).
146. Borjesson B., Nakase Y. and Sunner S., Acta Chem. Scand., 20, 803—810 (1966).
147. Born M. and von Kármán T., Phys. Z., 13, 297—309 (1912).
148. Borsook H. and Huffman H., «Some Thermodynamical Considerations of Amino Acids, Peptides, and Related Substances» in C. L. A. Schmidt (Ed.), The Chemistry of the Amino Acids and Proteins, 2nd ed., Charles C. Thomas, Springfield, Ill., 1944, pp. 822—870, Chapter XV.
149. Bose A. N. and Benson S. W., J. Chem. Phys., 37, 1081—1084 (1962).
150. Bost R. W. and Everett J. E., J. Am. Chem. Soc., 62, 1752—1754 (1940).
151. Boundy R. H. and Boyer R. F. (Eds.), Styrene, Its Polymers, Copolymers and Derivatives (A.C.S. Monograph № 115), Reinhold, New York, 1952.
152. Bowen H. J. M., Gilchrist A. and Sutton L. E., Trans. Faraday Soc., 51, 1341—1354 (1955).
153. Boyd D. R. J. and Thompson H. W., Spectrochim. Acta, 5, 308—312 (1952).
154. Boyd R. H., J. Chem. Phys., 38, 2529—2535 (1963).
155. Boyd R. H. Tetrahedron 22, 119—122 (1966).
156. Boyd R. H., Christensen R. L. and Pua R., J. Am. Chem. Soc., 87, 3554—3559 (1965).
157. Bradley J. C., Haar L. and Friedman A. S., J. Res. Natl. Bur. Std., 56, 197—200 (1956).
158. Bradley R. S. and Cleasby T. G., J. Chem. Soc., 1690—1692 (1963).
159. Brand J. C. D. and Cawthon T. M., J. Am. Chem. Soc., 77, 319—323 (1955).
160. Brandenburg J. T., Univ. Microfilms L. C. Mic., 58—1553, 55 pp.; Dissertation Abstr., 18, 1994—1995 (1958).
161. Brandt J. L. and Livingston R. L., J. Am. Chem. Soc., 78, 3573—3576 (1956).
162. von Braun J. and Engelbertz P., Ber., 56, 1573—1577 (1923).
163. Breitenbach J. W. and Derkosch J., Montash., 82, 177—179 (1951).
164. Breitenbach J. W., Derkosch J. and Wessely F., Nature, 169, 922 (1952).
165. Bremner J. G. M. and Thomas G. D., Trans. Faraday Soc., 44, 230—238, (1948).
166. Bremner J. G. M. and Thomas G. D., Trans. Faraday Soc., 44, 338—341 (1948).
167. Brewer L., Bromley L. A., Gilles P. W. and Lofgren N. L., in L. L. Quill (Ed.), The Chemistry and Metallurgy of Miscellaneous Materials—Thermodynamics, McGraw-Hill, New York, 1950, Papers 6 and 8.
168. Brickwedde F. G., private communication, cited in R. H. Boundy and R. F. Boyer (Eds.), Styrene, Its Polymers, Copolymers and Derivatives (A.C.S. Monograph № 115), Reinhold, New York, 1952, p. 65.
169. Briegleb G., Z. Elektrochem., 53, 350—361 (1949).
170. Brinkley S. R., Jr., J. Chem. Phys., 15, 107—110 (1947).
171. Brockway L. O., Beach J. Y. and Pauling L., J. Am. Chem. Soc., 57, 2693—2704 (1935).
172. Broers G. H. J., Ketelaar J. A. A. and Van Velden P. F., Rec. Trav. Chim., 69, 1122—1126 (1950).
173. Brouwer L. G. and Wibaut J. P., Rec. Trav. Chim., 53, 1001—1010 (1934).
174. Brown J. C., J. Chem. Soc., 83, 987—994 (1903).
175. Brown O. L. I. and Manov G. G., J. Am. Chem. Soc., 59, 500—502 (1937).
176. Browne C. C. and Rossini F. D., J. Phys. Chem., 64, 927—931 (1960).
177. Brüll L., Gazz. Chim. Ital., 65, 19—28 (1935).
178. Bryant W. M. D., J. Polymer Sci., 56, 277—296 (1962).
179. Bryce-Smith D. and Howlett K. E., J. Chem. Soc., 1141—1142 (1951).
180. Bruckley E. and Herington E. F. G., Trans. Faraday Soc., 61, 1618—1625 (1965).

1. Bunker P. R. and Longuet-Higgins H. C., Proc. Roy. Soc. (London), Ser. A, 280, 340—352 (1964).
2. Burcik E. J. and Yost D. M., J. Chem. Phys., 7, 1114—1115 (1939).
3. Burgess G. K., J. Res. Natl. Bur. Std., 1, 635—640 (1928).
4. Burlot E., Thomas M. and Badoche M., Mem. Poudres, 29, 226—282 (1939).
5. Burriel F., Anales Real Soc., Espan. Fis. Quim. (Madrid), 29, 89—125 (1931).
6. Busfield W. K., Ivin K. J., Mackle H. and O'Hare P. A. G., Trans. Faraday Soc., 57, 1064—1069 (1961).
7. Buller J. A. V., Ramchandani C. N. and Thomson D. W., J. Chem. Soc., 280—285 (1935).
8. Calvet E., J. Chim. Phys., 30, 140—166 (1933).
9. Camin D. L. and Rossini F. D., J. Phys. Chem., 59, 1173—1179 (1955).
10. Carlson H. G. and Westrum E. F., Jr., J. Chem. Eng. Data, 10, 134—135 (1965).
1. Carlson H. G. and Westrum E. F., Jr., J. Phys. Chem., 69, 1524—1530 (1965).
2. Carney R. A., Piotrowski E. A., Meister A. G., Braun J. H. and Cleveland F. F., J. Mol. Spectrosc., 7, 209—222 (1961).
3. Carpenter L. G. and Harle T. F., Phil. Mag., 23, 193—208 (1937).
4. Carson A. S., Carson E. M., and Wilmschurst B., Nature, 170, 320—321 (1952).
5. Carson A. S., Carter W. and Pedley J. B., Proc. Roy. Soc. (London), Ser. A, 260, 550—557 (1961).
6. Carson A. S., Hartley K. and Skinner H. A., Trans. Faraday Soc., 45, 1159—1167 (1949).
7. Carson A. S., Pritchard H. O. and Skinner H. A., J. Chem. Soc., 656—659 (1950).
8. Carson A. S. and Skinner H. A., J. Chem. Soc., 936—939 (1949).
9. Casey D. W. H. and Fordham S., J. Chem. Soc., 2513—2516 (1951).
10. Cass R. C., Fletcher S. E., Mortimer C. T., Quincey P. G. and Springall H. D., J. Chem. Soc., 958—963 (1958).
1. Cass R. C., Fletcher S. E., Mortimer C. T., Quincey P. G. and Springall H. D., J. Chem. Soc., 2595—2597 (1958).
2. Cass R. C., Fletcher S. E., Mortimer C. T., Springall H. D. and White T. R., J. Chem. Soc., 1406—1410 (1958).
3. Catalano E. and Pitzer K. S., J. Am. Chem. Soc., 80, 1054—1057 (1958).
4. Catalano E. and Pitzer K. S., J. Phys. Chem., 62, 838—840 (1958).
5. Catalano E. and Pitzer K. S., J. Phys. Chem., 62, 873—874 (1958).
6. Caves R. M., McLaughlin R. L. and Wise P. H., J. Am. Chem. Soc., 76, 522—524 (1954).
7. Černý C. and Erdos E., Collect. Czech. Chem. Commun., 19, 646—652 (1954).
8. Challoner A. R., Gundry H. A. and Meetham A. R., Phil. Trans. Roy. Soc. London, Ser. A, 247, 553—580 (1955).
9. Chang S. S. and Westrum E. F., Jr., J. Phys. Chem., 64, 1547—1551 (1960).
10. Chang S. S. and Westrum E. F., Jr., J. Phys. Chem., 64, 1551—1552 (1960).
1. Chang S. S. and Westrum E. F., Jr., J. Chem. Phys., 36, 2420—2423 (1962).
2. Chang S. S. and Westrum E. F., Jr., J. Chem. Phys., 36, 2574—2577 (1962).
3. Chang S. S. and Westrum E. F., Jr., J. Phys. Chem., 66, 524—527 (1962).
4. Chao J., Dissertation, Carnegie Institute of Technology, Pittsburgh, 1961.
5. Chao J. and Rossini F. D., J. Chem. Eng. Data, 10, 374—379 (1965).
6. Charbonnet G. H. and Singleton W. S., J. Am. Oil Chemists' Soc., 24, 140—142 (1947).
7. Chari N. C. S., Univ. Microfilms L.S. Mic., 60—6850, 188 pp., Dissertation Abstr., 21, 2220 (1961).
8. Charlu T. V. and Rao M. R. A., Proc. Indian Acad. Sci. Sect. A, 60, 31—35 (1964).
9. Cheng D. C.-H. and McCoubrey J. C., J. Chem. Soc., 4993—4995 (1963).
10. Chermin H. A. G., Petrol. Refiner, 40 (2), 145—148 (1961).
1. Chermin H. A. G., Petrol. Refiner, 40 (3), 181—184 (1961).

222. *Chermin H. A. G.*, Hydrocarbon Process. Petrol. Refiner, **40** (6), 179—182 (1961).
223. *Chermin H. A. G.*, Hydrocarbon Process. Petrol. Refiner, **40** (9), 261—263 (1961).
224. *Chermin H. A. G.*, Hydrocarbon Process. Petrol. Refiner, **40** (10), 145—147 (1961).
225. *Chernick C. L.*, *Skinner H. A.* and *Wadso I.*, Trans. Faraday Soc., **52**, 1088—1093 (1956).
226. *Claassen H. H.*, J. Chem. Phys., **18**, 543—551 (1950).
227. *Claassen H. H.*, J. Chem. Phys., **22**, 50—52 (1954).
228. *Clarke T. H.* and *Stegemen G.*, J. Am. Chem. Soc., **61**, 1726—1730 (1939).
229. *Clarke T. H.* and *Stegemen G.*, J. Am. Chem. Soc., **62**, 1815—1817 (1940).
230. *Clarke T. H.* and *Stegemen G.*, J. Am. Chem. Soc., **66**, 457—459 (1944).
231. *Clausius R.*, Ann. Phys. Chem., **125**, 353—400 (1865).
232. *Claydon A. P.* and *Mortimer C. T.*, J. Chem. Soc., 3212—3216 (1962).
233. *Clayton J. O.* and *Giauque W. F.*, J. Am. Chem. Soc., **54**, 2610—2626 (1932).
234. *Clements H. E.*, *Wise K. V.* and *Johnsen S. E. J.*, J. Am. Chem. Soc., **75**, 1593—1595 (1953).
235. *Clever H. L.*, *Wulff C. A.* and *Westrum E. F., Jr.*, J. Phys. Chem., **69**, 1983—1988 (1965).
236. *Cline J. E.* and *Kistiakowsky G. B.*, J. Chem. Phys., **5**, 990 (1937).
237. *Cline J. K.* and *Andrews D. H.*, J. Am. Chem. Soc., **53**, 3668—3673 (1931).
238. *Clopatt J. A.*, Soc. Sci. Fenn. Commentat. Phys.-Math., **6** (4) 1—15 (1932).
239. *Coates G. E.* and *Sutton L. E.*, J. Chem. Soc., 1187—1196 (1948).
240. *Cohen E. R.*, *Crowe K. M.* and *Dumond J. W. M.*, The Fundamental Constants of Physics, Interscience Publishers, New York, 1957.
241. *Cole A. G.*, *Hutchens J. O.* and *Stout J. W.*, J. Phys. Chem., **67**, 1852—1855 (1963).
242. *Cole A. G.*, *Hutchens J. O.* and *Stout J. W.*, J. Phys. Chem., **67**, 2245—2247 (1963).
243. *Cole L. G.*, *Farber M.* and *Elverum G. W., Jr.*, J. Chem. Phys., **20**, 586—590 (1952).
244. *Cole L. G.* and *Gilbert E. C.*, J. Am. Chem. Soc., **73**, 5423—5427 (1951).
245. *Coleman C. F.* and *De Vries T.*, J. Am. Chem. Soc., **71**, 2839—2841 (1949).
246. *Coleman D. J.* and *Pilcher G.*, Trans. Faraday Soc., **62**, 821—827 (1966).
247. *Coleman D. J.* and *Skinner H. A.*, Trans. Faraday Soc., **62**, 2057—2062 (1966).
248. *Coles D. K.* and *Hughes R. H.*, Phys. Rev., **76**, 178 (1949).
249. *Collatz H.*, Cellulosechem., **17**, 128—129 (1936).
250. *Colomina M.*, *Boned Corral M. L.* and *Turrion C.*, Anales Real Soc. Espan. Fis. Quim. (Madrid), Ser. B, **57**, 655—664 (1961).
251. *Colomina M.*, *Latorre C.* and *Perez-Ossorio R.*, Pure Appl. Chem., **2**, 133—135 (1961).
252. *Colomina M.*, *Pell A. S.*, *Skinner H. A.* and *Coleman D. J.*, Trans. Faraday Soc., **61**, 2641—2645 (1965).
253. *Colomina M.*, *Perez-Ossorio R.*, *Boned Corral M. L.*, *Panea M.* and *Turrion C.*, Anales Real Soc. Espan. Fis. Quim. (Madrid), Ser. B, **57**, 665—672 (1961).
254. *Colomina M.*, *Perez-Ossorio R.*, *Turrion C.*, *Boned Corral M. L.* and *Pedraja B.*, Anales Real Soc. Espan. Fis. Quim. (Madrid), Ser. B, **60**, 627—638 (1964).
255. *Colomina M.*, *Turrion C.*, *Boned Corral M. L.* and *Panea M.*, Anales Real Soc. Espan. Fis. Quim. (Madrid), Ser. B, **60**, 619—626 (1964).
256. *Colomina Barberá M.*, *Cambeiro M.*, *Perez-Ossorio R.* and *Latorre C.*, Anales Real Soc. Espan. Fis. Quim. (Madrid) Ser. B, **55**, 501—514 (1959).
257. *Colwell J. H.*, *Gill E. K.*, *Morrison J. A.*, J. Chem. Phys., **39**, 635—653 (1963).
258. *Conn J. B.*, *Kistiakowsky G. B.*, *Roberts R. M.* and *Smith E. A.*, J. Am. Chem. Soc., **64**, 1747—1752 (1942).

59. *Conn J. B.*, *Kistiakowsky G. B.* and *Smith E. A.*, J. Am. Chem. Soc., **60**, 2764—2771 (1938).
60. *Conn J. B.*, *Kistiakowsky G. B.* and *Smith E. A.*, J. Am. Chem. Soc., **61**, 216—217 (1939).
61. *Conn J. B.*, *Kistiakowsky G. B.* and *Smith E. A.*, J. Am. Chem. Soc., **61**, 1868—1876 (1939).
62. *Coon E. D.* and *Daniels F.*, J. Phys. Chem., **37**, 1—12 (1933).
63. *Coops J.* and *Hoijsink G. J.*, Rec. Trav. Chim., **69**, 358—367 (1950).
64. *Coops J.*, *Hoijsink G. J.* and *Kramer T. J. E.*, Rec. Trav. Chim., **72**, 793—797 (1953).
65. *Coops J.*, *Hoijsink G. J.*, *Kramer T. J. E.* and *Faber A. C.*, Rec. Trav. Chim., **72**, 765—773 (1953).
66. *Coops J.*, *Hoijsink G. J.*, *Kramer T. J. E.* and *Faber A. C.*, Rec. Trav. Chim., **72**, 781—784 (1953).
67. *Coops J.* and *Kaarsemaker S.*, Rec. Trav. Chim., **69**, 1364 (1950).
68. *Coops J.*, *Mulder D.*, *Dienske J. W.* and *Smittenberg J.*, Rec. Trav. Chim., **65**, 128 (1946).
69. *Coops J.*, *Mulder D.*, *Dienske J. W.* and *Smittenberg J.*, Rec. Trav. Chim., **66**, 153—160 (1947).
70. *Coops J.*, *Mulder D.*, *Dienske J. W.* and *Smittenberg J.*, Rec. Trav. Chim., **72**, 785—792 (1953).
71. *Coops J.*, *van Kamp H.*, *Lambregts W. A.*, *Visser B. J.* and *Dekker H.*, Rec. Trav. Chim., **79**, 1226—1234 (1960).
72. *Coops J.*, *Van Nes K.*, *Kentie A.* and *Dienske J. W.*, Rec. Trav. Chim., **66**, 113—130 (1947).
73. *Copp J. L.* and *Findlay T. J. V.*, Trans. Faraday Soc., **56**, 13—22 (1960).
74. *Corruccini R. J.* and *Ginnings D. C.*, J. Am. Chem. Soc., **69**, 2291—2294 (1947).
75. *Costain C. C.*, J. Chem. Phys., **29**, 864—874 (1958).
76. *Cottrell T. L.*, The Strengths of Chemical Bonds, 2nd Ed., Butterworths, London, 1958. (Русский перевод издания 1954 г.: *Компелл Т. Л.*, Прочность химических связей, Издатиплут, М., 1956.)
77. *Cottrell T. L.* and *Gill J. E.*, J. Chem. Soc., 1798—1800 (1951).
78. *Coughlin J. P.*, U.S. Bur. Mines Bull., **542**, 80 pp. (1954).
79. *Counsell J. F.*, *Green J. H. S.*, *Hales J. L.* and *Martin J. F.*, Trans. Faraday Soc., **61**, 212—218 (1965).
80. *Counsell J. F.*, *Hales J. L.* and *Martin J. F.*, Trans. Faraday Soc., **61**, 1869—1875 (1965).
81. *Coutts J. W.* and *Livingston R. L.*, J. Am. Chem. Soc., **75**, 1542—1547 (1953).
82. *Cowan M.* and *Gordy W.*, Phys. Rev., **104**, 551—552 (1956).
83. *Cox A. P.* and *Esbutt A. S.*, J. Chem. Phys., **38**, 1636—1643 (1963).
84. *Cox J. D.*, Trans. Faraday Soc., **56**, 959—964 (1960).
85. *Cox J. D.*, Pure Appl. Chem., **2**, 125—128 (1961).
86. *Cox J. D.*, Tetrahedron, **18**, 1337—1350 (1962).
87. *Cox J. D.* and *Andon R. J. L.*, Trans. Faraday Soc., **54**, 1622—1629 (1958).
88. *Cox J. D.*, *Challoner A. R.* and *Meetham A. R.*, J. Chem. Soc., 265—271 (1954).
89. *Cox J. D.* and *Gundry H. A.*, J. Chem. Soc., 1019—1022 (1958).
90. *Cox J. D.*, *Gundry H. A.* and *Head A. J.*, Trans. Faraday Soc., **60**, 653—665 (1964).
91. *Cox J. D.*, *Gundry H. A.* and *Head A. J.*, Trans. Faraday Soc., **61**, 1594—1600 (1965).
92. *Cox J. D.* and *Head A. J.*, Trans. Faraday Soc., **58**, 1839—1845 (1962).
93. *Cox J. R., Jr.* and *Ray J. D.*, J. Chem. Phys., **34**, 1072—1073 (1961).
94. *Craver A. E.*, пат. США 1851754 (29 марта 1932); *Craver A. E.*, *Bailey G. C.*, пат. США 1383059 (28 июня 1921).
95. *Cross P. C.*, J. Chem. Phys., **3**, 825—827 (1935).

296. *Crowe R. W. and Smyth C. P.*, J. Am. Chem. Soc., **72**, 4009—4015 (1950).
 297. *Cubberley A. H. and Mueller M. B.*, J. Am. Chem. Soc., **68**, 1149—1151 (1946).
 298. *Cummings G. A. M. and McLaughlin E.*, J. Chem. Soc., 1391—1392 (1955).
 299. *Curl R. F., Jr.*, J. Chem. Phys., **30**, 1529—1536 (1959).
 300. *Currie R. M., Bennett C. O. and Holcomb D. E.*, Ind. Eng. Chem., **44**, 329—331 (1952).
 301. *Cuthbertson G. R. and Kistiakowsky G. B.*, J. Chem. Phys., **3**, 631—634 (1935).
 302. *Daasch L. W., Liang C. Y. and Nielsen J. R.*, J. Chem. Phys., **22**, 1293—1303 (1954).
 303. *Dallwitz E. and Briner E.*, Helv. Chim. Acta, **36**, 1166—1173 (1953).
 304. *Daly L. H. and Wiberley S. E.*, J. Mol. Spectrosc., **2**, 177—186 (1958).
 305. *Danford M. D. and Livingston R. L.*, J. Am. Chem. Soc., **81**, 4157—4159 (1959).
 306. *Danti A.*, J. Chem. Phys., **27**, 1227 (1957).
 307. *Dauben W. G., Rohr O., Labbauf A. and Rossini F. D.*, J. Phys. Chem., **64**, 283—284 (1960).
 308. *Davies J., Lacher J. R. and Park J. D.*, «Heats of Hydrogenation», Presented at the 19th Calorimetry Conference, Washington, D.C., 1964.
 309. *Davies J. V. and Sunner S.*, Acta Chem. Scand., **16**, 1870—1876 (1962).
 310. *Davies M. and Jones J. I.*, Trans. Faraday Soc., **50**, 1042—1047 (1954).
 311. *Davies T. and Staveley L. A. K.*, J. Chem. Soc., 2563 (1956).
 312. *Davis A., Cleveland F. F. and Meister A. G.*, J. Chem. Phys., **20**, 454—459 (1952).
 313. *Davis G. L. and Burrows G. H.*, J. Am. Chem. Soc., **58**, 311—312 (1936).
 314. *Davis H. S. and Wiedeman O. F.*, Ind. Eng. Chem., **37**, 482—485 (1945).
 315. *Debye P.*, Ann. Phys., **39**, 789—839 (1912).
 316. *Decker C. E., Meister A. G. and Cleveland F. F.*, J. Chem. Phys., **19**, 784—788 (1951).
 317. *Decker C. E., Meister A. G., Cleveland F. F. and Bernstein R. B.*, J. Chem. Phys., **21**, 1781—1783 (1953).
 318. *Deese R. F., Jr.*, J. Am. Chem. Soc., **53**, 3673—3683 (1931).
 319. *Deffet L.* Répertoire des Composés Organiques Polymorphes, Editions Desoer, Liege, 1942.
 320. *Délépine M. and Badoche M.*, Compt. Rend., **214**, 777—781 (1942).
 321. *Denbigh K. G.*, The Principles of Chemical Equilibrium, Cambridge University Press, Cambridge, England, 1957.
 322. *DeNevers N. and Martin J. J.*, Am. Inst. Chem. Eng. J., **6**, 43—49 (1960).
 323. *De Vries T. and Collins B. T.*, J. Am. Chem. Soc., **63**, 1343—1346 (1941).
 324. *De Vries T. and Collins B. T.*, J. Am. Chem. Soc., **64**, 1224—1225 (1942).
 325. *Dewar M. J. S. and Pettit R.*, J. Chem. Soc., 1625—1634 (1954).
 326. *Dewar M. J. S. and Schmeising H. N.* Tetrahedron, **5**, 166—178 (1959); **11**, 96—120 (1960).
 327. *Dickinson H. C.*, Natl. Bur. Std. Bull., **11**, 189—257 (1914).
 328. *Dilke M. H. and Eley D. D.*, J. Chem. Soc., 2601—2612 (1949).
 329. *Dinnyan R. E. and Pace E. L.*, J. Chem. Phys., **32**, 805—809 (1960).
 330. *Dixon W. B. and Wilson E. B., Jr.*, J. Chem. Phys., **35**, 191—198 (1961).
 331. *Dobratz C. J.*, Ind. Eng. Chem., **33**, 759—762 (1941).
 332. *Dodd R. E., Woodward L. A. and Roberts H. L.*, Trans. Faraday Soc., **52**, 1052—1061 (1956).
 333. *Dodge B. F.*, Brit. Chem. Eng., **7**, 603—606, 683—688 (1962).
 334. *Dolliver M. A., Gresham T. L., Kistiakowsky G. B., Smith E. A. and Vaughan W. E.*, J. Am. Chem. Soc., **60**, 440—450 (1938).
 335. *Dolliver M. A., Gresham T. L., Kistiakowsky G. B. and Vaughan W. E.*, J. Am. Chem. Soc., **59**, 831—841 (1937).
 336. *Donovan T. M., Shomate C. H. and McBride W. R.*, J. Phys. Chem., **64**, 281—282 (1960).

37. *Douglas D. E. and Winkler C. A.*, Can. J. Res., **25B**, 381—386 (1947).
 38. *Douglas T. B. and King E. G.*, «High-Temperature Drop Calorimetry», in J. P. McCullough and D. W. Scott (Eds.), Experimental Thermodynamics, Butterworths, London, 1966, Chap. 7.
 39. *Doulin D. R., Harrison R. H., Moore R. T. and McCullough J. P.*, J. Chem. Phys., **35**, 1357—1366 (1961).
 40. *Doulin D. R., Harrison R. H., Moore R. T. and McCullough J. P.*, J. Chem. Eng. Data, **9**, 358—363 (1964).
 41. *Doulin D. R. and Huffman H. M.*, J. Am. Chem. Soc., **68**, 173—176 (1946).
 42. *Doulin D. R. and Huffman H. M.*, J. Am. Chem. Soc., **68**, 1704—1708 (1946).
 43. *Doulin D. R., Moore R. T., Dawson J. P. and Waddington G.*, J. Am. Chem. Soc., **80**, 2031—2038 (1958).
 44. *Doulin D. R., Moore R. T. and Waddington G.*, J. Phys. Chem., **63**, 1959—1966 (1959).
 45. *Dowling J. M. and Meister A. G.*, J. Chem. Phys., **22**, 1042—1044 (1954).
 46. *Dowling J. M., Puranik P. G., Meister A. G. and Miller S. I.*, J. Chem. Phys., **26**, 233—240 (1957).
 47. *Draeger A. A., Gwin G. T., Leesemann C. J. G. and Morrow M. R.*, Petrol. Refiner, **30**, (8), 71—76 (1951).
 48. *Drahowzal F. and Klamann D.*, Monatsh., **82**, 594—599 (1951).
 49. *Drayton L. G. and Thompson H. W.*, J. Chem. Soc., 1416—1419 (1948).
 50. *Dreisbach R. R.*, Pressure-Volume. Temperature Relationship of Organic Compounds, 3rd Ed., Handbook Publishers, Sandusky, Ohio, 1952.
 51. *Dreisbach R. R.*, Physical Properties of Chemical Compounds, Vol. I (Advances in Chemistry Series, No. 15), American Chemical Society, Washington, D.C., 1955.
 52. *Dreisbach R. R.*, Physical Properties of Chemical Compounds, Vol. II (Advances in Chemistry Series, No. 22), American Chemical Society, Washington D.C., 1959.
 53. *Dreisbach R. R.*, Physical Properties of Chemical Compounds, Vol. III (Advances in Chemistry Series, No. 29), American Chemical Society, Washington D.C., 1961.
 54. *Dreizler H. and Rudolph H. D.*, Z. Naturforsch., **17a**, 712—732 (1962).
 55. *Duff G. M. S.*, J. Appl. Chem. (London), **5**, 642 (1955).
 56. *Duncan N. E. and Janz G. J.*, J. Chem. Phys., **20**, 1644—1645 (1952).
 57. *Duncan N. E. and Janz G. J.*, J. Chem. Phys., **23**, 434—440 (1955).
 58. *Dunken H. and Wolf K. L.*, Z. Phys. Chem. (Leipzig), **B38**, 441—450 (1938).
 59. *Dunlop A. K.*, J. Am. Chem. Soc., **77**, 2016 (1955).
 60. *Duus H. C.*, Ind. Eng. Chem., **47**, 1445—1449 (1955).
 61. *Дяткина М. Е.*, ЖКОХ, **XXVIII**, 377 (1954).
 62. *Eastman E. D. and McGavock W. C.*, J. Am. Chem. Soc., **59**, 145—151 (1937).
 63. *Eberz W. F. and Lucas H. J.*, J. Am. Chem. Soc., **56**, 1230—1234 (1934).
 64. *Eckman J. R. and Rossini F. D.*, J. Res. Natl. Bur. Std., **3**, 597—618 (1929).
 65. *Edgell W. F.*, J. Am. Chem. Soc., **69**, 660—661 (1947).
 66. *Edgell W. F., Kinsey P. A. and Amy J. W.*, J. Am. Chem. Soc., **79**, 2691—2693 (1957).
 67. *Edgell W. F., Miller G. B. and Amy J. W.*, J. Am. Chem. Soc., **79**, 2391—2393 (1957).
 68. *Edgell W. F. and Ultee C. J.*, J. Chem. Phys., **22**, 1983—1992 (1954).
 69. *Edminster W. C.*, Petrol. Refiner, **26** (7), 565—570; (8), 625—630; (9), 689—695; (10), 735—741; (11), 742—749; (12), 808—814 (1947); **27** (1), 6—14; (2) 74—81; (3), 113—119; (4), 213—221; (5), 228—235; (6), 314—321; (11), 609—615; (12), 656—663 (1948); **28** (1), 128—133; (2), 137—148; (3), 139—150; (4), 157—166; (5), 149—160; (6), 143—148; (8), 128—133; (9), 95—102; (10), 143—150; (11), 149—155; (12), 140—145 (1949).
 70. *Ejtring E.*, Thesis, University of Lund., Lund, Sweden, 1938.

371. Egan C. J. and Buss W. C., J. Phys. Chem., 63, 1887—1890 (1959).
 372. Egan C. J. and Kemp J. D., J. Am. Chem. Soc., 59, 1264—1268 (1937).
 373. Egan C. J. and Kemp J. D., J. Am. Chem. Soc., 60, 2097—2101 (1938).
 374. Egan E. P., Jr., Wakefield Z. T. and Farr T. D., J. Chem. Eng. Data, 10, 138—140 (1965).
 375. Einstein A., Ann. Phys. 22, 180—190 (1907).
 376. Eisenlohr F. and Metzner A., Z. Phys. Chem. (Leipzig), A178, 339—349 (1937).
 377. El-Sabban M. Z., Meister A. G. and Cleveland F. F., J. Chem. Phys., 19, 855—864 (1951).
 378. Enderlin L., Ann. Chim. (Paris), 10, 5—116 (1938).
 379. Эммеаус С. Г., Турков Н. М., ДАН СССР, 113, 1318—1320 (1957).
 380. Epstein M. B., Pitzer K. S. and Rossini F. D., J. Res. Natl. Bur. Std., 42, 379—382 (1949).
 381. Erlandsson G., Arkiv Fys., 8, 341—342 (1954).
 382. Erlandsson G., J. Chem. Phys., 25, 579—580 (1956).
 383. Eucken A. and Franck E. U., Z. Elektrochem., 52, 195—204 (1948).
 384. Eucken A. and Schröder E., Z. Phys. Chem. (Leipzig), B41, 307—319 (1938).
 385. von Euler H. and Martius C., Ann., 505, 73—87 (1933).
 386. Evans D. M., Hoare F. E. and Melia T. P., Trans. Faraday Soc., 58, 1511—1514 (1962).
 387. Evans F. W., Fairbrother D. M. and Skinner H. A., Trans. Faraday Soc., 55, 399—403 (1959).
 388. Evans F. W. and Skinner H. A., Trans. Faraday Soc., 55, 255—259 (1959).
 389. Evans F. W. and Skinner H. A., Trans. Faraday Soc., 55, 260—261 (1959).
 390. Evans J. C., J. Chem. Phys., 30, 934—936 (1959).
 391. Evans J. C., Spectrochim. Acta, 16, 428—442 (1960).
 392. Evans J. C., Spectrochim. Acta, 16, 1382—1392 (1960).
 393. Evans J. C. and Bernstein H. J., Can. J. Chem., 33, 1171—1182 (1955).
 394. Evans J. C. and Bernstein H. J., Can. J. Chem., 34, 1083—1092 (1956).
 395. Evans J. C. and Nyquist R. A., Spectrochim. Acta, 16, 918—928 (1960).
 396. Evans J. C. and Nyquist R. A., Spectrochim. Acta, 16, 1153—1163 (1963).
 397. Evans M. V. and Lord R. C., J. Am. Chem. Soc., 82, 1876—1882 (1960).
 398. Evans W. H., Munson T. R. and Wagman D. D., J. Res. Natl. Bur. Std., 55, 147—164 (1955).
 399. Evans W. H. and Wagman D. D., J. Res. Natl. Bur. Std., 49, 141—148 (1952).
 400. Ewell R. H. and Bourland J. F., J. Chem. Phys., 8, 635—636 (1940).
 401. Fagley T. F., Klein E. and Albrecht J. F., Jr., J. Am. Chem. Soc., 75, 3104—3106 (1953).
 402. Fagley T. F. and Myers H. W., J. Am. Chem. Soc., 76, 6001—6003 (1954).
 403. Fahrenfort J., van Reijen L. L. and Sachtler W. M. H., Z. Elektrochem. 64, 216—224 (1960).
 404. Fairbrother D. M. and Skinner H. A., Trans. Faraday Soc., 52, 956—960 (1956).
 405. Fairbrother D. M., Skinner H. A. and Evans F. W., Trans. Faraday Soc., 53, 779—783 (1957).
 406. Fajans K., Ber., 53B, 643—665 (1920).
 407. Fateley W. G. and Miller F. A., Spectrochim. Acta, 17, 857—868 (1961).
 408. Fateley W. G. and Miller F. A., Spectrochim. Acta, 18, 977—993 (1962).
 409. Fateley W. G. and Miller F. A., Spectrochim. Acta, 18, 1389 (1962).
 410. Fateley W. G. and Miller F. A., Spectrochim. Acta, 19, 611—628 (1963).
 411. Fawcett F. S., J. Am. Chem. Soc., 68, 1420—1422 (1946).
 412. Fehér F. and Berthold H. J., Z. Anorg. Allg. Chem., 284, 60—68 (1956).
 413. Feick G., J. Am. Chem. Soc., 76, 5858—5860 (1954).
 414. Feilchenfeld H., J. Phys. Chem., 61, 1133—1135 (1957).
 415. Felsing W. A. and Drake G. W., J. Am. Chem. Soc., 58, 1714—1717 (1936).
 416. Felsing W. A. and Jessen F. W., J. Am. Chem. Soc., 55, 4418—4422 (1933).

17. Ferigle S. M. and Weber A., J. Chem. Phys., 20, 1657 (1952).
 18. Ferry J. D. and Thomas S. B., J. Phys. Chem., 37, 253—255 (1933).
 19. Finke H. L., Gross M. E., Messerly J. F. and Waddington G., J. Am. Chem. Soc., 76, 854—857 (1954).
 20. Finke H. L., Gross M. E., Waddington G. and Huffman H. M., J. Am. Chem. Soc., 76, 333—341 (1954).
 21. Finke H. L., Guthrie G. B., Todd S. S., Messerly J. F. and McCullough J. P., Bull. Thermodyn. Thermochem., 10, 28 (March 1967).
 22. Finke H. L., Hossenlopp I. A. and Berg W. T., J. Phys. Chem., 69, 3030—3031 (1965).
 23. Finke H. L., Messerly J. F. and Todd S. S., J. Phys. Chem., 69, 2094—2100 (1965).
 24. Finke H. L., Scott D. W., Gross M. E., Messerly J. F. and Waddington G., J. Am. Chem. Soc., 78, 5469—5476 (1956).
 25. Finke H. L., Scott D. W., Gross M. E., Waddington G. and Huffman H. M., J. Am. Chem. Soc., 74, 2804—2806 (1952).
 26. Fiock E. F., Ginnings D. C. and Holton W. B., J. Res. Natl. Bur. Std., 6, 881—900 (1931).
 27. Fischer F., Ind. Eng. Chem., 17, 547—576 (1925).
 28. Fischer J. and Bingle J., J. Am. Chem. Soc., 77, 6511—6512 (1955).
 29. Fischl F. B., Naylor B. F., Ziemer C. W., Parks G. S. and Aston J. G., J. Am. Chem. Soc., 67, 2075—2079 (1945).
 30. Flanagan C. and Pierce L., J. Chem. Phys., 38, 2963—2969 (1963).
 31. Fletcher S. E., Mortimer C. T. and Springall H. D., J. Chem. Soc., 580—584 (1959).
 32. Flitcroft T. L. and Skinner H. A., Trans. Faraday Soc., 54, 47—53 (1958).
 33. Flitcroft T., Skinner H. A. and Whiting M. C., Trans. Faraday Soc., 53, 784—790 (1957).
 34. Flygare W. H. and Howe J. A., J. Chem. Phys., 36, 440—443 (1962).
 35. Fowell P., Lacher J. R. and Park J. D., Trans. Faraday Soc., 61, 1324—1327 (1965).
 36. Файлер П., Гуггенгейм Э., Статистическая термодинамика, Госиздат, 1949.
 37. Fox J. J. and Martin A. E., J. Chem. Soc., 884—886 (1939).
 38. Frankenburg W. G., «The Catalytic Synthesis of Ammonia from Nitrogen and Hydrogen», in P.H. Emmett (Ed.), Catalysis, Vol. III, Reinhold, New York, 1955, pp. 171—263.
 39. Franklin J. L., Ind. Eng. Chem., 41, 1070—1076 (1949).
 40. Franklin J. L. and Lumpkin H. E., J. Am. Chem. Soc., 74, 1023—1026 (1952).
 41. Frankosky M. and Aston J. G., J. Phys. Chem., 69, 3126—3132 (1965).
 42. Fraser F. M. and Prosen E. J., J. Res. Natl. Bur. Std., 54, 143—148 (1955).
 43. Fraser F. M. and Prosen E. J., J. Res. Natl. Bur. Std., 55, 329—333 (1955).
 44. Frederick K. J. and Hildebrand J. H., J. Am. Chem. Soc., 60, 1436—1439 (1938).
 45. Friedman A. S. and Haar L., J. Chem. Phys., 22, 2051—2058 (1954).
 46. Fries K. and Beyerlein F., Ann. 527, 71—83 (1936).
 47. Fries K., Walter R. and Schilling K., Ann. 516, 248—285 (1935).
 48. Frisch M. A., Barker C., Margrave J. L. and Newman M. S., J. Am. Chem. Soc., 85, 2356—2357 (1963).
 49. Frisch M. A., Bautista R. G., Margrave J. L., Parsons C. G. and Wolitz J. H., J. Am. Chem. Soc., 86, 335—336 (1964).
 50. Frye C. G., J. Chem. Eng. Data, 7, 592—595 (1962).
 51. Fuchs W., Andres K. H., Plenz J. and Veiser O., Chem. Ingr. Tech., 29, 768—771 (1957).
 52. Furukawa G. T., Douglas T. B., McCoskey R. E. and Ginnings D. C., J. Res. Natl. Bur. Std., 57, 67—82 (1956).
 53. Furukawa G. T., Ginnings D. C., McCoskey R. E. and Nelson R. A., J. Res. Natl. Bur. Std., 46, 195—206 (1951).

454. Furukawa G. T., McCoskey R. E. and King G. J., J. Res. Natl. Bur. Std., 47, 256—261 (1951).
455. Furukawa G. T., McCoskey R. E. and King G. J., J. Res. Natl. Bur. Std., 49, 273—278 (1952).
456. Furukawa G. T., McCoskey R. E. and Reilly M. L., J. Res. Natl. Bur. Std., 51, 69—72 (1953).
457. Furukawa G. T., McCoskey R. E. and Reilly M. L., J. Res. Natl. Bur. Std., 52, 11—16 (1954).
458. Gamson B. W. and Watson K. M., Natl. Petrol. News, 36, R623—R635 (1944).
459. Gardner D. M. and Grigger J. C., J. Chem. Eng. Data, 8, 73—74 (1963).
460. Gattow G. and Krebs B., Z. Anorg. Allg. Chem., 322, 113—128 (1963).
461. Gaydon A. G., Dissociation Energies and Spectra of Diatomic Molecules, 2nd Ed., (revised), Chapman and Hall, London, 1953.
462. Geiseler G. and Rätzsch M., Z. Phys. Chem. (Frankfurt), 26, 131—137 (1960).
463. Geiseler G. and Rätzsch M., Ber. Bunsenges. Phys. Chem., 69, 485—488 (1965).
464. Geiseler G. and Thierfelder W., Z. Phys. Chem., (Frankfurt), 29, 248—257 (1961).
465. Gelles E. and Pitzer K. S., J. Am. Chem. Soc., 75, 5259—5267 (1953).
466. Gellner O. H. and Skinner H. A., J. Chem. Soc., 1145—1148 (1949).
467. Герасимов Я. И., Крестовников А. Н., Шахов А. В., Химическая термодинамика в цветной металлургии, т. 1, Металлургиздат, М., 1960.
468. Герасимов Я. И., Крестовников А. Н., Шахов А. В., Химическая термодинамика в цветной металлургии, т. 2, Металлургиздат, М., 1961.
469. Герасимов Я. И., Крестовников А. Н., Шахов А. В., Химическая термодинамика в цветной металлургии, т. 3, Металлургиздат, М., 1962.
470. Герасимов Я. И., Крестовников А. Н., Шахов А. В., Химическая термодинамика в цветной металлургии, т. 4, Металлургиздат, М., 1966.
471. Ghosh J. C. and Guha S. R. D., Petroleum (London), 14, 261—264 (1951).
472. Ghosh J. C., Guha S. R. D. and Roy A. N., Current Sci. (India), 14, 269 (1945).
473. Ghosh S. N., Trambarulo R. and Gordy W., J. Chem. Phys., 20, 605—607 (1952).
474. Giauque W. F. and Egan C. J., J. Chem. Phys., 5, 45—54 (1937).
475. Giauque W. F. and Gordon J., J. Am. Chem. Soc., 71, 2176—2181 (1949).
476. Giauque W. F. and Jones W. M., J. Am. Chem. Soc., 70, 120—124 (1948).
477. Giauque W. F. and Ott J. B., J. Am. Chem. Soc., 82, 2689—2695 (1960).
478. Giauque W. F. and Ruehrwein R. A., J. Am. Chem. Soc., 61, 2626—2633 (1939).
479. Gibbs J. W., Trans. Conn. Acad. Arts Sci., 2, 309—342, 382—404 (1873); 3, 108—248 (1876); 4, 343—524 (1878).
480. Giguère P. A., Can. J. Chem., 32, 1161 (1954).
481. Giguère P. A. and Liu I. D., J. Am. Chem. Soc., 77, 6477—6479 (1955).
482. Giguère P. A., Liu I. D., Dugdale J. S. and Morrison J. A., Can. J. Chem., 32, 117—128 (1954).
483. Giguère P. A., Morissette B. G., Olmos A. W. and Knop O., Can. J. Chem., 33, 804—820 (1955).
484. Gilbert R. L., Piotrowski E. A., Dowling J. M. and Cleveland F. F., J. Chem. Phys., 31, 1633—1636 (1959).
485. Gilliam O. R., Edwards H. D. and Gordy W., Phys. Rev., 75, 1014—1016 (1949).
486. Ginnings D. C. and Corruccini R. J., Ind. Eng. Chem., 40, 1990—1991 (1948).
487. Ginnings D. C. and Furukawa G. T., J. Am. Chem. Soc., 75, 522—527 (1953).
488. Girelli A. and Burlamacchi L., Riv. Combust., 15, 121—130 (1961).
489. Given P. H., J. Chem. Soc., 589 (1943).
490. Gladstone S. and Chang H.-Y., J. Chem. Eng. Data, 11, 238—239 (1966).
491. Glasgow A. R., Jr., Willingham C. B., and Rossini F. D., Ind. Eng. Chem., 41, 2292—2297 (1949).
492. Glasstone S., Thermodynamics for Chemists, Van Nostrand, New York, 1947.

3. Glemser O. and Häusser V., Z. Naturforsch., 3b, 159—163 (1948).
4. Glockler G., J. Chem. Phys., 21, 1242—1248, 1249—1254 (1953).
5. Glockler G., J. Phys. Chem., 61, 31—38 (1957).
6. Glockler G., J. Phys. Chem., 62, 1049—1054 (1958).
7. Glockler G. and Edgell W. F., J. Chem. Phys., 9, 527—529 (1941).
8. Glockler G. and Edgell W. F., Ind. Eng. Chem., 34, 532—534 (1942).
9. Гурвич Л. В., Хачкярузов Г. А. и др., Термодинамические свойства индивидуальных веществ, т. I, Изд. АН СССР, 1962.
10. Гурвич Л. В., Хачкярузов Г. А. и др., Термодинамические свойства индивидуальных веществ, т. II, Изд. АН СССР, 1962.
11. Годнев И. Н., Свердлин А. С., ЖФХ, 24, 670—682 (1950).
12. Годнев И. Н., Свердлин А. С., Савагина М. С., ЖФХ, 24, 807—812 (1950).
13. Golden D. M., Egger K. W. and Benson S. W., J. Am. Chem. Soc., 86, 5416—5457 (1964).
14. Golden D. M., O'Neal H. E. and Benson S. W., Additivity Rules for the Estimation of Thermochemical Properties, I. Hydrocarbons, to be published.
15. Golden D. M., Walsh R. and Benson S. W., J. Am. Chem. Soc., 87, 4053—4057 (1965).
16. Golodets G. I. and Roiter V. A., Intern. Chem. Eng., 4, 632—642 (1964).
17. Good W. D. and DePrater B. L., J. Phys. Chem., 70, 3606—3609 (1966).
18. Good W. D., Douslin D. R., Scott D. W., George A., Lacina J. L., Dawson J. P. and Waddington G., J. Phys. Chem., 63, 1133—1138 (1959).
19. Good W. D., Lacina J. L. and McCullough J. P., J. Am. Chem. Soc., 82, 5589—5591 (1960).
20. Good W. D., Lacina J. L. and McCullough J. P., J. Phys. Chem., 65, 860—862 (1961).
21. Good W. D., Lacina J. L. and McCullough J. P., J. Phys. Chem., 65, 2229—2231 (1961).
22. Good W. D., Lacina J. L., Scott D. W. and McCullough J. P., J. Phys. Chem., 66, 1529—1532 (1962).
23. Good W. D. and Scott D. W., «Combustion in a Bomb of Organic Fluorine Compounds», in H. A. Skinner (Ed.), Experimental Thermochemistry, Vol. II, Interscience Publishers, New York, 1962, Chap. 2.
24. Good W. D., Scott D. W. and Waddington G., J. Phys. Chem., 60, 1080—1089 (1956).
25. Good W. D., Todd S. S., Messerly J. F., Lacina J. L., Dawson J. P., Scott D. W. and McCullough J. P., J. Phys. Chem., 67, 1306—1311 (1963).
26. Goodman I. A. and Wise P. H., J. Am. Chem. Soc., 72, 3076—3078 (1950).
27. Goodman I. A. and Wise P. H., J. Am. Chem. Soc., 73, 850—851 (1951).
28. Gordon J. G. and Giauque W. F., J. Am. Chem. Soc., 70, 1506—1510 (1948).
29. Gordon J. S., J. Chem. Eng. Data, 6, 390—394 (1961).
30. Gordon J. S., J. Chem. Eng. Data, 7, 82 (1962).
31. Goy C. A. and Pritchard H. O., J. Phys. Chem., 69, 3040—3052 (1965).
32. Graham W. S., Nichol R. J. and Ubbelohde A. R., J. Chem. Soc., 115—121 (1955).
33. Gray A. P. and Lord R. C., J. Chem. Phys., 26, 690—705 (1957).
34. Gray P. and Pratt M. W. T., J. Chem. Soc., 2163—2168 (1957).
35. Gray P. and Pratt M. W. T., J. Chem. Soc., 3403—3412 (1958).
36. Gray P., Pratt M. W. T., and Larkin M. J., J. Chem. Soc., 210—212 (1956).
37. Gray P. and Reeves L. W., J. Chem. Phys., 32, 1878—1880 (1960).
38. Gray P. and Smith P. L., J. Chem. Soc., 2380—2385 (1953).
39. Gray P. and Smith P. L., J. Chem. Soc., 769—773 (1954).
40. Green J. H. S., Chem. Ind. (London), 1215—1216 (1960).
41. Green J. H. S., Chem. Ind. (London), 369 (1961).
42. Green J. H. S., J. Appl. Chem. (London), 11, 397—404 (1961).
43. Green J. H. S., J. Chem. Soc., 2236—2241 (1961).
44. Green J. H. S., J. Chem. Soc., 2241—2242 (1961).

535. Green J. H. S., Spectrochim. Acta, **17**, 607—613 (1961).
 536. Green J. H. S., Trans. Faraday Soc., **57**, 2132—2137 (1961).
 537. Green J. H. S., Chem. Ind. (London), 1575—1576 (1962).
 538. Green J. H. S., Trans. Faraday Soc., **59**, 1559—1563 (1963).
 539. Green J. H. S. and Holden D. J., J. Chem. Soc., 1513—1514 (1962).
 540. Green J. H. S. and Holden D. J., J. Chem. Soc., 1794—1801 (1962).
 541. Green J. H. S., Kynaston W. and Paisley H. M., J. Chem. Soc., 473—478 (1963).
 542. Greenberg E. and Hubbard W. N., «The Enthalpy of Formation of CF₄ by Fluorination of Graphite; Use of a Two-Compartment Bomb and Quartz Thermometer», Presented at the 22nd Calorimetry Conference, Thousand Oaks, Calif., 1967.
 543. Greenshields J. B. and Rossini F. D., J. Phys. Chem., **62**, 271—280 (1958).
 544. Gross M. E., Oliver G. D. and Huffman H. M., J. Am. Chem. Soc., **75**, 2801—2804 (1953).
 545. Gucker F. T., Jr. and Schminke K. H., J. Am. Chem. Soc., **54** 1358—1373 (1932).
 546. Gullikson C. W. and Nielsen J. R., J. Mol. Spectrosc., **1**, 158—178 (1957).
 547. Gundry H. A., Head A. J. and Lewis G. B., Trans. Faraday Soc., **58**, 1309—1312 (1962).
 548. Günthard H. and Heilbronner E., Helv. Chim. Acta, **31**, 2128—2132 (1948).
 549. Günthard H. H. and Kováts E., Helv. Chim. Acta, **35**, 1190—1191 (1952).
 550. Guthrie G. B., Jr., and Huffman H. M., J. Am. Chem. Soc., **65**, 1139—1143 (1943).
 551. Guthrie G. B., Jr., Scott D. W., Hubbard W. N., Katz C., McCullough J. P., Gross M. E., Williamson K. D. and Waddington G., J. Am. Chem. Soc., **74**, 4662—4669 (1952).
 552. Guthrie G. B., Jr., Scott D. W. and Waddington G., J. Am. Chem. Soc., **74**, 2795—2800 (1952).
 553. Guttman L. and Pitzer K. S., J. Am. Chem. Soc., **67**, 324—327 (1945).
 554. Guttman L., Westrum E. F., Jr., and Pitzer K. S., J. Am. Chem. Soc., **65**, 1246—1247 (1943).
 555. Guyer A., Schütze H. and Weidenmann M., Helv. Chim. Acta **20**, 936—949 (1937).
 556. Gwinn W. D. and Pitzer K. S., J. Chem. Phys., **16**, 303—309 (1948).
 557. Haar L., Bradley J. C. and Friedman A. S., J. Res. Natl. Bur. Std., **55**, 285—290 (1955).
 558. Hadni A., Compt. Rend., **239**, 349—351 (1954).
 559. Haensel V. and Berger C. V., Petrol. Process., **6**, 264—267 (1951).
 560. Haggemacher J. E., J. Am. Chem. Soc., **68**, 1633—1634 (1946).
 561. Hales J. L., Cox J. D. and Lees E. B., Trans. Faraday Soc., **59**, 1544—1554 (1963).
 562. Halford J. O., J. Chem. Phys., **10**, 582—584 (1942).
 563. Halford J. O., J. Chem. Phys., **15**, 364—367 (1947).
 564. Halford J. O. and Brundage D., J. Am. Chem. Soc., **64**, 36—40 (1942).
 565. Halford J. O. and Miller G. A., J. Phys. Chem., **61**, 1536—1539 (1957).
 566. Halpern A. and Glasser A. C., J. Am. Pharm. Assoc., **38**, 287—290 (1949).
 567. Halverson F. and Francel R. J., J. Chem. Phys., **17**, 694—703 (1949).
 568. Halverson F., Stamm R. F. and Whalen J. J., J. Chem. Phys., **16**, 808—816 (1948).
 569. Hancock C. K., Watson G. M. and Gilby R. F., J. Phys. Chem., **58**, 127—129 (1954).
 570. Hardy D. V. N., J. Chem. Soc., 1335—1340 (1934).
 571. Hartspe J. V., Ann. Chim. (Paris), **6**, 249—347 (1936).
 572. Harrison D. and Moelwyn-Hughes E. A., Proc. Roy. Soc. (London), Ser. A, **239**, 230—246 (1957).
 573. Harrison R. H. and Kobe K. A., Chem. Eng. Progr., **49**, 349—353 (1953).

74. Harrison R. H. and Kobe K. A., J. Chem. Phys., **26**, 1411—1415 (1957).
 75. Hartley K., Pritchard H. O. and Skinner H. A., Trans. Faraday Soc., **46**, 1019—1025 (1950).
 76. Hartley K., Pritchard H. O. and Skinner H. A., Trans. Faraday Soc., **47**, 254—263 (1951).
 77. Hastings S. H. and Nicholson D. E., J. Phys. Chem., **61**, 730—735 (1957).
 78. Hastings S. H. and Nicholson D. E., J. Chem. Eng. Data, **6**, 1—4 (1961).
 79. Hatton W. E., Hildenbrand D. L., Sinke G. C. and Stull D. R., J. Chem. Eng. Data, **7**, 229—231 (1962).
 80. Hawkins J. E. and Eriksen W. T., J. Am. Chem. Soc., **76**, 2669—2671 (1954).
 81. Heilbronner E. and Wieland K., Helv. Chim. Acta, **30**, 947—956 (1947).
 82. Heim G., Bull. Soc. Chim. Belges, **42**, 467—482 (1933).
 83. Heinemann H., Schall J. W. and Stevenson D. H., Petrol. Refiner, **30**, (11), 107—110 (1951).
 84. Helm R. V., Lanum W. J., Cook G. L. and Ball J. S., J. Phys. Chem., **62**, 858—862 (1958).
 85. Herington E. F. G. and Martin J. F., Trans. Faraday Soc., **49**, 154—162 (1953).
 86. Herschbach D. R., J. Chem. Phys., **25**, 358—359 (1956).
 87. Herschbach D. R., J. Chem. Phys., **31**, 91—108 (1959).
 88. Herschbach D. R. and Swalen J. D., J. Chem. Phys., **29**, 761—776 (1958).
 89. Герцберг Г., Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул, Госиноиздат, М., 1949.
 90. Herzberg G., Molecular Spectra and Molecular Structure. I. Diatomic Molecules, 2nd Ed., Van Nostrand, New York, 1950. (Есть русский перевод первого издания: Герцберг Г., Спектры и строение двухатомных молекул, Госиноиздат, М., 1949.)
 91. Herzberg G. and Herzberg L., J. Chem. Phys., **18**, 1551—1561 (1950).
 92. Hess G. H., Ann. Phys. [2], **52**, 97—114 (1841).
 93. Hestermans P. and White D., J. Phys. Chem., **65**, 362—365 (1961).
 94. Hicks J. F. G., Hooley J. G. and Stephenson C. C., J. Am. Chem. Soc., **66**, 1064—1067 (1944).
 95. Hildenbrand D. L., unpublished results, Dow Chemical Company, 1958.
 96. Hildenbrand D. L., Kramer W. R., McDonald R. A. and Stull D. R., J. Am. Chem. Soc., **80**, 4129—4132 (1958).
 97. Hildenbrand D. L., Kramer W. R. and Stull D. R., J. Phys. Chem., **62**, 958—959 (1958).
 98. Hildenbrand D. L., McDonald R. A., J. Phys. Chem., **63**, 1521—1522 (1959).
 99. Hildenbrand D. L., McDonald R. A., Kramer W. R. and Stull D. R., J. Chem. Phys., **30**, 930—934 (1959).
 100. Hildenbrand D. L., Sinke G. C., McDonald R. A., Kramer W. R. and Stull D. R., J. Chem. Phys., **31**, 650—654 (1959).
 1. Hill E. A., J. Am. Chem. Soc., **22**, 478—494 (1900).
 2. Hill T. L., Statistical Mechanics, Principles and Selected Applications, McGraw-Hill, New York, 1956.
 3. Hill T. L., An Introduction to Statistical Thermodynamics, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1960.
 4. Hilsenrath J., Beckett C. W., Benedict W. S., Fano L., Hoge H. J., Masi J. F., Nuttall R. L., Touloukian Y. S. and Wooley H. W., Tables of Thermal Properties of Gases (National Bureau of Standards Circular No. 564), U.S. Government Printing Office, Washington, D.C., 1953.
 5. Hilsenrath J. and Ziegler G. G., Tables of Einstein Functions: Vibrational Contributions to the Thermodynamic Functions (National Bureau of Standards Monograph No. 49), U.S. Government Printing Office, Washington, D.C., 1962.
 6. Hipsher H. F. and Wise P. H., J. Am. Chem. Soc., **76**, 1747—1748 (1954).
 7. Hirota E., J. Chem. Phys., **37**, 283—291 (1962).

608. *Hirschfelder J. O.*, J. Chem. Phys., 8, 431 (1940).
 609. *Hock H. and Knauel G.*, Ber., 84, 1—4 (1951).
 610. *Hoffman C. W. W.*, Univ. Microfilms Publ. No. 24161, 89 pp.; Dissertation Abstr., 18, 420 (1958).
 611. *Hoffman C. W. W. and Livingston R. L.*, J. Chem. Phys., 21, 565 (1953).
 612. *Hoffman H. T., Jr., Evans G. E. and Glockler G.*, J. Am. Chem. Soc., 73, 3028—3030 (1951).
 613. *Holcomb D. E. and Dorsey C. L., Jr.*, Ind. Eng. Chem., 41, 2788—2792 (1949); 42, 570 (1950).
 614. *Hou Y.-C.*, Univ. Microfilms Publ. No. 12589, 122 pp.; Dissertation Abstr., 15, 1579—1580 (1955).
 615. *Hou Y.-C. and Martin J. J.*, Am. Inst. Chem. Eng. J., 5, 125—129 (1959).
 616. *Hough E. W., Mason D. M. and Sage B. H.*, J. Am. Chem. Soc., 72, 5775—5777 (1950).
 617. *Hough E. W., Mason D. M. and Sage B. H.*, J. Am. Chem. Soc., 73, 1363—1364 (1951).
 618. *Howard P. B. and Skinner H. A.*, J. Chem. Soc. [A], 1536—1540 (1966).
 619. *Howlett K. E.*, J. Chem. Soc., 1409—1412 (1951).
 620. *Howlett K. E.*, J. Chem. Soc., 1784—1789 (1955).
 621. *Howlett K. E.*, J. Chem. Soc., 2834—2836 (1957).
 622. *Hrostowski J. J. and Pimentel G. C.*, J. Am. Chem. Soc., 75, 539—542 (1953).
 623. *Hrynakowski K. and Smoczkiwiczowa A.*, Roczniki Chem., 17, 165—168 (1937).
 624. *Hsu C. C. and McKetta J. J.*, Am. Inst. Chem. Eng. J., 9, 794—796 (1963).
 625. *Hu J.-H., White D. and Johnston H. L.*, J. Am. Chem. Soc., 75, 1232—1236 (1953).
 626. *Hu J.-H., White D. and Johnston H. L.*, J. Am. Chem. Soc., 75, 5642—5645 (1953).
 627. *Hubbard W. N., Douslin D. R., McCullough J. P., Scott D. W., Tedd S. S., Messerly J. F., Hossenlopp I. A., George A. and Waddington G.*, J. Am. Chem. Soc., 80, 3547—3554 (1958).
 628. *Hubbard W. N., Finke H. L., Scott D. W., McCullough J. P., Katz C., Gross M. E., Messerly J. F., Pennington R. E., Waddington G.*, J. Am. Chem. Soc., 74, 6025—6030 (1952).
 629. *Hubbard W. N., Frow F. R. and Waddington G.*, J. Phys. Chem., 62, 821—823 (1958).
 630. *Hubbard W. N., Frow F. R. and Waddington G.*, J. Phys. Chem., 65, 1326—1328 (1961).
 631. *Hubbard W. N., Good W. D. and Waddington G.*, J. Phys. Chem., 62, 614—617 (1958).
 632. *Hubbard W. N., Katz C., Guthrie G. B., Jr. and Waddington G.*, J. Am. Chem. Soc., 74, 4456—4458 (1952).
 633. *Hubbard W. N., Katz C. and Waddington G.*, J. Phys. Chem., 58, 142—152 (1954).
 634. *Hubbard W. N., Knowlton J. W. and Huffman H. M.*, J. Am. Chem. Soc., 70, 3259—3261 (1948).
 635. *Hubbard W. N., Knowlton J. W. and Huffman H. M.*, J. Phys. Chem., 58, 396—402 (1954).
 636. *Hubbard W. N., Scott D. W., Frow F. R. and Waddington G.*, J. Am. Chem. Soc., 77, 5855—5857 (1955).
 637. *Hubbard W. N., Scott D. W. and Waddington G.*, Standard States and Corrections for Combustions in a Bomb at Constant Volume, in F. D. Rossini (Ed.), Experimental Thermochemistry, Vol. I, Interscience Publishers, New York, 1956, Chap. 5.
 638. *Hubbard W. N. and Waddington G.*, Rec. Trav. Chem., 73, 910—923 (1954).
 639. *Hückel W., Gercke A. and Gross A.*, Ber., 66B, 563—567 (1933).

- Huff V. N., Gordon S. and Morrell V. E.*, General Method and Thermodynamic Tables for Computations of Equilibrium Composition and Temperature of Chemical Reactions (National Advisory Committee for Aeronautics Report No. 1037), U.S. Government Printing Office, Washington, D.C., 1951.
Huffman H. M., J. Am. Chem. Soc., 62, 1009—1011 (1940).
Huffman H. M., J. Am. Chem. Soc., 63, 688—689 (1941).
Huffman H. M., J. Phys. Chem., 46, 885—891 (1942).
Huffman H. M. and Borsook H., J. Am. Chem. Soc., 54, 4297—4301 (1932).
Huffman H. M., Eaton M. and Oliver G. D., J. Am. Chem. Soc., 70, 2911—2914 (1948).
Huffman H. M. and Ellis E. L., J. Am. Chem. Soc., 57, 41—46 (1935).
Huffman H. M. and Ellis E. L., J. Am. Chem. Soc., 57, 46—48 (1935).
Huffman H. M. and Ellis E. L., J. Am. Chem. Soc., 59, 2150—2152 (1937).
Huffman H. M., Ellis E. L. and Borsook H., J. Am. Chem. Soc., 62, 297—299 (1940).
Huffman H. M., Ellis E. L. and Fox S. W., J. Am. Chem. Soc., 58, 1728—1733 (1936).
Huffman H. M. and Fox S. W., J. Am. Chem. Soc., 60, 1400—1403 (1938).
Huffman H. M. and Fox S. W., J. Am. Chem. Soc., 62, 3464—3465 (1940).
Huffman H. M., Fox S. W. and Ellis E. L., J. Am. Chem. Soc., 59, 2144—2150 (1937).
Huffman H. M., Gross M. E., Scott D. W. and McCullough J. P., J. Phys. Chem., 65, 495—503 (1961).
Huffman H. M., Parks G. S. and Barmore M., J. Am. Chem. Soc., 53, 3876—3888 (1931).
Huffman H. M., Parks G. S. and Daniels A. C., J. Am. Chem. Soc., 52, 1547—1558 (1930).
Huffman H. M., Todd S. S. and Oliver G. D., J. Am. Chem. Soc., 71, 584—592 (1949).
Hughes A. M., Corruccini R. J. and Gilbert E. C., J. Am. Chem. Soc., 61, 2639—2642 (1939).
Hugill J. A. C., Coop I. E. and Sutton L. E., Trans. Faraday Soc., 34, 1518—1534 (1938).
Hultgren R., Orr R. L., Anderson P. D. and Kelley K. K., Selected Values of Thermodynamic Properties of Metals and Alloys, Wiley, New York, 1963.
Hultgren R., Orr R. L. and Kelley K. K., Selected Values of Thermodynamic Properties of Metals and Alloys, University of California (Berkeley) Institute of Engineering Research, Minerals Research Laboratory, looseleaf since 1955.
Humphrey G. L. and Spitzer R., J. Chem. Phys., 18, 902 (1950).
Humphries A. R. and Nicholson G. R., J. Chem. Soc., 2429—2431 (1957).
Hutchens J. O., Cole A. G., Robie R. A. and Stout J. W., J. Biol. Chem., 238, 2407—2412 (1963).
Hutchens J. O., Cole A. G. and Stout J. W., J. Am. Chem. Soc., 82, 4813—4815 (1960).
Hutchens J. O., Cole A. G. and Stout J. W., J. Phys. Chem., 67, 1128—1130 (1963).
Hutchens J. O., Cole A. G. and Stout J. W., J. Biol. Chem., 239, 591—595 (1964).
Hutchens J. O., Cole A. G. and Stout J. W., J. Biol. Chem., 239, 4194—4195 (1964).
Hwang Y.-T., and Martin J. J., Am. Inst. Chem. Eng. J., 10, 89—91 (1964).
Igarashi M., Bull. Chem. Soc. Japan, 34, 369—373 (1961).
Inskip R. G., Kelliher J. M., McMahon P. E. and Somers B. G., J. Chem. Phys., 28, 1033—1036 (1958).
Itoh T., J. Phys. Soc. Japan, 11, 264—271 (1956).
Ivash E. V. and Dennison D. M., J. Chem. Phys., 21, 1804—1816 (1953).

674. *Ivash F. V., Li J. C. M. and Pitzer K. S.*, J. Chem. Phys., 23, 1814—1818 (1955).
675. *Iwanciw B. L.*, Thesis, University of Wisconsin, Madison, 1950.
676. *Jack G. W. and Stegeman G.*, J. Am. Chem. Soc., 63, 2421—2423 (1941).
677. *Jacobs C. J. and Parks G. S.*, J. Am. Chem. Soc., 56, 1513—1517 (1934).
678. *Jaffe I.*, Thesis, University of Maryland, College Park, 1958.
679. *Jaffe L., Prosen E. J. and Szwarc M.*, J. Chem. Phys., 27, 416—420 (1957).
680. *Janz G. J.*, Can. J. Res., 25B, 331—332 (1947).
681. *Janz G. J.*, Thermodynamic Properties of Organic Compounds: Estimation Methods, Principles and Practice, revised ed. [Vol. 6 of E. Hutchinson and P. Van Rysselberghe (Eds.), Physical Chemistry], Academic Press, New York, 1967.
682. *Janz G. J. and Wait S. C., Jr.*, J. Chem. Phys., 26, 1766—1768 (1957).
683. *Jathar S. K. K.*, J. Indian Inst. Sci., 22A, 39—58 (1939).
684. *Jen M. and Lide D. R., Jr.*, J. Chem. Phys., 36, 2525—2526 (1962).
685. *Jenkins A. D. and Style D. W. G.*, J. Chem. Soc., 2337—2340 (1953).
686. *Jessup R. S.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 18, 115—128 (1937).
687. *Jessup R. S.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 29, 247—270 (1942).
688. *Jessup R. S.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 36, 421—423 (1946).
689. *Jessup R. S.* (National Bureau of Standards Monograph No. 7), U. S. Government Printing Office, Washington, D.C., 1960.
690. *Jessup R. S. and Green C. B.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 13, 469—495 (1934).
691. *Jessup R. S., McCoskey R. E. and Nelson R. A.*, J. Am. Chem. Soc., 77, 244—245 (1955).
692. *Johnson W. H., Prosen E. J. and Rossini F. D.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 35, 141—146 (1945).
693. *Johnson W. H., Prosen E. J. and Rossini F. D.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 38, 419—422 (1947).
694. *Johnson W. H., Prosen E. J. and Rossini F. D.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 42, 251—255 (1949).
695. *Johnston H. L., Savedoff L. and Belzer J.*, «Contribution to Thermodynamic Functions by a Planck-Einstein Oscillator in One Degree of Freedom», Contract ONR, Ohio State University Research Foundation, ONR Department of the Navy, Washington, D.C., NAVEXOS P-646, July 1949.
696. *Johnston H. S. and Bertin H. J., Jr.*, J. Am. Chem. Soc., 81, 6402—6404 (1959).
697. *Jones A. H.*, J. Chem. Eng. Data, 5, 196—200 (1960).
698. *Jones A. V.*, Proc. Roy. Soc. (London), Ser. A., 211, 285—295 (1952).
699. *Jones E. and Fowlie G. G.*, J. Appl. Chem. (London), 3, 206—213 (1953).
700. *Jones J. L. and Ogg R. A., Jr.*, J. Am. Chem. Soc., 59, 1943—1945 (1937).
701. *Jones S. O. and Reid E. E.*, J. Am. Chem. Soc., 60, 2452—2455 (1938).
702. *Jones W. M. and Giauque W. F.*, J. Am. Chem. Soc., 69, 983—987 (1947).
703. *Jordan T. E.*, Vapor Pressure of Organic Compounds, Interscience Publishers, New York, 1954.
704. *Joshi R. M.*, Makromol. Chem. 55, 35—49 (1962).
705. *Joubovsky N. I.*, Bull. Soc. Chim. Belges, 43, 397—445 (1934).
706. *Jung G. and Dahmlos J.*, Z. Phys. Chem. (Leipzig), A190, 230—240 (1942).
707. *Kaarsemaker S. and Coops J.*, Rec. Trav. Chim., 71, 261—276 (1952).
708. *Kabel R. L. and Johanson L. N.*, J. Chem. Eng. Data, 6, 496—498 (1961).
709. *Каблуков И. А., Переельман Ф. М.*, ДАН СССР, [A], 519—522 (1930).
710. *Кучинская О. Н., Тогоева С. К., Мещеряков А. П., Скуратов С. М.*, ДАН СССР, 132, 119—122 (1960); Изв. АН СССР, хим. секция, 132, 451—454 (1960).
711. *Kanazawa Y. and Nukada K.*, Bull. Chem. Soc. Japan, 35, 612—618 (1962).
712. *Kandiner H. J. and Brinkley S. R., Jr.*, Ind. Eng. Chem., 42, 850—855 (1950).
713. *Kangro W. and Grau R.*, Z. Phys. Chem., Bodenst.-Festband, 85—92 (1931).

14. *Kaplan L. H.*, Univ. Microfilms L.C. Mic. 58-1788, 133 pp; Dissertation Abstr. 19, 3130 (1959).
15. *Канцетинский А. Ф., Каньковский П. Т.*, ЖФХ, 32, 2810—2816 (1958).
16. *Каршиарли К. А., Стрелков П. Г.*, ДАН СССР, 131, 568—569 (1960); Изв. АН СССР, хим. секция, 131, 267—268 (1960).
17. *Karle I. L. and Karle J.*, J. Chem. Phys., 18, 963—971 (1950).
18. *Karle I. L. and Karle J.*, J. Chem. Phys., 20, 63—65 (1952).
19. *Karlsson K. J.*, Thesis, University of Lund, Lund, Sweden, 1941.
20. *Karnes H. A., Kybett B. D., Wilson M. H., Margrave J. L. and Newman M. S.*, J. Am. Chem. Soc., 87, 5554—5558 (1965).
21. *Karo W., McLaughlin R. L. and Hipsher H. F.*, J. Am. Chem. Soc., 75, 3233—3235 (1953).
22. *Kasai P. H. and Myers R. J.*, J. Chem. Phys., 30, 1096—1097 (1959).
23. *Kasuya T.*, J. Phys. Soc. Japan, 15, 1273—1277 (1960).
24. *Kasuya T. and Oka T.*, J. Phys. Soc. Japan, 15, 296—303 (1960).
25. *Katon J. E. and Lippincott E. R.*, Spectrochim. Acta, 15, 627—650 (1959).
26. *Katz T. J. and Margrave J. L.*, J. Chem. Phys., 23, 983 (1955).
27. *Kay W. B. and Donham W. E.*, Chem. Eng. Sci., 4, 1—16 (1955).
28. *Keffler L.*, Bull. Soc. Chim. Belges, 44, 425—434 (1935).
29. *Keffler L. J. P.*, J. Chem. Soc. Ind. (London), 55, 331—335T (1936).
30. *Keffler L. J. P.*, J. Phys. Chem., 41, 715—721 (1937).
31. *Keith W. A. and Mackle H.*, Trans. Faraday Soc., 54, 353—366 (1958).
32. *Kelley K. K.*, J. Am. Chem. Soc., 51, 180—187 (1929).
33. *Kelley K. K.*, J. Am. Chem. Soc., 51, 779—786 (1929).
34. *Kelley K. K.*, J. Am. Chem. Soc., 51, 1145—1151 (1929).
35. *Kelley K. K.*, J. Am. Chem. Soc., 51, 1400—1406 (1929).
36. *Kelley K. K.*, U.S. Bur. Mines Bull., 584, (1960).
37. *Kelley K. K.*, U.S. Bur. Mines Bull., 601, 154 pp. (1962).
38. *Kelley K. K. and King E. G.*, U.S. Bur. Mines Bull., 592 (1961).
39. *Kemp J. D. and Giauque W. F.*, J. Am. Chem. Soc., 59, 79—84 (1937).
40. *Kennedy R. M., Sagenkahn M. and Aston J. G.*, J. Am. Chem. Soc., 63, 2267—2272 (1941).
41. *Kennedy W. D., Shomate C. H. and Parks G. S.*, J. Am. Chem. Soc., 60, 1507—1509 (1938).
42. *Ketelaar J. A. A. and Kruyer S.*, Rec. Trav. Chim., 62, 550—552 (1943).
43. *Ketelaar J. A. A., Van Velden P. F. and Zalm P.*, Rec. Trav. Chim., 66, 721—732 (1947).
44. *Kharasch M. S.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 2, 359—430 (1929).
45. *Kharasch M. S. and Sher B.*, J. Phys. Chem., 29, 625—658 (1925).
46. *Kharasch M. S. and Zavist A. F.*, J. Am. Chem. Soc., 73, 964—967 (1951).
47. *Kibler G. M. and Hunt H.*, J. Phys. Colloid Chem., 53, 955—956 (1949).
48. *Kielland J.*, Ber., 71B, 220—226 (1938).
49. *Kilb R. W.*, J. Chem. Phys., 23, 1736—1737 (1955).
50. *Kilpatrick J. E. and Pitzer K. S.*, J. Am. Chem. Soc., 68, 1066—1072 (1946).
51. *Kilpatrick J. E. and Pitzer K. S.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 37, 163—171 (1946).
52. *Kilpatrick J. E. and Pitzer K. S.*, J. Chem. Phys., 17, 1064—1075 (1949).
53. *Kilpatrick J. E., Pitzer K. S. and Spitzer R.*, J. Am. Chem. Soc., 69, 2483—2488 (1947).
54. *Kirkbride F. W.*, J. Appl. Chem. (London), 6, 11—21 (1956).
55. *Kirkbride F. W. and Davidson F. C.*, Nature, 174, 79—80 (1954).
56. *Kirtman B.*, J. Chem. Phys., 41, 775—788 (1964).
57. *Kistiakowsky G. B. and Rice W. W.*, J. Chem. Phys., 8, 610—618 (1940).
58. *Kistiakowsky G. B. and Rice W. W.*, J. Chem. Phys., 8, 618—622 (1940).
59. *Kistiakowsky G. B., Romeyn H., Jr., Ruhoff J. R., Smith H. A. and Vaughan W. E.*, J. Am. Chem. Soc., 57, 65—75 (1935).
60. *Kistiakowsky G. B., Ruhoff J. R., Smith H. A. and Vaughan W. E.*, J. Am. Chem. Soc., 57, 876—882 (1935).

761. *Kistiakowsky G. B., Ruhoff J. R., Smith H. A. and Vaughan W. E.*, J. Am. Chem. Soc., 58, 137—145 (1936).
762. *Kistiakowsky G. B., Ruhoff J. R., Smith H. A. and Vaughan W. E.*, J. Am. Chem. Soc., 58, 146—153 (1936).
763. *Kistiakowsky G. B. and Stauffer C. H.*, J. Am. Chem. Soc., 59, 165—176 (1937).
764. *Kivelson D., Wilson E. B., Jr., and Lide D. R., Jr.* J. Chem. Phys., 32, 205—209 (1960).
765. *Klages F.*, Ber., 82, 358—375 (1949).
766. *Klein M. J., Cleveland F. F. and Meister A. G.*, J. Chem. Phys., 19, 1068—1069 (1951).
767. *Knapp J. A., Linnell W. S. and Child W. C., Jr.*, J. Phys. Chem., 66, 1513—1516 (1962).
768. *Knowlton J. W. and Huffman H. M.*, J. Am. Chem. Soc., 66, 1492—1494 (1944).
769. *Knowlton J. W. and Prosen E. J.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 46, 489—495 (1951).
770. *Knowlton J. W. and Rossini F. D.*, J. Res. Natl. Bur. Std. 22, 415—424 (1939).
771. *Knowlton J. W. and Rossini F. D.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 43, 113—115 (1949).
772. *Kobe K. A. and Crawford H. R.*, Petrol. Refiner, 37 (7), 125—130 (1958).
773. *Kobe K. A., Crawford H. R. and Stephenson R. W.*, Ind. Eng. Chem., 47, 1767—1772 (1955).
774. *Kobe K. A. and Harrison R. H.*, Petrol. Refiner, 30, (11), 151—154 (1951).
775. *Kobe K. A. and Harrison R. H.*, Petrol. Refiner, 33 (11), 161—164 (1954).
776. *Kobe K. A. and Harrison R. H.*, Petrol. Refiner, 36 (10), 155—159 (1957).
777. *Kobe K. A., Harrison R. H. and Pennington R. E.*, Petrol. Refiner, 30 (8), 119—122 (1951).
778. *Kobe K. A. and Kobe D. H.*, Petrol. Refiner, 38, (12), 117—120 (1959).
779. *Kobe K. A. and Long E. G.*, Petrol. Refiner, 29 (5), 89—92 (1950).
780. *Kobe K. A. and Lynn R. E., Jr.*, Chem. Rev., 52, 117—236 (1953).
781. *Kobe K. A. and Pennington R. E.*, Petrol. Refiner, 29 (9), 135—138 (1950).
782. *Kobe K. A. and Pennington R. E.*, Petrol. Refiner, 29 (12), 93—96 (1950).
783. *Kobe K. A., Ravicz A. E. and Vohra S. P.*, Chem. Eng. Data Ser., 1, 50—56 (1956).
784. *Kobe K. A. and co-workers*, Petrol. Refiner, 28 (1), 83—87; (2), 113—116; (3), 125—128; (5), 161—163; (7), 145—148; (10), 133—136; (11), 127—132 (1949); 29 (1), 126—130; (2), 124—128; (3), 157—160; (5), 89—92; (7), 129—133; (9), 135—138; (12), 93—96 (1950); 30 (4), 123—124; (6), 143—144; (8), 119—122; (11), 151—154; (12), 114—116 (1951); 33 (8), 109—110; (11), 161—164 (1954); 36 (10), 155—159; (12), 147—148 (1957); 37 (7), 125—130 (1958); 38 (12), 117—120 (1959).
785. *Koehler J. K. and Giauque W. F.*, J. Am. Chem. Soc., 80, 2659—2662 (1958).
786. *Kogerman P. N.*, Sitzbar. Naturforsch.-Ges. Univ. Tartu, 41 (3—4), 62 pp. (1934).
787. *Kohlrausch K. W. F.*, Monatsh. Chem., 68, 349—358 (1936).
788. *Kojima T.*, J. Phys. Soc. Japan, 15, 284—287 (1960).
789. *Kojima T.*, J. Phys. Soc. Japan, 15, 1284—1291 (1960).
790. *Kojima T. and Nishikawa T.*, J. Phys. Soc. Japan, 12, 680—686 (1957).
791. *Kolb H. J. and Burwell R. L., Jr.*, J. Am. Chem. Soc., 67, 1084—1088 (1945).
792. *Колесов В. П., Мартынов А. М., Штегер С. М., Скуратов С. М.*, ЖФХ, 36, 2078—2081 (1962).
793. *Колесов В. П., Мартынов А. М., Скуратов С. М.*, ЖФХ, 39, 435—437 (1965).
794. *Колесов В. П., Пауков И. Е., Скуратов С. М., Серегин Е. А.*, ДАН СССР, 128, 130—132 (1959).

95. *Колесов В. П., Талакин О. Г., Скуратов С. М.*, ЖФХ, 38, 1701—1703 (1964).
96. *Колесов В. П., Зенков И. Д., Скуратов С. М.*, ЖФХ, 36, 89—92 (1962).
97. *Колесов В. П., Зенков И. Д., Скуратов С. М.*, ЖФХ, 37, 224—225 (1963).
98. *Колесов В. П., Зенков И. Д., Скуратов С. М.*, ЖФХ, 39, 2474—2476 (1965).
99. *De Kolosovskiy N. and Alimov A.*, Bull. Soc. Chim. France [5], 1, 877—880 (1934).
100. *Kopelman R.*, J. Chem. Phys., 41, 1547—1553 (1964).
101. *Костюков В. Н., Саморуков О. П., Стрелков П. Г.*, ЖФХ, 32, 1354—1361 (1958).
102. *Kováts E., Günthard H. H. and Plattner P. A.*, Helv. Chim. Acta, 38, 1912—1919 (1955).
103. *Kováts E., Günthard H. H., Plattner P. A.*, Helv. Chim. Acta, 40, 2008 (1957).
104. *Козина М. П., Лукина М. Я., Зубарева Н. Д., Сафонова П. Л., Скуратов С. М., Казанский В. А.*, ДАН СССР, 138, 843—845 (1961).
105. *Козина М. П., Мираева А. К., Соснина И. Е., Елазина Н. В., Скуратов С. М.*, ДАН СССР, 155, 1123—1125 (1964).
106. *Козина М. П., Скуратов С. М., Штегер С. М., Соснина И. Е., Турова-Поляк М. В.*, ЖФХ, 35, 2316—2321 (1961).
107. *Козлов П. А., Рабинович И. Б.*, Труды по химии и химической технологии, 189—193 (1964).
108. *Kraitchman J. and Dailey B. P.*, J. Chem. Phys., 23, 184—190 (1955).
109. *Krall R. E. and Roberts J. D.*, Am. Chem. Soc. Div. Petrol. Chem. Symp. 3 (4B), 63—68 (1958).
110. *Kraus R.*, Proc. 12th Intern. Congr. Acetylene, Oxyacetylene Welding and Allied Ind., London, 1936, Vol. I, pp. 1422—1423, 1459—1460.
111. *Kretschmer C. B. and Wiebe R.*, J. Am. Chem. Soc., 76, 2579—2583 (1954).
112. *Kubaschewski O. and Evans E. L.* Metallurgical Thermochemistry, 4th Ed. Pergamon Press, New York, 1967. (перевод предшествующего издания: Кубашевский О., Эванс Э., Термохимия в металлургии, Издатинлит, 1954.)
113. *Кулькова Н. В., Темкин М. И.*, ЖФХ, 36, 1731—1734 (1962).
114. *Курбатов В. Я.*, ЖОХ, 18, 372—387 (1948).
115. *Куриц Н. П., Захаров М. С.*, Известия высш. учебн. зав., Химия и химическая технология, 3, 141—145 (1960).
116. *Kusano K.*, Nippon Kagaku Zasshi, 78, 614—620 (1958).
117. *Kushner L. M., Crowe R. W. and Smyth C. P.*, J. Am. Chem. Soc., 72, 1091—1098 (1950).
118. *Von Kutepow N., Himmele W. and Hohenschutz H.*, Chem. Ingr. Tech., 37 (4), 383—388 (1965).
119. *Kybett B. D., Johnson G. K., Barker C. K. and Margrave J. L.*, J. Phys. Chem., 69, 3603—3606 (1965).
120. *Labbauf A., Greenshields J. B. and Rossini F. D.*, J. Chem. Eng. Data, 6, 261—263 (1961).
121. *Labbauf A. and Rossini F. D.*, J. Phys. Chem., 65, 476—480 (1961).
122. *Lacher J. R., Billings T. J., Campion D. E., Lea K. R. and Park J. D.*, J. Am. Chem. Soc., 74, 5291—5292 (1952).
123. *Lacher J. R., Casali L. and Park J. D.*, J. Phys. Chem., 60, 608—610 (1956).
124. *Lacher J. R., Emery E., Bohmfalk E. and Park J. D.*, J. Phys. Chem., 60, 492—495 (1956).
125. *Lacher J. R., Gottlieb H. B. and Park J. D.*, Trans. Faraday Soc., 58, 2348—2351 (1962).
126. *Lacher J. R., Kianpour A., Montgomery P., Knedler H. and Park J. D.*, J. Phys. Chem., 61, 1125—1126 (1957).
127. *Lacher J. R., Kianpour A., Oetting F. L. and Park J. D.*, Trans. Faraday Soc., 52, 1500—1508 (1956).
128. *Lacher J. R., Kianpour A. and Park J. D.*, J. Phys. Chem., 60, 1454—1455 (1956).

829. Lacher J. R., Kianpour A. and Park J. D., J. Phys. Chem., 61, 1124—1125 (1957).
830. Lacher J. R., Lea K. R., Walden C. H., Olson G. G. and Park J. D., J. Am. Chem. Soc., 72, 3231—3234 (1950).
831. Lacher J. R., McKinley J. J., Snow C. M., Michel L., Nelson G. and Park J. D., J. Am. Chem. Soc., 71, 1330—1334 (1949).
832. Lacher J. R., McKinley J. J., Walden C., Lea K. and Park J. D., J. Am. Chem. Soc., 71, 1334—1337 (1949).
833. Lacher J. R. and Skinner H. A., J. Chem. Soc., (A), 1968, 1034—1038 (1968).
834. Lacher J. R., Walden C. H., Lea K. R., and Park J. D., J. Am. Chem. Soc., 72, 331—333 (1950).
835. Lacina J. L., Good W. D. and McCullough J. P., J. Phys. Chem., 65, 1026—1027 (1961).
836. Lacy B. S., Dunning R. G. and Storck H. H., J. Am. Chem. Soc., 52, 926—938 (1930).
837. Lafferty W. J., Maki A. G. and Plyler E. K., J. Chem. Phys., 40, 224—229 (1964).
838. Laidler K. J., Can. J. Chem., 34, 626—648 (1956).
839. Lamberti J. M. and Wise P. H., J. Am. Chem. Soc., 75, 4787—4789 (1953).
840. Lamneck J. H., Jr., and Wise P. H., J. Am. Chem. Soc., 76, 3475—3476 (1954).
841. Lamneck J. H., Jr. and Wise P. H., J. Am. Chem. Soc., 76, 5108—5110 (1954).
842. Landau L. D. and Lifshitz E. M., Statistical Physics, Pergamon Press, London, 1958.
843. Landolt-Börnstein Tabellen, Sechste Auflage, Band II, Teil 4, «Kalorische Zustandgrößen», Springer-Verlag, Berlin, 1961.
844. Landrieu P., Baylocq F. and Johnson J. R., Bull. Soc. Chim. France, 45, 36—49 (1929).
845. Lane M. R., Linnett J. W. and Oswin H. G., Proc. Roy. Soc. (London), Ser. A., 216, 361—374 (1953).
846. Lange E., Z. Phys. Chem. (Leipzig), 110, 343—362 (1924).
847. Langer A., Hipple J. A. and Stevenson D. P., J. Chem. Phys., 22, 1836—1844 (1954).
848. Larmann J. P., Martire D. E. and Pollara L. Z., J. Chem. Eng. Data, 6, 330 (1961).
849. Laurie V. W., J. Chem. Phys., 31, 1500—1505 (1959).
850. Laurie V. W., J. Chem. Phys., 34, 1516—1519 (1961).
851. Lautsch W. F., Erzberger P. and Tröber A., Wiss. Z. Tech. Hochsch. Chem. Leuna-Merseburg, 1, 31—33 (1958—1959).
852. Lawrence R. B. and Strandberg M. W. P., Phys. Rev., 83, 363—369 (1951).
853. Лебедева Н. Д., ЖФХ, 38, 2648—2651 (1961).
854. Leermakers J. A. and Ramsperger H. C., J. Am. Chem. Soc., 54, 1837—1845 (1932).
855. Leman A. and Lepoutre G., Compt. Rend., 226, 1976—1978 (1948).
856. Lerner R. G. and Dailey B. P., J. Chem. Phys., 26, 678—680 (1957).
857. Лесанова С. В., Андреевский Д. Н., Нефтехимия, 4, 477—480 (1964).
858. Lewis D. C., Frisch M. A. and Margrave J. L., Carbon, 2, 431—432 (1965).
859. Lewis G. N., Proc. Am. Acad. (Daedalus), 37, 49—69 (1901); Z. Phys. Chem. (Leipzig), 38, 205—226 (1901).
860. Lewis G. N. and Randall M., Thermodynamics and the Free Energy of Chemical Substances, McGraw-Hill, New York, 1923.
861. Lewis G. N. and Randall M., Thermodynamics, 2nd Ed., revised by K. S. Pitzer and L. Brewer, McGraw-Hill, New York, 1961.
862. Li J. C. M. and Pitzer K. S., J. Am. Chem. Soc., 78, 1077—1080 (1956).
863. Li J. C. M. and Rossini F. D., J. Chem. Eng. Data, 6, 268—270 (1961).
864. Li K., J. Phys. Chem., 61, 782—785 (1957).

35. Lide D. R., Jr., J. Am. Chem. Soc., 74, 3548—3552 (1952).
36. Lide D. R., Jr., J. Chem. Phys., 29, 1426—1427 (1958).
37. Lide D. R., Jr., J. Chem. Phys., 30, 37—39 (1959).
38. Lide D. R., Jr. and Jen M., J. Chem. Phys., 38, 1504—1557 (1963).
39. Lide D. R., Jr. and Mann D. E., J. Chem. Phys., 25, 1128—1131 (1956).
40. Lide D. R., Jr. and Mann D. E., J. Chem. Phys., 27, 868—873 (1957).
41. Lide D. R., Jr. and Mann D. E., J. Chem. Phys., 27, 874—877 (1957).
42. Lide D. R., Jr. and Mann D. E., J. Chem. Phys., 28, 572—576 (1958).
43. Lide D. R., Jr. and Mann D. E., J. Chem. Phys., 29, 914—920 (1958).
44. Lin C. C. and Kilb R. W., J. Chem. Phys., 24, 631 (1956).
45. Lin C. C. and Swalen J. D., Rev. Mod. Phys., 31, 841—892 (1959).
46. Linnett J. W., J. Chem. Phys., 6, 692—702 (1938).
47. Lippincott E. R. and Lord R. C., J. Am. Chem. Soc., 73, 3889—3891 (1951).
48. Lister M. W., J. Am. Chem. Soc., 63, 143—149 (1941).
49. Livingston R. L., Rao C. N. R., Kaplan L. H. and Rocks L., J. Am. Chem. Soc., 80, 5368—5371 (1958).
50. Loeffler Sr. M. C. and Rossini F. D., J. Phys. Chem., 64, 1530—1533 (1960).
51. Long D. A., Murfin F. S. and Williams R. L., Proc. Roy. Soc. (London), Ser. A., 223, 251—266 (1954).
52. Long L. H. and Norrish R. G. W., Phil. Trans. Roy. Soc. London, Ser. A, 241, 587—617 (1949).
53. Lord G. and Woolf A. A., J. Chem. Soc., 2546—2551 (1954).
54. Lord R. C., Jr. and Blanchard E. R., J. Chem. Phys., 4, 707—710 (1936).
55. Lord R. C. and Nolin B., J. Chem. Phys., 24, 656—658 (1956).
56. Lord R. C. and Rea D. G., J. Am. Chem. Soc., 79, 2401—2406 (1957).
57. Lossing F. P., Ingold K. U. and Henderson I. H. S., J. Chem. Phys., 22, 1489—1492 (1954).
58. Lovell R. J., Stephenson C. F. and Jones E. A., J. Chem. Phys., 22, 1953—1955 (1954).
59. Lovering E. G. and Laidler K. J., Can. J. Chem., 38, 2367—2372 (1960).
60. Luft N. W., J. Chem. Phys., 21, 1900—1901 (1953).
61. Luft N. W., J. Chem. Phys., 22, 155—156 (1954).
62. Luft N. W. and Kharbada O. P., J. Chem. Phys., 22, 956—957 (1954).
63. Luft N. W. and Todhunter K. H., J. Chem. Phys., 21, 2225—2226 (1953).
64. Lydersen A., Greenkorn R. A. and Hougen O. A., Univ. Wis. Coll. Eng. Expt. Sta. Rept., 4, 99 pp. (1955).
65. MacDougall F. H., J. Am. Chem. Soc., 58, 2585—2591 (1936).
66. Макирачек К., Захаров А. И., Алешина Л. А., Хим. пром., 12, 23—24 (1962).
67. Mackle H. and Mayrick R. G., «A Plastic Capsule Technique for the Combustion Calorimetry of Volatile or Chemically Reactive Compounds: The Heat of Combustion of Polythene», in Proceedings of the Symposium on Thermodynamics, IUPAC Fritzens-Wattens, Austria, August 1959, pp. 25—28.
68. Mackle H. and Mayrick R. G., Trans. Faraday Soc., 58, 33—39 (1962).
69. Mackle H. and Mayrick R. G., Trans. Faraday Soc., 58, 230—237 (1962).
70. Mackle H. and Mayrick R. G., Trans. Faraday Soc., 58, 238—243 (1962).
71. Mackle H. and McClean R. T. B., Trans. Faraday Soc., 58, 895—899 (1962).
72. Mackle H. and McClean R. T. B., Trans. Faraday Soc., 60, 669—672 (1964).
73. Mackle H. and McClean R. T. B., Trans. Faraday Soc., 60, 817—821 (1964).
74. Mackle H. and O'Hare P. A. G., Trans. Faraday Soc., 57, 1070—1074 (1961).
75. Mackle H. and O'Hare P. A. G., Trans. Faraday Soc., 57, 1521—1526 (1961).
76. Mackle H. and O'Hare P. A. G., Trans. Faraday Soc., 57, 1873—1876 (1961).
77. Mackle H. and O'Hare P. A. G., Trans. Faraday Soc., 57, 2119—2124 (1961).
78. Mackle H. and O'Hare P. A. G., Trans. Faraday Soc., 58, 1912—1915 (1962).
79. Mackle H. and O'Hare P. A. G., Trans. Faraday Soc., 59, 309—315 (1963).
80. Mackle H. and O'Hare P. A. G., Trans. Faraday Soc., 60, 506—509 (1964).
81. Mackle H. and O'Hare P. A. G., Trans. Faraday Soc., 60, 666—668 (1964).

912. *Madigan J. R. and Cleveland F. F.*, J. Chem. Phys., **19**, 119—123 (1951).
 913. *Magnus A.*, Z. Phys. Chem. (Frankfurt), **9**, 141—161 (1956).
 914. *Magnus A., Hartmann H. and Becker F.*, Z. Phys. Chem. (Leipzig), **197**, 75—91 (1951).
 915. *Makishima S., Yoneda Y. and Saito Y.*, Actes 2nd Intern. Congr. Catalyse, Paris, 1960, **1**, 617—643 (1961).
 916. *Malherbe F. E. and Bernstein H. J.*, J. Am. Chem. Soc., **74**, 4408—4410 (1952).
 917. *Mann D. E., Acquista N. and Plyler E. K.*, J. Chem. Phys., **21**, 1949—1953 (1953).
 918. *Mann D. E., Acquista N. and Plyler E. K.*, J. Chem. Phys., **22**, 1199—1202 (1954).
 919. *Mann D. E., Acquista N. and Plyler E. K.*, J. Chem. Phys., **22**, 1586—1592 (1954).
 920. *Mann D. E., Acquista N. and Plyler E. K.*, J. Res. Natl. Bur. Std., **52**, 67—72 (1954).
 921. *Mann D. E., Acquista N. and Plyler E. K.*, J. Chem. Phys., **23**, 2122—2126 (1955).
 922. *Mann D. E., Fano L., Meal J. H. and Shimanouchi T.*, J. Chem. Phys., **27**, 51—59 (1957).
 923. *Mann D. E., Meal J. H. and Plyler E. K.*, J. Chem. Phys., **24**, 1018—1022 (1956).
 924. *Mann D. E. and Plyler E. K.*, J. Chem. Phys., **23**, 1989—1993 (1955).
 925. *Månsson M. and Sunner S.*, Acta Chem. Scand., **16**, 1863—1869 (1962).
 926. *Månsson M. and Sunner S.*, Acta Chem. Scand., **17**, 723—727 (1963).
 927. *Månsson M. and Sunner S.*, Acta Chem. Scand., **20**, 845—848 (1966).
 928. *Manzoni-Ansidei R. and Storto T.*, Atti Accad. Ital. Rend. Classe Sci. Fis., Mat. Nat. [7], **1**, 465—470 (1940).
 929. *Margrave J. L.*, J. Chem. Phys., **24**, 475—476 (1956).
 930. *Margrave J. L.*, in Proceedings of the Symposium on High Temperature — A Tool for the Future, Berkeley, Calif., June, 1956, Stanford Research Institute, Palo Alto, Calif.
 931. *Margrave J. L., Frisch M. A., Bautista R. G., Clarke R. L. and Johnson W. S.*, J. Am. Chem. Soc., **85**, 546—548 (1963).
 932. *Maroney W.*, J. Am. Chem. Soc., **57**, 2397—2398 (1935).
 933. *Marshall C. H.*, Chem. Eng. Progr., **46**, 313—318 (1950).
 934. *Martin J. J.*, J. Chem. Eng. Data, **7**, 68—72 (1962).
 935. *Masi J. F.*, J. Am. Chem. Soc., **74**, 4738—4741 (1952); **75**, 2276—2277 (1953).
 936. *Masi J. F.*, J. Am. Chem. Soc., **75**, 5082—5084 (1953).
 937. *Маслов П. Г.*, Химия сера- и азоторганических соединений, содержащихся в нефтях и нефтепродуктах, т. III, Изд. Баш. ФАН СССР, 1960, стр. 115—120.
 938. *Маслов П. Г., Маслов Ю. П.*, Химия и технология топлива и масел, **3**, (10), 50—55 (1958).
 939. *Mathews J. F. and McKetta J. J.*, J. Phys. Chem., **65**, 758—762 (1961).
 940. *Mathews J. H.*, J. Am. Chem. Soc., **48**, 562—576 (1926).
 941. *Mathews J. H. and Fehlandt P. R.*, J. Am. Chem. Soc., **53**, 3213—3217 (1931).
 942. *Mayer J. E. and Mayer M. G.*, Statistical Mechanics, Wiley, New York, 1940.
 943. *Mazur J.*, Z. Phys., **113**, 710—720 (1939).
 944. *McBride B. J. and Gordon S.*, J. Chem. Phys., **35**, 2198—2206 (1961).
 945. *McCulloh K. E. and Pollnow G. F.*, J. Chem. Phys., **22**, 1144 (1954).
 946. *McCullough J. P.*, J. Chem. Phys., **29**, 966—967 (1958).
 947. *McCullough J. P.*, U. S. Bur. Mines Inform. Circ., **8034**, 49 pp. (1961).
 948. *McCullough J. P., Douslin D. R., Hubbard W. N., Todd S. S., Messerly J. F., Hossenlopp I. A., Frow F. R., Dawson J. P. and Waddington G.*, J. Am. Chem. Soc., **81**, 5884—5890 (1959).

949. *McCullough J. P., Douslin D. R., Messerly J. F., I. A. Hossenlopp, Kincheloe T. C., and Waddington G.*, J. Am. Chem. Soc., **79**, 4289—4295 (1957).
 950. *McCullough J. P., Finke H. L., Gross M. E., Messerly J. F. and Waddington G.*, J. Phys. Chem., **61**, 289—301 (1957).
 951. *McCullough J. P., Finke H. L., Hubbard W. N., Good W. D., Pennington R. E., Messerly J. F., and Waddington G.*, J. Am. Chem. Soc., **76**, 2661—2669 (1954).
 952. *McCullough J. P., Finke H. L., Hubbard W. N., Todd S. S., Messerly J. F., Douslin D. R. and Waddington G.*, J. Phys. Chem., **65**, 784—791 (1961).
 953. *McCullough J. P., Finke H. L., Messerly J. F., Pennington R. E., Hossenlopp I. A. and Waddington G.*, J. Am. Chem. Soc., **77**, 6119—6125 (1955).
 954. *McCullough J. P., Finke H. L., Messerly J. F., Todd S. S., Kincheloe T. C. and Waddington G.*, J. Phys. Chem., **61**, 1105—1116 (1957).
 955. *McCullough J. P., Finke H. L., Scott D. W., Gross M. E., Messerly J. F., Pennington R. E. and Waddington G.*, J. Am. Chem. Soc., **76**, 4796—4802 (1954).
 956. *McCullough J. P., Finke H. L., Scott D. W., Pennington R. E., Gross M. E., Messerly J. F. and Waddington G.*, J. Am. Chem. Soc., **80**, 4786—4793 (1958).
 957. *McCullough J. P. and Good W. D.*, J. Phys. Chem., **65**, 1430—1432 (1961).
 958. *McCullough J. P., Hubbard W. N., Frow F. R., Hossenlopp I. A. and Waddington G.*, J. Am. Chem. Soc., **79**, 561—566 (1957).
 959. *McCullough J. P., Pennington R. E., Smith J. C., Hossenlopp I. A. and Waddington G.*, J. Am. Chem. Soc., **81**, 5880—5883 (1959).
 960. *McCullough J. P. and Scott D. W.*, J. Am. Chem. Soc., **81**, 1331—1334 (1959).
 961. *McCullough J. P. and Scott D. W.*, private communication to D. R. Stull, Sept. 27, 1960.
 962. *McCullough J. P., Scott D. W., Finke H. L., Gross M. E., Williamson K. D., Pennington R. E., Waddington G. and Huffman H. M.*, J. Am. Chem. Soc., **74**, 2801—2804 (1952).
 963. *McCullough J. P., Scott D. W., Finke H. L., Hubbard W. N., Gross M. E., Katz C., Pennington R. E., Messerly J. F. and Waddington G.*, J. Am. Chem. Soc., **75**, 1818—1824 (1953).
 964. *McCullough J. P., Scott D. W., Pennington R. E., Hossenlopp I. A. and Waddington G.*, J. Am. Chem. Soc., **76**, 4791—4796 (1954).
 965. *McCullough J. P., Sunner S., Finke H. L., Hubbard W. N., Gross M. E., Pennington R. E., Messerly J. F., Good W. D. and Waddington G.*, J. Am. Chem. Soc., **75**, 5075—5081 (1953).
 966. *McCurdy K. G. and Laidler K. J.*, Can. J. Chem., **41**, 1867—1871 (1963).
 967. *McDonald H. J.*, J. Phys. Chem., **48**, 47—50 (1944).
 968. *McDonald R. A.*, Dow Thermal Research Laboratory, personal communication, March, 12, 1958.
 969. *McDonald R. A., Shrader S. A. and Stull D. R.*, J. Chem. Eng. Data, **4**, 311—313 (1959).
 970. *McDougall L. A. and Kilpatrick J. E.*, J. Chem. Phys., **42**, 2307—2310 (1965).
 971. *McDougall L. A. and Kilpatrick J. E.*, J. Chem. Phys., **42**, 2311—2321 (1965).
 972. *McDowell R. S. and Kruse F. H.*, J. Chem. Eng. Data, **8**, 547—548 (1963).
 973. *McEachern D. M., Jr. and Kilpatrick J. E.*, J. Chem. Phys., **41**, 3127—3131 (1964).
 974. *McEwan W. S. and Rigg M. W.*, J. Am. Chem. Soc., **73**, 4725—4727 (1951).
 975. *McGee P. R., Cleveland F. F., Meister A. G., Decker C. E. and Miller S. I.*, J. Chem. Phys., **21**, 242—246 (1953).
 976. *McGlashan M. L.*, J. Chem. Educ., **43**, 226—232 (1953).
 977. *McKinley-McKee J. S. and Moelwyn-Hughes E. A.*, Trans. Faraday Soc., **48**, 247—253 (1952).

978. *McMorris J. and Badger R. M.*, J. Am. Chem. Soc., 55, 1952—1957 (1933).
 979. *Mears W. H., Stahl R. F., Orfeo S. R., Shair R. C., Kells L. F., Thompson W. and McCann H.*, Ind. Eng. Chem., 47, 1449—1454 (1955).
 980. *Mecke R.*, Z. Elektrochem., 36, 589—596 (1930); Z. Phys. Chem. (Leipzig), B16, 409—420, 421—437; B17, 1—20 (1932); Z. Phys. 104, 291—302 (1936).
 981. *Médard L. and Thomas M.*, Mem. Poudres, 31, 173—196 (1949).
 982. *Médard L. and Thomas M.*, Mem. Poudres, 34, 421—442 (1952).
 983. *Médard L. and Thomas M.*, Mem. Poudres, 35, 155—173 (1953).
 984. *Médard L. and Thomas M.*, Mem. Poudres, 36, 97—127 (1954).
 985. *Médard L. and Thomas M.*, Mem. Poudres, 37, 129—138 (1955).
 986. *Médard L. and Thomas M.*, Mem. Poudres, 38, 45—63 (1956).
 987. *Mehl W.*, Beih. Z. Ges. Kälte-Ind., Ser. 1 (3), 5—35 (1933).
 988. *Mehl W.*, Z. Ges. Kälte-Ind., 41, 152—153 (1934).
 989. *Mehl W.*, Z. Phys. Chem. (Leipzig), A169, 312—313 (1934).
 990. *Meister A. G., Dowling J. M. and Bielecki A. J.*, J. Chem. Phys., 25, 941—942 (1956).
 991. *Messerly G. H. and Aston J. G.*, J. Am. Chem. Soc., 62, 886—890 (1940).
 992. *Messerly G. H. and Kennedy R. M.*, J. Am. Chem. Soc., 62, 2988—2991 (1940).
 993. *Messerly J. F., Todd S. S. and Finke H. L.*, J. Phys. Chem., 69, 353—359 (1965).
 994. *Messerly J. F., Todd S. S. and Finke H. L.*, J. Phys. Chem., 69, 4304—4311 (1965).
 995. *Meyers C. H.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 9, 807—813 (1932).
 996. *Michael A. and Carlson G. H.*, J. Am. Chem. Soc., 57, 159—164 (1935).
 997. *Michels A., de Groot S. R. and Geldermans M.*, Appl. Sci. Res. Sect. A., 1, 55—65 (1947).
 998. *Michels A., Visser A., Lunbeck R. J. and Wolkers G. J.*, Physica, 18, 114—120 (1952).
 999. *Milazzo G.*, Gazz. Chim. Ital., 74, 49—57 (1944).
 1000. *Miles C. B. and Hunt H.*, J. Phys. Chem., 45, 1346—1359 (1941).
 1001. *Miller A. J. and Hunt H.*, J. Phys. Chem., 49, 20—21 (1945).
 1002. *Miller F. A. and Hannan R. B., Jr.*, J. Chem. Phys., 21, 110—114 (1953).
 1003. *Miller F. A., Hannan R. B., Jr. and Cousins L. R.*, J. Chem. Phys., 23, 2127—2129 (1955).
 1004. *Miller F. A., Lemmon D. H. and Witkowski R. E.*, Spectrochim. Acta 21, 1709—1716 (1965).
 1005. *Miller G. A.*, J. Chem. Eng. Data, 8, 69—72 (1963).
 1006. *Miller P.*, Iowa State Coll. J. Sci., 10, 91—93 (1936).
 1007. *Miller S. A.*, Brit. Chem. Eng., 7, 656—662 (1962).
 1008. *Miller S. L., Aamodt L. C., Dousmanis G., Townes C. H. and Kraitchman J.*, J. Chem. Phys., 20, 1412—1414 (1952).
 1009. *Milligan D. E., Becker E. D. and Pitzer K. S.*, J. Am. Chem. Soc., 78, 2707—2711 (1956).
 1010. *Millikan R. C. and Pitzer K. S.*, J. Chem. Phys., 27, 1305—1308 (1957).
 1011. *Milone M.*, Gazz. Chim. Ital., 61, 153—158 (1931).
 1012. *Milone M. and Allavena S.*, Gazz. Chim. Ital., 61, 75—90 (1931).
 1013. *Milone M. and Venturello G.*, Gazz. Chim. Ital., 66, 808—812 (1936).
 1014. *Mitchell J. E., Jr.*, Trans. Am. Inst. Chem. Eng., 42, 293—308 (1946).
 1015. *Mitra S. S. and Bernstein H. J.*, Can. J. Chem., 37, 553—562 (1959).
 1016. *Miyazawa T. and Pitzer K. S.*, J. Am. Chem. Soc., 80, 60—62 (1958).
 1017. *Мельвин-Хьюз Э. А.*, Физическая химия, книги 1—2, Издательский центр, 1962.
 1018. *Moelwyn-Hughes E. A.*, States of Matter, Oliver and Boyd, Edinburgh, 1961.
 1019. *Möller K. D.*, Compt. Rend., 250, 3977—3979 (1960).
 1020. *Momotani M., Suga H., Seki S., and Nitta I.*, Proc. Natl. Acad. Sci. India. Sect. A., 25, 74—82 (1956).

1021. *Montgomery J. B. and De Vries T.*, J. Am. Chem. Soc., 64, 2375—2377 (1942).
 1022. *Mooney R. B. and Ludlam E. B.*, Proc. Roy. Soc. Edinburgh, 49, 160—169 (1929).
 1023. *Moore C. B. and Pimentel G. C.*, J. Chem. Phys., 38, 2816—2829 (1963).
 1024. *Moore C. B. and Pimentel G. C.*, J. Chem. Phys., 40, 342—355 (1964).
 1025. *Moore G. E., Renquist M. L. and Parks G. S.*, J. Am. Chem. Soc., 62, 1505—1507 (1940).
 1026. *Morino Y. and Kuchitsu K.*, J. Chem. Phys., 28, 175—184 (1958).
 1027. *Morino Y., Miyagawa I. and Haga T.*, J. Chem. Phys., 19, 791—792 (1951).
 1028. *Morris J. C., Lanum W. J., Helm R. V., Paines W. E., Cook G. L. and Ball J. S.*, J. Chem. Eng. Data, 5, 112—116 (1960).
 1029. *Мортимер К.*, Теплоны реакций и прочность связей, изд-во «Мир», 1964.
 1030. *Mortimer C. T., Pritchard H. O. and Skinner H. A.*, Trans. Faraday Soc., 48, 220—228 (1952).
 1031. *de V. Moulds L. and Riley H. L.*, J. Chem. Soc., 621—626 (1938).
 1032. *Moureu H. and Dodé M.*, Bull. Soc. Chim. France, 4, 637—647 (1937).
 1033. *Muelleman C. J., Ramaswamy K., Cleveland F. F. and Sundaram S.*, J. Mol. Spectrosc., 11, 262—274 (1963).
 1034. *Mueller E. F.*, «Precision Resistance Thermometry», in Temperature, Its Measurement and Control in Science and Industry, Reinhold, New York, 1941, pp. 162—179, Chap. 2.
 1035. *Mulliken R. S.*, J. Phys. Chem., 56, 295—311 (1952).
 1036. *Münster A.*, Statistische Thermodynamik, Springer-Verlag, Berlin, 1956.
 1037. *Murata H., Palm. A. and Meister A. G.*, J. Chem. Phys., 23, 702—703 (1955).
 1038. *Murphy G. M. and Vance J. E.*, J. Chem. Phys., 18, 1514—1515 (1950).
 1039. *Murrin J. and Goldhagen S.*, Memorandum Report No. 88, U. S. Naval Powder Factory, Research and Development Department Indian Head, Md., October 19, 1954.
 1040. *Murrin J. W. and Goldhagen S.*, Memorandum Report No. 121, U.S. Naval Powder Factory, Research and Development Department, Indian Head, Md., May 18, 1956.
 1041. *Мушкин Ю. И., Филкельштейн А. И.*, Оптика и спектроскопия, 13, 289—291 (1962).
 1042. *Myers R. J. and Gwinn W. D.*, J. Chem. Phys., 20, 1420—1427 (1952).
 1043. *Nagarajan G.*, Bull. Soc. Chim. Belges, 71, 65—72 (1962).
 1044. *Naito K., Nakagawa I., Kuratani K., Ichishima I. and Mizushima S.*, J. Chem. Phys., 23, 1907—1910 (1955).
 1045. *Nakamura T.*, Shokubai (Sapporo), 7, 17—20 (1951).
 1046. *Nangia P. S. and Benson S. W.*, J. Am. Chem. Soc., 86, 2770—2773 (1964).
 1047. *Narasimham N. A., Nielsen J. R. and Theimer R.*, J. Chem. Phys., 27, 740—745 (1957).
 1048. *Neale E. and Williams L. T. D.*, J. Chem. Soc., 2156—2159 (1954).
 1049. *Neilson E. F. and White D.*, J. Am. Chem. Soc., 79, 5618—5621 (1957).
 1050. *Nelander B. and Sunner S.*, J. Chem. Phys., 44, 2476—2480 (1966).
 1051. *Nelson E. W. and Newton R. F.*, J. Am. Chem. Soc., 63, 2178—2182 (1941).
 1052. *Nelson R. A. and Jessup R. S.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 48, 206—208 (1952).
 1053. *Nernst W.*, Nachr. Ges. Wiss. Göttingen, 1-40 (1906); see also The New Heat Theorem, Methuen, London, 1926.
 1054. *Nernst W.*, Sitzber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss., 12, 13, 261—292 (1910).
 1055. *Nernst W. and co-workers:*
 1055a. cf. [1054].
 1055b. *Nernst W.*, Ann. Phys., 36, 395—439 (1911).
 1055в. *Pollitzer F.*, Z. Elektrochem., 17, 5—14 (1911).
 1055г. *Pollitzer F.*, Z. Elektrochem., 19, 513—518 (1913).
 1055д. *Nernst W. and Schweser F.*, Sitzber. Preuss. Akad. Wiss. 355—370 (1914).

- 1055e. *Gunter P.*, *Ann. Phys.*, **51**, 828 (1916).
 1055ж. *Simon F.*, *Ann. Phys.*, **68**, 241—280 (1922).
 1055з. *Simon F.* and *Lange F.*, *Z. Phys.*, **15**, 312—321 (1923).
 1055а. *Lange F.*, *Z. Phys. Chem. (Leipzig)*, **110**, 343—362 (1924).
 1055к. *Simon F.* and *Zeidler W.*, *Z. Phys. Chem. (Leipzig)*, **123**, 383—404 (1926).
 1055л. *Simon F.* and *Ruhemann M.*, *Z. Phys. Chem. (Leipzig)*, **129**, 321—328 (1927).
 1056. *Neuberg C.* and *Hofmann E.*, *Biochem. Z.*, **252**, 440—450 (1932).
 1057. *Neuberg C.*, *Hofmann E.* and *Kobel M.*, *Biochem. Z.*, **234**, 341—344 (1931).
 1058. *Neugebauer C. A.*, *Univ. Microfilms Publ. No. 21224*, 131 pp.; *Dissertation Abstr.*, **17**, 1478—1479 (1957).
 1059. *Neugebauer C. A.* and *Margrave J. L.*, *J. Phys. Chem.*, **60**, 1318—1321 (1956).
 1060. *Neugebauer C. A.* and *Margrave J. L.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **79**, 1338—1340 (1957).
 1061. *Neugebauer C. A.* and *Margrave J. L.*, *J. Phys. Chem.*, **62**, 1043—1048 (1958).
 1062. *Newton R. H.* and *Dodge B. F.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **55**, 4747—4759 (1933).
 1063. *Newton R. H.* and *Dodge B. F.*, *Ind. Eng. Chem.*, **27**, 577—581 (1935).
 1064. *Nicholson G. R.*, *J. Chem. Soc.*, 2431—2432 (1957).
 1065. *Nicholson G. R.*, *J. Chem. Soc.*, 2377—2378 (1960).
 1066. *Nicholson G. R.*, *J. Chem. Soc.*, 2378—2379 (1960).
 1067. *Nicholson G. R.*, *Szwarc M.* and *Taylor J. W.*, *J. Chem. Soc.*, 2767—2769 (1954).
 1068. *Nickerson J. K.*, *Kobe K. A.* and *McKetta J. J.*, *J. Phys. Chem.*, **65**, 1037—1043 (1961).
 1069. *Nicolini E.*, *Ann. Chim. (Paris)*, **6**, 582—629 (1951).
 1070. *Nielsen J. R.*, *Claassen H. H.* and *Smith D. C.*, *J. Chem. Phys.*, **18**, 1471—1476 (1950).
 1071. *Nielsen J. R.*, *Liang C. Y.* and *Daasch L. W.*, *J. Opt. Soc. Am.*, **43**, 1071—1079 (1953).
 1072. *Nielsen J. R.*, *Liang C. Y.* and *Smith D. C.*, *J. Chem. Phys.*, **20**, 1090—1094 (1952).
 1073. *Nielsen J. R.*, *Liang C. Y.* and *Smith D. C.*, *J. Chem. Phys.*, **21**, 1060—1069 (1953).
 1074. *Nielsen J. R.*, *Liang C. Y.*, *Smith D. C.* and *Alpert M.*, *J. Chem. Phys.*, **21**, 1070—1076 (1953).
 1075. *Nielsen J. R.* and *Theimer R.*, *J. Chem. Phys.*, **27**, 891—895 (1957).
 1076. *Nielsen J. R.* and *Theimer R.*, *J. Chem. Phys.*, **30**, 103—104 (1959).
 1077. *Nishikawa T.*, *J. Phys. Soc. Japan*, **12**, 668—680 (1957).
 1078. *Nishikawa T.*, *Itoh T.* and *Shimoda K.*, *J. Chem. Phys.*, **23**, 1735—1736 (1955).
 1079. *Noble P., Jr.*, *Reed W. L.*, *Hoffman C. J.*, *Gallaghan J. A.* and *Borgardt F. G.*, *Am. Inst. Aeron. Astronaut. J.*, **1**, 395—397 (1963).
 1080. *Noddings C. R.* and *Mullet G. M.*, *Handbook of Compositions at Thermodynamic Equilibrium*, Interscience Publishers, New York, 1965.
 1081. *Оберемок-Анубова А. П.*, *Балаидин А. А.*, *Изв. АН СССР, хим. секц.*, 2210—2211 (1963).
 1082. *Oetting F. L.*, *J. Phys. Chem.*, **67**, 2757—2761 (1963).
 1083. *Oetting F. L.*, *J. Chem. Phys.*, **41**, 149—153 (1964).
 1084. *Oetting F. L.*, *J. Chem. Eng. Data*, **10**, 122—125 (1965).
 1085. *Oliver G. D.*, *Eaton M.* and *Huffman H. M.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **70**, 1502—1505 (1948).
 1086. *Oliver G. D.* and *Grisard J. W.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **73**, 1688—1690 (1951).
 1087. *Oosaka H.*, *Bull. Chem. Soc. Japan*, **15**, 31—36 (1940).
 1088. *Oosaka H.*, *Sekine H.* and *Saito T.*, *Bull. Chem. Soc. Japan*, **27**, 182—184 (1954).

089. *Organick E. I.* and *Studhalter W. R.*, *Chem. Eng. Progr.*, **44**, 847—854 (1948).
 090. *Oriani R. A.* and *Smyth C. P.*, *J. Chem. Phys.*, **16**, 930 (1948).
 091. *Osborn A. G.* and *Douslin D. R.*, *J. Chem. Eng. Data*, **11**, 502—509 (1966).
 092. *Osborne D. W.*, *Doescher R. N.* and *Yost D. M.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **64**, 169—172 (1942).
 093. *Othmer D. F.*, *Ind. Eng. Chem.*, **34**, 1072—1078 (1942).
 094. *Overend J.* and *Evans J. C.*, *Trans. Faraday Soc.*, **55**, 1817—1825 (1959).
 095. *Overend J.*, *Nyquist R. A.*, *Evans J. C.* and *Potts W. J.*, *Spectrochim. Acta*, **17**, 1205—1218 (1961).
 096. *Overmars J. D.* and *Blinder S. M.*, *J. Phys. Chem.*, **68**, 1801—1803 (1964).
 097. *Pace E. L.* and *Aston J. G.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **70**, 566—570 (1948).
 098. *Pace E. L.* and *Bobka R. J.*, *J. Chem. Phys.*, **35**, 454—457 (1961).
 099. *Palm A.* and *Kilpatrick M.*, *J. Chem. Phys.*, **23**, 1562—1563 (1955).
 100. *Palm A.*, *Voelz F. L.* and *Meister A. G.*, *J. Chem. Phys.*, **23**, 726—728 (1955).
 101. *Pardee W. A.* and *Weinrich W.*, *Ind. Eng. Chem.*, **36**, 595—603 (1944).
 102. *Parks G. S.* and *Hatton J. A.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **71**, 2773—2775 (1949).
 103. *Parks G. S.* and *Huffman H. M.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **48**, 2788—2793 (1926).
 104. *Parks G. S.* and *Huffman H. M.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **52**, 4381—4391 (1930).
 105. *Parks G. S.* and *Huffman H. M.*, *The Free Energies of Some Organic Compounds*, Chemical Catalog Co., New York, 1932.
 106. *Parks G. S.*, *Huffman H. M.* and *Barmore M.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **55**, 2733—2740 (1933).
 107. *Parks G. S.*, *Huffman H. M.* and *Thomas S. B.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **52**, 1032—1044 (1930).
 108. *Parks G. S.*, *Kelley K. K.* and *Huffman H. M.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **51**, 1969—1973 (1929).
 109. *Parks G. S.*, *Kennedy W. D.*, *Gates R. R.*, *Mosley J. R.*, *Moore G. E.* and *Renquist M. L.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **78**, 56—59 (1956).
 110. *Parks G. S.* and *Light D. W.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **56**, 1511—1513 (1934).
 111. *Parks G. S.* and *Manchester K. E.*, *Thermochem. Bull.*, **2**, 8 (March 1956).
 112. *Parks G. S.*, *Manchester K. E.* and *Vaughan L. M.*, *J. Chem. Phys.*, **22**, 2089—2090 (1954).
 113. *Parks G. S.*, *Moore G. E.*, *Renquist M. L.*, *Naylor B. F.*, *McClaine L. A.*, *Fujii P. S.* and *Hatton J. A.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **71**, 3386—3389 (1949).
 114. *Parks G. S.* and *Mosher H. P.*, *J. Chem. Phys.*, **37**, 919—920 (1962).
 115. *Parks G. S.* and *Mosley J. R.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **72**, 1850 (1950).
 116. *Parks G. S.*, *Mosley J. R.* and *Peterson P. V., Jr.*, *J. Chem. Phys.*, **18**, 152—153 (1950).
 117. *Parks G. S.*, *Thomas S. B.* and *Light D. W.*, *J. Chem. Phys.*, **4**, 64—69 (1936).
 118. *Parks G. S.*, *Todd S. S.* and *Moore W. A.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **58**, 398—401 (1936).
 119. *Parks G. S.*, *Todd S. S.* and *Shomate C. H.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **58**, 2505—2508 (1936).
 120. *Parks G. S.*, *West T. J.* and *Moore G. E.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **63** 1133—1135 (1941).
 121. *Parks G. S.*, *West T. J.*, *Naylor B. F.*, *Fujii P. S.* and *McClaine L. A.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **68**, 2524—2527 (1946).
 122. *Parris M.*, *Raybin P. S.* and *Labowitz L. C.*, *J. Chem. Eng. Data*, **9**, 221—223 (1964).
 123. *Partington E. J.*, *Rowlinson J. S.* and *Weston J. F.*, *Trans. Faraday Soc.*, **56**, 479—485 (1960).
 124. *Partington J. R.*, *An Advanced Treatise on Physical Chemistry*, Vol. II. Longmans Green, New York, 1951, pp. 226—274.
 125. *Pässler W.*, *Doctoral Dissertation*, Dresden, 1930; cited by *W. Auer* (52), p. 655.

1126. Patrick C. R., *Tetrahedron*, **4**, 26—35 (1958).
 1127. Patrick C. R., «The Thermochemistry of Organic Fluorine Compounds», in M. Stacey, J. C. Tatlow and A. G. Sharpe (Eds.), *Advances in Fluorine Chemistry*. Vol. 2, Butterworths, London, 1961, pp. 1—34.
 1128. Patrick C. R. and Prosser C. S., *Trans. Faraday Soc.*, **60**, 700—704 (1964).
 1129. Paul M. A., *Principles of Chemical Thermodynamics*, McGraw-Hill, New York, 1951.
 1130. Pauling L., *The Nature of the Chemical Bond*, 3rd Ed., Cornell University Press, Ithaca, N. Y., 1960 (Есть перевод первого издания: Паулинг Л., *Природа химической связи*, Госхимиздат, М., 1947 г.).
 1131. Payne D. H., Dissertation, University of Michigan, 1954; Univ. Microfilms Publ. No. 14336 (L-2105), 131 pp.; Dissertation Abstr., **15**, 723 (1955).
 1132. Payne D. H. and Westrum E. F., Jr., *J. Phys. Chem.*, **66**, 748—751 (1962).
 1133. Pell A. S. and Pilcher G., *Trans. Faraday Soc.*, **61**, 71—77 (1965).
 1134. Pennington R. E., Finke H. L., Hubbard W. N., Messerly J. F., Frow F. R., Hossenlopp I. A. and Waddington G., *J. Am. Chem. Soc.*, **78**, 2055—2060 (1956).
 1135. Pennington R. E. and Kobe K. A., *J. Am. Chem. Soc.*, **79**, 300—305 (1957).
 1136. Pennington R. E., Scott D. W., Finke H. L., McCullough J. P., Messerly J. F., Hossenlopp I. A. and Waddington G., *J. Am. Chem. Soc.*, **78**, 3266—3272 (1956).
 1137. Perez Masía A. and Diaz Peña M., *Anales Real Soc. Espan. Fis. Quim. (Madrid.)*, Ser. B., **54**, 661—668 (1958).
 1138. Perlick A., *Bull. Intern. Inst. Refrig.*, **18** (4), A1-9 (1937).
 1139. Perrottet E., Taub W. and Briner E., *Helv. Chim. Acta*, **23**, 1260—1268, (1940).
 1140. Person W. B. and Pimentel G. C., *J. Am. Chem. Soc.*, **75**, 532—538 (1953).
 1141. Philip J. C. and Waterton S. C., *J. Chem. Soc.*, 2783—2784 (1930).
 1142. Phillips E. W. and Klimpel R. R., *J. Chem. Eng. Data*, **13**, 97—101 (1968).
 1143. Pierce L. and Hayashi M., *J. Chem. Phys.*, **35**, 479—485 (1961).
 1144. Pierce L., Nelson R. and Thomas C., *J. Chem. Phys.*, **43**, 3423—3431 (1965).
 1145. Pilcher G., Pell A. S. and Coleman D. J., *Trans. Faraday Soc.*, **60**, 499—505 (1964).
 1146. Pilcher G., Skinner H. A., Pell A. S. and Pope A. E., *Trans Faraday Soc.*, **59**, 316—330 (1963).
 1147. Pilcher G. and Sutton L. E., *J. Chem. Soc.*, 2695—2700 (1956).
 1148. Pillai M. G. K. and Cleveland F. F., *J. Mol. Spectrosc.*, **5**, 212—217 (1960).
 1149. Pillai M. G. K. and Cleveland F. F., *J. Mol. Spectrosc.*, **6**, 465—471 (1961).
 1150. Pitzer K. S., *Chem. Rev.*, **27**, 39—57 (1940).
 1151. Pitzer K. S., *J. Am. Chem. Soc.*, **62**, 331—335 (1940).
 1152. Pitzer K. S., *J. Am. Chem. Soc.*, **62**, 1224—1227 (1940).
 1153. Pitzer K. S., *J. Chem. Phys.*, **8**, 711—720 (1940).
 1154. Pitzer K. S., *J. Am. Chem. Soc.*, **63**, 2413—2418 (1941).
 1155. Pitzer K. S., *Ind. Eng. Chem.*, **36**, 829—831 (1944).
 1156. Pitzer K. S., *J. Chem. Phys.*, **14**, 239—243 (1946).
 1157. Pitzer K. S., *Discussions Faraday Soc.*, **10**, 66—73 (1951).
 1158. Pitzer K. S. and Brewer L., *Thermodynamics* (by G. N. Lewis and Randall M.), 2nd Ed., McGraw-Hill, New York, 1961.
 1159. Pitzer K. S. and Gelles E., *J. Chem. Phys.*, **21**, 855—858 (1953).
 1160. Pitzer K. S., Guttman L. and Westrum E. F., Jr., *J. Am. Chem. Soc.*, **68**, 2209—2212 (1946).
 1161. Pitzer K. S. and Gwinn W. D., *J. Am. Chem. Soc.*, **63**, 3313—3316 (1941).
 1162. Pitzer K. S. and Gwinn W. D., *J. Chem. Phys.*, **10**, 428—440 (1942).
 1163. Pitzer K. S. and Hollenberg J. L., *J. Am. Chem. Soc.*, **76**, 1493—1496 (1954).
 1164. Pitzer K. S. and Kilpatrick J. E., *Chem. Rev.*, **39**, 435—447 (1946).
 1165. Pitzer K. S. and Scott D. W., *J. Am. Chem. Soc.*, **63**, 2419—2422 (1941).
 1166. Pitzer K. S. and Scott D. W., *J. Am. Chem. Soc.*, **65**, 803—829 (1943).

1167. Pitzer K. S. and Weltner W., Jr., *J. Am. Chem. Soc.*, **71**, 2842—2844 (1949).
 1168. Planck M., *Ber.*, **45**, 5—23 (1912).
 1169. Platt J. R., *J. Chem. Phys.*, **15**, 419—420 (1947).
 1170. Platt J. R., *J. Phys. Chem.*, **56**, 328—336 (1952).
 1171. Plyler E. K., *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **64A**, 377—379 (1960).
 1172. Plyler E. K. and Benedict W. S., *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **47**, 202—220 (1951).
 1173. Pohland E. and Mehl W., *Z. Phys. Chem. (Leipzig)*, **A164**, 48—54 (1933).
 1174. Polo S. R., Palm A., Voelz F. L., Cleveland F. F., Meister A. G., Bernstein R. B. and Sherman R. H., *J. Chem. Phys.*, **23**, 833—837 (1955).
 1175. Pongratz A., Böhmert-Süss S. and Scholtis K., *Ber.*, **77B**, 651—661 (1944).
 1176. Пономарев В. В., Алексеева Т. А., Акимова Л. Н., *ЖФХ*, **36**, 872—873 (1962).
 1177. Пономарев В. В., Алексеева Т. А., Акимова Л. Н., *ЖФХ*, **36**, 1083—1084 (1962).
 1178. Пономарев В. В., Алексеева Т. А., Акимова Л. Н., *ЖФХ*, **37**, 227—228 (1963).
 1179. Pontarelli D. A., Meister A. G., Cleveland F. F., Voelz F. L., Bernstein R. B. and Sherman R. H., *J. Chem. Phys.*, **20**, 1949—1954 (1952).
 1180. Popov M. M. and Schirokich P. K., *Z. Phys. Chem. (Leipzig)*, **A167**, 183—187 (1933).
 1181. Porto S. P. S., *J. Mol. Spectrosc.*, **3**, 248—258 (1959).
 1182. Potter R. L., *J. Chem. Phys.*, **26**, 394—397 (1957).
 1183. Potter R. L., *J. Chem. Phys.*, **31**, 1100—1103 (1959).
 1184. Poynter R. L., *J. Chem. Phys.*, **39**, 1962—1966 (1963).
 1185. Prausnitz J. M. and Carter W. B., *Am. Inst. Chem. Eng., J.*, **6**, 611—614 (1960).
 1186. Price D., *J. Chem. Phys.*, **9**, 807—815 (1941); **10**, 80 (1942).
 1187. Pritchard H. O. and Skinner H. A., *J. Chem. Soc.*, 272—276 (1950).
 1188. Pritchard H. O. and Skinner H. A., *J. Chem. Soc.*, 1099 (1950).
 1189. Pritchard H. O. and Skinner H. A., *J. Chem. Soc.*, 1928—1931 (1950).
 1190. Pritzkow W. and Müller K. A., *Ber.*, **89**, 2318—2321 (1956).
 1191. Prosen E. J., «Combustion in a Bomb of Compounds Containing Carbon, Hydrogen, Oxygen and Nitrogen», in F. D. Rossini (Ed.), *Experimental Thermochemistry*, Vol. I, Interscience Publishers, New York, 1956, Chap. 6.
 1192. Prosen E. J., quoted by Otto E. M., *J. Electrochem. Soc.*, **111**, 88—92 (1964).
 1193. Prosen E. J., Hill M. E. and Jaffe I., unpublished work, National Bureau of Standards, Washington, D. C.
 1194. Prosen E. J., Gilman R. and Rossini F. D., *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **34**, 65—71 (1945).
 1195. Prosen E. J., Johnson W. H. and Rossini F. D., *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **36**, 455—461 (1946).
 1196. Prosen E. J., Johnson W. H. and Rossini F. D., *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **37**, 51—56 (1946).
 1197. Prosen E. J., Johnson W. H. and Rossini F. D., *J. Am. Chem. Soc.*, **72**, 626—627 (1950).
 1198. Prosen E. J., Maron F. W. and Rossini F. D., *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **42**, 269—277 (1949).
 1199. Prosen E. J. R. and Rossini F. D., *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **27**, 289—310 (1941).
 1200. Prosen E. J. and Rossini F. D., *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **33**, 255—272 (1944).
 1201. Prosen E. J. and Rossini F. D., *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **33**, 439—446 (1944).
 1202. Prosen E. J. and Rossini F. D., *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **34**, 163, 174 (1945).
 1203. Prosen E. J. and Rossini F. D., *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **34**, 263—269 (1945).
 1204. Prosen E. J. and Rossini F. D., *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **36**, 269—275 (1946).
 1205. Puranik P. G. and Ramaswamy L., *Proc. Indian Acad. Sci. Sect. A*, **52**, 135—142 (1960).

1206. *Puranik P. G. and Rao E. V.*, Indian J. Phys., 35, 177—182 (1961).
 1207. *Hyunapeea S. B., Kokouko S. Ю.*, ЖРОХ, 16, 1269—1278 (1946).
 1208. *Putnam W. E. and Kilpatrick J. E.*, J. Chem. Phys., 27, 1075—1080 (1957).
 1209. *Putnam W. E., McEachern D. M., Jr. and Kilpatrick J. E.*, J. Chem. Phys., 42, 749—755 (1965).
 1210. *Railing W. E.*, J. Am. Chem. Soc., 61, 3349—3353 (1939).
 1211. *Ramaswamy K., Sathianandan K. and Cleveland F. F.*, Spectrosc. Mol., 11, 14—15 (1962).
 1212. *Ramsay W. and Young S.*, J. Chem. Soc., 49, 453—462 (1886).
 1213. *Rank D. H. and Baldwin W. M.*, J. Chem. Phys., 19, 1210—1214 (1951).
 1214. *Rathjens G. W., Jr., Freeman N. K., Gwinn W. D. and Pitzer K. S.*, J. Am. Chem. Soc., 75, 5634—5642 (1953).
 1215. *Rathjens G. W., Jr., and Gwinn W. D.*, J. Am. Chem. Soc., 75, 5629—5633 (1953).
 1216. *Ray J. D. and Gershon A. A.*, J. Phys. Chem., 66, 1750 (1962).
 1217. *Ray J. D. and Ogg R. A., Jr.*, J. Chem. Phys., 31, 168—171 (1959).
 1218. *Ray J. D. and Ogg R. A., Jr.*, J. Phys. Chem., 63, 1522—1523 (1959).
 1219. *Rees A. L. G.*, J. Chem. Phys., 26, 1567—1571 (1957).
 1220. *Reid R. C. and Sherwood T. K.*, The Properties of Gases and Liquids, Their Estimation and Correlation, McGraw-Hill, New York, 1958.
 1221. *Reynolds A. E. and De Vries T.*, J. Am. Chem. Soc., 72, 5443—5445 (1950).
 1222. *Ribaud G.*, Publ. Sci. Tech. Min. Air (France), No. 266, 169 pp. (1952).
 1223. *Rice F. O. and Greenberg J.*, J. Am. Chem. Soc., 56, 2268—2270 (1934).
 1224. *Richards R. E.*, J. Chem. Soc., 1931—1933 (1948).
 1225. *Richards W. T. and Wallace J. H., Jr.*, J. Am. Chem. Soc., 54, 2705—2713 (1932).
 1226. *Richardson J. W. and Parks G. S.*, J. Am. Chem. Soc., 61, 3543—3546 (1939).
 1227. *Rideal E. K.*, Proc. Roy. Soc. (London), Ser. A, 99, 153—162 (1921).
 1228. *Riedel L.*, Z. Ges. Kälte-Ind., 47, 87 (1940).
 1229. *Riedel L.*, Bull. Intern. Inst. Refrig., 22 (3), Annex No. C4, 1—3 (1941).
 1230. *Rinkenbach W. H.*, Ind. Eng. Chem., 18, 1195—1197 (1926).
 1231. *Rinkenbach W. H.*, J. Am. Chem. Soc., 52, 115—120 (1930).
 1232. *Risgin O. and Taylor R. C.*, Spectrochim. Acta, 15, 1036—1050 (1959).
 1233. *Ritter H. L. and Simons J. H.*, J. Am. Chem. Soc., 67, 757—762 (1945).
 1234. *Roberts D. E. and Jessup R. S.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 40, 281—283 (1948).
 1235. *Robinson G. W.*, J. Chem. Phys., 21, 1741—1745 (1953).
 1236. *Rockenjeller J. D. and Rossini F. D.*, J. Phys. Chem., 65, 267—272 (1961).
 1237. *Rosenthal E. and Dailey B. P.*, J. Chem. Phys., 43, 2093—2110 (1965).
 1238. *Rossini F. D.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 6, 1—35 (1931).
 1239. *Rossini F. D.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 6, 37—49 (1931).
 1240. *Rossini F. D.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 8, 119—139 (1932).
 1241. *Rossini F. D.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 12, 735—750 (1934).
 1242. *Rossini F. D.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 13, 189—202 (1934).
 1243. *Rossini F. D.*, Ind. Eng. Chem., 29, 1424—1430 (1937).
 1244. *Rossini F. D.*, J. Res. Natl. Bur. Std., 22, 407—414 (1939).
 1245. *Rossini F. D.*, Chemical Thermodynamics, Wiley, New York, 1950.
 1246. *Rossini F. D.*, Chemical Thermodynamics; Fractionating Processes; Hydrocarbons from Petroleum (Reilly Lectures, Vol. III, 1949), University of Notre Dame, Notre Dame, Ind. 1950.
 1247. *Rossini F. D.* (Ed.), Experimental Thermochemistry, Vol. I. Interscience Publishers, New York, 1956.
 1248. *Rossini F. D., Pitzer K. S., Arnett R. L., Braun R. M. and Pimentel G. C.*, Selected Values of Physical and Thermodynamic Properties of Hydrocarbons and Related Compounds, Carnegie Press, Pittsburgh, 1953.
 1249. *Rossini F. D., Wagman D. D., Evans W. H., Levine S. and Jaffe I.*, Selected Values of Chemical Thermodynamic Properties (National Bureau of Stan-

- dards Circular No. 500), U. S. Government Printing Office, Washington, D. C., 1952.
 250. *Rossini F. D. and co-workers*, Selected Values of Properties of Chemical Compounds, Manufacturing Chemists' Association Research Project, Semiannual, looseleaf.
 251. *Roth W. A.*, Ber., 77B, 535—537 (1944).
 252. *Roth W. A. and Isecke K.*, Ber., 77B, 537—539 (1944).
 253. *Roth W. A. and Müller F.*, Ber., 62B, 1188—1194 (1929).
 254. *Roth W. A. and Rist-Schumacher E.*, Z. Elektrochem., 50, 7—9 (1944).
 255. *Rothmund P. and Beyer H.*, Ann., 492, 292—299 (1932).
 256. *Rowlinson J. S.*, Nature, 162, 820—821 (1948).
 257. *Rowlinson J. S.*, Liquids and Liquid Mixtures, Butterworths, London, 1959.
 258. *Рожнов А. М., Андреевский Д. Н.*, ДАН СССР, 147, 388—391 (1962).
 259. *Рожнов А. М., Андреевский Д. Н.*, Нефтехимия, 4, 111—118 (1964).
 260. *Rubin T. R. and Giauque W. F.*, J. Am. Chem. Soc., 74, 800—804 (1952).
 261. *Rubin T. R., Levedahl B. H. and Yost D. M.*, J. Am. Chem. Soc., 66, 279—282 (1944).
 262. *Рудковский Д. М., Трифель А. Г., Фрост А. В.*, Укр. хім. ж., 10, 277—282 (1935).
 263. *Ruehrwein R. A. and Giauque W. F.*, J. Am. Chem. Soc., 61, 2940—2944 (1939).
 264. *Ruehrwein R. A. and Huffman H. M.*, J. Am. Chem. Soc., 65, 1620—1625 (1943).
 265. *Ruehrwein R. A. and Huffman H. M.*, J. Am. Chem. Soc., 68, 1759—1761 (1946).
 266. *Ruehrwein R. A. and Powell T. M.*, J. Am. Chem. Soc., 68, 1063—1066 (1946).
 267. *Ruff O. and Li S.-C.*, Z. Anorg. Allg. Chem., 242, 272—276 (1939).
 268. *Ruiter L. H.*, Rec. Trav. Chim., 74, 1467—1481 (1955).
 269. *Runge F. and Maass P.*, Chem. Tech. (Berlin), 5, 421—424 (1953).
 270. *Russell H., Jr., Golding D. R. V. and Yost D. M.*, J. Am. Chem. Soc., 66, 16—20 (1944).
 271. *Russel H., Jr., Osborne D. W. and Yost D. M.*, J. Am. Chem. Soc., 64, 165—169 (1942).
 272. *Ruzicka L. and Schläpfer P.*, Helv. Chim. Acta, 16, 162—168 (1933).
 273. *Sackur O.*, Ann. Phys., 36, 958—980 (1911); 40, 67—86 (1913).
 274. *Sage G. and Klemperer W.*, J. Chem. Phys., 39, 371—376 (1963).
 275. *Salley D. J. and Gray J. B.*, J. Am. Chem. Soc., 70, 2650—2653 (1948).
 276. *Sarachman T. N.*, J. Chem. Phys., 39, 469—473 (1963).
 277. *Sastry K. V. L. N. and Curl R. F., Jr.*, J. Chem. Phys., 41, 77—80 (1964).
 278. *Sathianandan K., Ramaswamy K. and Cleveland F. F.*, J. Mol. Spectrosc., 8, 470—474 (1962).
 279. *Saville G. and Gundry H. A.*, Trans. Faraday Soc., 55, 2036—2038 (1959).
 280. *Scheffer F. E. C. and Voogd M.*, Rec. Trav. Chim., 45, 214—223 (1926).
 281. *Scherer J. R. and Evans J. C.*, Spectrochim. Acta, 19, 1739—1775 (1963).
 282. *Schick H. L.*, Thermodynamics of Certain Refractory Compounds, Vol. 1, Academic Press, New York, 1966.
 283. *Schick H. L.*, Thermodynamics of Certain Refractory Compounds, Vol. 2, Academic Press, New York, 1966.
 284. *Schjånberg E.*, Dissertation, University of Lund., Sweden, 1934.
 285. *Schjånberg E.*, Z. Phys. Chem. (Leipzig), A172, 197—233 (1935).
 286. *Schjånberg E.*, Z. Phys. Chem. (Leipzig), A175, 342—346 (1936).
 287. *Schjånberg E.*, Z. Phys. Chem. (Leipzig), A178, 274—281 (1937).
 288. *Schjånberg E.*, Z. Phys. Chem. (Leipzig), A181, 430—440 (1938).
 289. *Von R. Schleyer P.* personal communication.
 290. *Schmid R. W., Kloster-Jensen E., Kovats E. and Heilbronner E.*, Helv. Chim. Acta, 39, 806—812 (1956).

1291. *Schottky W. and Wagner C.*, cited by Schottky W., H. Ulich and C. Wagner, *Thermodynamik*, Springer-Verlag, Berlin, 1929, p. 377.
1292. *Schrödinger E.*, *Statistical Thermodynamics*, 2nd Ed., Cambridge University Press, New York, 1952.
1293. *Schwab G.-M.*, *Handbuch der Katalyse*, Vol. IV, Springer-Verlag, Vienna, 1943.
1294. *Schwabe K.*, *Z. Elektrochem.*, **60**, 151—157 (1956).
1295. *Schwabe K. and Wagner W.*, *Z. Elektrochem.*, **65**, 812—814 (1961).
1296. *Schwendeman R. H. and Jacobs G. D.*, *J. Chem. Phys.*, **36**, 1245—1250 (1962).
1297. *Schwendeman R. H. and Tobiasson F. L.*, *J. Chem. Phys.*, **43**, 201—205 (1965).
1298. *Scott D. W. and Crowder G. A.*, *J. Chem. Phys.*, **46**, 1054—1062 (1967).
1299. *Scott D. W., Douslin D. R., Finke H. L., Hubbard W. N., Messerly J. F., Hossenlopp I. A. and McCullough J. P.*, *J. Phys. Chem.*, **66**, 1334—1341 (1962).
1300. *Scott D. W., Douslin D. R., Gross M. E., Oliver G. D. and Huffman H. M.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **74**, 883—887 (1952).
1301. *Scott D. W., Douslin D. R., Messerly J. F., Todd S. S., Hossenlopp I. A., Kincheloe T. C. and McCullough J. P.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **81**, 1015—1020 (1959).
1302. *Scott D. W., Finke H. L., Gross M. E., Guthrie G. B. and Huffman H. M.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **72**, 2424—2430 (1950).
1303. *Scott D. W., Finke H. L., Hubbard W. N., McCullough J. P., Gross M. E., Williamson K. D., Waddington G. and Huffman H. M.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **72**, 4664—4668 (1950).
1304. *Scott D. W., Finke H. L., Hubbard W. N., McCullough J. P., Katz C., Gross M. E., Messerly J. F., Pennington R. E. and Waddington G.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **75**, 2795—2800 (1953).
1305. *Scott D. W., Finke H. L., Hubbard W. N., McCullough J. P., Oliver G. D., Gross M. E., Katz C., Williamson K. D., Waddington G. and Huffman H. M.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **74**, 4656—4662 (1952).
1306. *Scott D. W., Finke H. L., McCullough J. P., Gross M. E., Messerly J. F., Pennington R. E. and Waddington G.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **77**, 4993—4998 (1955).
1307. *Scott D. W., Finke H. L., McCullough J. P., Gross M. E., Pennington R. E. and Waddington G.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **74**, 2478—2483 (1952).
1308. *Scott D. W., Finke H. L., McCullough J. P., Gross M. E., Williamson K. D., Waddington G., and Huffman H. M.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **73**, 261—265 (1951).
1309. *Scott D. W., Finke H. L., McCullough J. P., Messerly J. F., Pennington R. E., Hossenlopp I. A. and Waddington G.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **79**, 1062—1068 (1957).
1310. *Scott D. W., Good W. D., Guthrie G. B., Todd S. S., Hossenlopp I. A., Osborn A. G. and McCullough J. P.*, *J. Phys. Chem.*, **67**, 685—689 (1963).
1311. *Scott D. W., Good W. D., Todd S. S., Messerly J. F., Berg W. T., Hossenlopp I. A., Lacina J. L., Osborn A. and McCullough J. P.*, *J. Chem. Phys.*, **36**, 406—412 (1962).
1312. *Scott D. W., Gross M. E., Oliver G. D. and Huffman H. M.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **71**, 1634—1636 (1949).
1313. *Scott D. W., Guthrie G. B., McCullough J. P. and Waddington G.*, *J. Chem. Eng. Data*, **4**, 246—251 (1959).
1314. *Scott D. W., Guthrie G. B., Messerly J. F., Todd S. S., Berg W. T., Hossenlopp I. A. and McCullough J. P.*, *J. Phys. Chem.*, **66**, 911—914 (1962).
1315. *Scott D. W., Hubbard W. N., Messerly J. F., Todd S. S., Hossenlopp I. A., Good W. D., Douslin D. R. and McCullough J. P.*, *J. Phys. Chem.*, **67**, 680—685 (1963).

16. *Scott D. W. and McCullough J. P.*, U.S. Bur. Mines Bull., **595** (1961).
17. *Scott D. W. and McCullough J. P.*, U. S. Bur. Mines, Rept. Invest., **5930**, 27 pp. (1962).
18. *Scott D. W., McCullough J. P., Good W. D., Messerly J. F., Pennington R. E., Kincheloe T. C., Hossenlopp I. A., Douslin D. R. and Waddington G.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **78**, 5457—5463 (1956).
19. *Scott D. W., McCullough J. P., Hubbard W. N., Messerly J. F., Hossenlopp I. A., Frow F. R. and Waddington G.*, *J. Chem. Soc.*, **78**, 5463—5468 (1956).
20. *Scott D. W., McCullough J. P., Messerly J. F., Pennington R. E., Hossenlopp I. A., Finke H. L. and Waddington G.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **80**, 55—59 (1958).
21. *Scott D. W., Messerly J. F., Todd S. S., Hossenlopp I. A., Douslin D. R. and McCullough J. P.*, *J. Chem. Phys.*, **37**, 867—873 (1962).
22. *Scott D. W., Messerly J. F., Todd S. S., Hossenlopp I. A., Osborn A. and McCullough J. P.*, *J. Chem. Phys.*, **38**, 532—539 (1963).
23. *Scott D. W., Oliver G. D., Gross M. E., Hubbard W. N. and Huffman H. M.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **71**, 2293—2297 (1949).
24. *Scott D. W., Waddington G., Smith J. C. and Huffman H. M.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **71**, 2767—2773 (1949).
25. *Scott R. B. and Brickwedde F. G.*, *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **35**, 501—512 (1945).
26. *Scott R. B., Ferguson W. J. and Brickwedde F. G.*, *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **33**, 1—20 (1944).
27. *Scott R. B., Meyers C. H., Rands R. D., Jr., Brickwedde F. G. and Bekkedahl N.*, *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **35**, 39—85 (1945).
28. *Sears G. W. and Hopke E. R.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **71**, 1632—1634 (1949).
29. *Seha Z.*, *Chem. Listy*, **49**, 1569—1570 (1955).
30. *Sekino S. and Nishikawa T.*, *J. Phys. Soc. Japan*, **12**, 43—48 (1957).
31. *Sellers P. and Sunner S.*, *Acta Chem. Scand.*, **16**, 46—52 (1962).
32. *Semerano G. and Chisini A.*, *Gazz. Chim. Ital.*, **66**, 510—518 (1936).
33. *Серегун Е. А., Поповко Н. Н., Колесов В. И., Белоусова Н. А., Скрыпанов С. М., Плама А. Ф., ДАН СССР*, **159**, 1381—1384 (1964).
34. *Серегун Е. А., Колесов В. И., Белоусова Н. А., Скрыпанов С. М., Плама А. Ф., ДАН СССР*, **145**, 580—583 (1962).
35. *Serijan K. T. and Wise P. H.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **73**, 4766—4769 (1951).
36. *Serijan K. T. and Wise P. H.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **73**, 5191—5193 (1951).
37. *Serijan K. T. and Wise P. H.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **74**, 365—368 (1952).
38. *Serijan K. T., Wise P. H. and Gibbons L. C.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **71**, 2265—2266 (1949).
39. *Seyer W. F. and Mann C. W.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **67**, 328—329 (1945).
40. *Шукреев А. Н., Шукреева Л. А., ЖФХ*, **3**, 169—174 (1932).
41. *Sheppard N.*, *J. Chem. Phys.*, **17**, 79—83 (1949).
42. *Sheppard N.*, *Trans. Faraday Soc.*, **45**, 693—697 (1949).
43. *Sheppard N.*, *Trans. Faraday Soc.*, **46**, 527—533 (1950).
44. *Sheppard N.*, *Trans. Faraday Soc.*, **46**, 533—539 (1950).
45. *Shimanouchi T.*, *J. Chem. Soc. Japan*, **62**, 1264—1269 (1941).
46. *Shimoda K., Nishikawa T. and Itoh T.*, *J. Phys. Soc. Japan*, **9**, 974—991 (1954).
47. *Shirley D. A. and Giaque W. F.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **81**, 4778—4779 (1959).
48. *Signaigo F. K.* (to E. I. du Pont de Nemours & Co.), пат. США 2406410 (27 абрьца 1946).
49. *Silvestro G. and Lenchitz C.*, *J. Phys. Chem.*, **65**, 694—695 (1961).
50. *Simon F. E.*, *Kältetechnik*, **9**, 58—61, 95—100 (1957).
51. *Simonetta M.*, *Chim. Ind. (Milan)*, **29**, 37—39 (1947).
52. *Singh A. D. and Krase N. W.*, *Ind. Eng. Chem.*, **27**, 909—14 (1935).
53. *Sinke G. C.*, *J. Phys. Chem.*, **63**, 2063 (1959).

1354. *Sinke G. C.*, unpublished results, Dow Chemical Company.
 1355. *Sinke G. C.* and *De Vries T.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **75**, 1815—1818 (1953).
 1356. *Sinke G. C.* and *Hildenbrand D. L.*, *J. Chem. Eng. Data*, **7**, 74 (1962).
 1357. *Sinke G. C.*, *Hildenbrand D. L.*, *McDonald R. A.*, *Kramer W. R.* and *Stull D. R.*, *J. Phys. Chem.*, **62**, 1461—1462 (1958).
 1358. *Sinke G. C.* and *Oetting F. L.*, *J. Phys. Chem.*, **68**, 1354—1358 (1964).
 1359. *Sinke G. C.* and *Stull D. R.*, *J. Phys. Chem.*, **62**, 397—401 (1958).
 1360. *Sinnott K. M.*, *J. Chem. Phys.*, **34**, 851—861 (1961).
 1361. *Skinner H. A.*, *J. Chem. Soc.*, 4396—4408 (1962).
 1362. *Skinner H. A.*, Ed., *Experimental Thermochemistry*, Vol. II. Interscience Publishers, New York, 1962.
 1363. *Skinner H. A.* and *Pilcher G.*, *Quart. Rev. (London)*, **17**, 264—288 (1963).
 1364. *Skinner H. A.* and *Snelson A.*, *Trans. Faraday Soc.*, **55**, 404—407 (1959).
 1365. *Skinner H. A.* and *Snelson A.*, *Trans. Faraday Soc.*, **56**, 1776—1783 (1960).
 1366. *Skita A.* and *Faust W.*, *Ber.*, **64B**, 2878—2892 (1931).
 1367. *Skita A.* and *Faust W.*, *Ber.*, **72B**, 1127—1138 (1939).
 1368. *Skita A.* and *Rössler R.*, *Ber.*, **72B**, 265—272 (1939).
 1369. *Skupinski A.*, *Intern. Chem. Eng.*, **5**, 323—330 (1965).
 1370. *Скупанов С. М.*, *Козина М. П.*, *ДАН СССР*, **122**, 109—110 (1958).
 1371. *Скупанов С. М.*, *Шмелев С. М.*, *Хим. наука и пром.*, **3**, 688 (1958).
 1372. *Slabey V. A.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **74**, 4930—4932 (1952).
 1373. *Slabey V. A.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **74**, 4963—4964 (1952).
 1374. *Slabey V. A.* and *Wise P. H.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **74**, 1473—1476 (1952).
 1375. *Slabey V. A.* and *Wise P. H.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **74**, 3887—3889 (1952).
 1376. *Smith D. C.*, *Brown G. M.*, *Nielsen J. R.*, *Smith R. M.* and *Liang C. Y.*, *J. Chem. Phys.*, **20**, 473—486 (1952).
 1377. *Smith D. C.*, *Ferguson E. E.*, *Hudson R. L.* and *Nielsen J. R.*, *J. Chem. Phys.*, **21**, 1475—1479 (1953).
 1378. *Smith D. C.*, *Nielsen J. R.* and *Claassen H. H.*, *J. Chem. Phys.*, **18**, 326—331 (1950).
 1379. *Smith D. C.*, *Pan C. Y.* and *Nielsen J. R.*, *J. Chem. Phys.*, **18**, 706—712 (1950).
 1380. *Smith D. C.*, *Saunders R. A.*, *Nielsen J. R.* and *Ferguson E. E.*, *J. Chem. Phys.*, **20**, 847—859 (1952).
 1381. *Smith J. M.*, *Trans. Am. Inst. Chem. Eng.*, **42**, 983—988 (1946).
 1382. *Smith L.*, *Acta Chem. Scand.*, **10**, 884—886 (1956).
 1383. *Smith L.* and *Bjellerup L.*, *Acta Chem. Scand.*, **1**, 566—570 (1947).
 1384. *Smith L.*, *Bjellerup L.*, *Krook S.* and *Westermarck H.*, *Acta Chem. Scand.*, **7**, 65—83 (1953).
 1385. *Smith L.* and *Sunner S.*, «Verbrennungen von Chlor- und Bromhaltigen Substanzen in Beweglicher Bombe», in *A. Tiselius* and *K. O. Pedersen* (Eds.), *The Svedberg, Almquist and Wiksells, Uppsala, Sweden*, pp. 352—369 (1944).
 1386. *Smith N. K.*, *Gorin G.*, *Good W. D.* and *McCullough J. P.*, *J. Phys. Chem.*, **68**, 940—946 (1964).
 1387. *Smith N. K.*, *Scott D. W.* and *McCullough J. P.*, *J. Phys. Chem.*, **68**, 934—939 (1964).
 1388. *Smith R. H.* and *Andrews D. H.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **53**, 3644—3660 (1931).
 1389. *Smith W. L.* and *Mills I. M.*, *J. Mol. Spectrosc.*, **11**, 11—38 (1963).
 1390. *Smutny E. J.* and *Bondi A.*, *J. Phys. Chem.*, **65**, 546—550 (1961).
 1391. *Snelson A.* and *Skinner H. A.*, *Trans. Faraday Soc.*, **57**, 2125—2131 (1961).
 1392. *Solimene N.* and *Dailey B. P.*, *J. Chem. Phys.*, **22**, 2042—2044 (1954).
 1393. *Solimene N.* and *Dailey B. P.*, *J. Chem. Phys.*, **23**, 124—129 (1955).
 1394. *Somayajulu G. R.*, *J. Chem. Phys.*, **34**, 1449—1450 (1961); *Univ. Calif. Rad. Lab. Rept. No. 9590* (1961).
 1395. *Somayajulu G. R.*, *Kudchadker A. P.* and *Zwolinski B. J.*, *Ann. Rev. Phys. Chem.*, **16**, 213—244 (1965).

96. *Souders M., Jr.*, *Matthews C. S.* and *Hurd C. O.*, *Ind. Eng. Chem.*, **41**, 1037—1048 (1949).
 97. *Souders M., Jr.*, *Matthews C. S.* and *Hurd C. O.*, *Ind. Eng. Chem.*, **41**, 1048—1056 (1949).
 98. *Southard J. C.* and *Brickwedde F. G.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **55**, 4378—4384 (1933).
 99. *Southard J. C.*, *Milner R. T.* and *Hendricks S. B.*, *J. Chem. Phys.*, **1**, 95—102 (1933).
 100. *Spaght M. E.*, *Thomas S. B.*, *Parks G. S.*, *J. Phys. Chem.*, **36**, 882—888 (1932).
 101. *Speros D. M.* and *Rossini F. D.*, *J. Phys. Chem.*, **64**, 1723—1727 (1960).
 102. *Springall H. D.* and *White T. R.*, *Research*, **2**, 296 (1949).
 103. *Springall H. D.* and *White T. R.*, *J. Chem. Soc.*, 2764—2766 (1954).
 104. *Stamm R. F.*, *Halverson F.* and *Whalen J. J.*, *J. Chem. Phys.*, **17**, 104—105 (1949).
 105. *Stammreich H.* and *Forneris R.*, *Spectrochim. Acta*, **8**, 52—53 (1956).
 106. *Stathis E. C.* and *Egerton A. C.*, *Trans. Faraday Soc.*, **36**, 606 (1940).
 107. *Staveley L. A. K.*, *Tupman W. I.* and *Hart K. R.*, *Trans. Faraday Soc.*, **51**, 323—343 (1955).
 108. *Staveley L. A. K.*, *Warren J. B.*, *Paget H. P.* and *Dowrick D. J.*, *J. Chem. Soc.*, 1992—2001 (1954).
 109. *Steele D.* and *Whiffen D. H.*, *Trans. Faraday Soc.*, **55**, 369—376 (1959).
 110. *Steiner L. E.*, *Introduction to Chemical Thermodynamics*, 2nd Ed., McGraw-Hill, New York, 1948.
 111. *Stephenson C. C.* and *Berets D. J.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **74**, 882—883 (1952).
 112. *Stephenson C. V.* and *Jones E. A.*, *J. Chem. Phys.*, **20**, 135—136 (1952).
 113. *Stern A.* and *Klebs G.*, *Ann.*, **500**, 91—108 (1932).
 114. *Stern A.* and *Klebs G.*, *Ann.*, **504**, 287—297 (1933).
 115. *Stern A.* and *Klebs G.*, *Ann.*, **505**, 295—306 (1933).
 116. *Stern J. H.* and *Dorer F. H.*, *J. Phys. Chem.*, **66**, 97—99 (1962).
 117. *Steunenberg R. K.* and *Vogel R. C.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **78**, 901—902 (1956).
 118. *Stevenson D. P.*, *J. Chem. Phys.*, **7**, 171—174 (1939).
 119. *Stevenson D. P.* and *Beach J. Y.*, *J. Chem. Phys.*, **6**, 25—29, 108—110, 341 (1938).
 120. *Stewart J. E.*, *J. Chem. Phys.*, **30**, 1259—1265 (1959).
 121. *Stiehler R. D.* and *Huffman H. M.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **57**, 1734—1740 (1935).
 122. *Stiehler R. D.* and *Huffman H. M.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **57**, 1741—1743 (1935).
 123. *Stimson H. F.*, *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **42**, 209—217 (1949).
 124. *Stimson H. F.*, *Am. J. Phys.*, **23**, 614—622 (1955).
 125. *Stitt F.*, *J. Chem. Phys.*, **7**, 1115 (1939).
 126. *Stojiljkovic A.* and *Whiffen D. H.*, *Spectrochim. Acta*, **12**, 47—56 (1958).
 127. *Stout J. W.*, «Isothermal Low-Temperature Calorimetry», in *J. P. McCullough* and *D. W. Scott* (Eds.), *Experimental Thermodynamics*, Vol. I, Butterworths, London, 1966, Chap. 5.
 128. *Stout J. W.* and *Fisher L. H.*, *J. Chem. Phys.*, **9**, 163—168 (1941).
 129. *Stow F. S., Jr.*, and *Elliott J. H.*, *Anal. Chem.*, **20**, 250—253 (1948).
 130. *Stroh H. H.* and *Fincke C. R.*, *Z. Chem.*, **3**, 265—266 (1963).
 131. *Stull D. R.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **59**, 2726—2733 (1937).
 132. *Stull D. R.*, *Ind. Eng. Chem.*, **39**, 517—550 (1947).
 133. *Stull D. R.*, in *R. H. Boundy* and *R. F. Boyer* (Eds.), *Styrene: Its Polymers, Copolymers and Derivatives* Reinhold, New York, 1952, Chap. 3.
 134. *Stull D. R.*, «Thermodynamic Aspects», in *G. A. Olah* (Ed.), *Friedel-Crafts and Related Reactions*, Vol. I. Interscience Publishers, New York, 1963, pp. 937—997, Chap. 12.

1435. *Stull D. R., Carr I., Chao J., Dergazarian T. E., du Plessis L. A., Jostad, R. E., Levine S., Oetting F. L., Petrella R. V., Prophet H. and Sinke G. C.*, JANAF Thermochemical Tables. Clearinghouse for Federal Scientific and Technical Information, Springfield, Va. 1966.
1436. *Stull D. R. and Mayfield F. D.*, Ind. Eng. Chem., **35**, 639—645 (1943).
1437. *Stull D. R. and Sinke G. C.*, Thermodynamic Properties of the Elements (Advances in Chemistry Series No. 18), American Chemical Society, Washington, D.C., 1956.
1438. *Stull D. R., Sinke G. C., McDonald R. A., Hatton W. E. and Hildenbrand D. L.*, Pure Appl. Chem., **2**, 315—322 (1961).
1439. *Suito E. and Aida H.*, J. Chem. Soc. Japan, Ind. Chem. Sect., **54**, 765—768 (1951).
1440. *Sullivan M. V. and Hunt H.*, J. Phys. Colloid Chem., **53**, 497—500 (1949).
1441. *Sunner S.*, Svensk Kem. Tidskr., **58**, 71—81 (1946).
1442. *Sunner S.*, Thesis University of Lund, Sweden, 1949.
1443. *Sunner S.*, Acta Chem. Scand., **9**, 837—846 (1955).
1444. *Sunner S.*, Acta Chem. Scand., **9**, 847—854 (1955).
1445. *Sunner S.*, Acta Chem. Scand., **11**, 1757—1760 (1957).
1446. *Sunner S.*, Acta Chem. Scand., **11**, 1766—1770 (1957).
1447. *Sunner S.*, Acta Chem. Scand., **17**, 728—730 (1963).
1448. *Sutherland G. B. B. M.*, Proc. Indian Acad. Sci., Sect. A., **8**, 341—344 (1938).
1449. *Sutton L. E.* (Ed.), Interatomic Distances (Special Publication No. 11), Chemical Society, London, 1958.
1450. *Suzuki K., Onishi S., Koide T. and Seki S.*, Bull. Chem. Soc. Japan, **29**, 127—131 (1956).
1451. *Свердлов А. С.*, ЖФХ, **28**, 780—784 (1954).
1452. *Свердлов А. С.*, ЖФХ, **32**, 659—665 (1958).
1453. *Свердлов А. С., Годнев И. Н.*, ЖФХ, **27**, 1580—1585 (1953).
1454. *Swain H. A., Jr., Silbert L. S. and Miller J. G.*, J. Am. Chem. Soc., **86**, 2562—2566 (1964).
1455. *Swalen J. D.*, J. Chem. Phys., **23**, 1739—1740 (1955).
1456. *Swalen J. D. and Costain C. C.*, J. Chem. Phys., **31**, 1562—1574 (1959).
1457. *Swalen J. D. and Herschbach D. R.*, J. Chem. Phys., **27**, 100—108 (1957).
1458. *Swarts F.*, J. Chim. Phys., **17**, 3—70 (1919).
1459. *Swick D. A. and Karle I. L.*, J. Chem. Phys., **23**, 1499—1504 (1955).
1460. *Swick D. A., Karle I. L. and Karle J.*, J. Chem. Phys., **22**, 1242—1245 (1954).
1461. *Swietoslawski W. and Bobinska J.*, Bull. Intern. Acad. Polon. [A], 621—630 (1929).
1462. *Szwarc M.*, Discussions Faraday Soc., **10**, 336—338 (1951).
1463. *Tabor W. J.*, J. Chem. Phys., **27**, 974—975 (1957).
1464. *Taft R. W., Jr., and Riesz P.*, J. Am. Chem. Soc., **77**, 902—904 (1955).
1465. *Tanaka T. and Watase T.*, Technol. Rept. Osaka Univ., **6**, 367—371 (1956).
1466. *Tannenbaum E., Johnson R. D., Myers R. J. and Gwinn W. D.*, J. Chem. Phys., **22**, 949 (1954).
1467. *Tarpi G.*, Gazz. Chim. Ital., **70**, 414—422 (1940).
1468. *Татевский В. М., Бендерский В. А., Яровой С. С.*, Закономерности и методы расчета физико-химических свойств парафиновых углеводородов, Госполтехиздат, 1960.
1469. *Татевский В. М., Фрост А. В.*, Вестник МГУ, № 3, 65—83 (1947).
1470. *Татевский В. М., Панулов Ю. Г.*, ЖФХ, **34**, 115—123, 231—238, 335—338 (1960); **36**, 93—100 (1962).
1471. *Tavernier P. and Lamouroux M.*, Mem. Poudres, **37**, 197—206 (1955).
1472. *Tavernier P. and Lamouroux M.*, Mem. Poudres, **38**, 65—88 (1956).
1473. *Taylor A. H., Jr. and Crist R. H.*, J. Am. Chem. Soc., **63**, 1377—1385 (1941).
1474. *Taylor J. and Hall C. R. L.*, J. Phys. Colloid Chem., **51**, 593—611 (1947).

1475. *Taylor R. D., Johnson B. H. and Kilpatrick J. E.*, J. Chem. Phys., **23**, 1225—1231 (1955).
1476. *Taylor R. D. and Kilpatrick J. E.*, J. Chem. Phys., **23**, 1232—1235 (1955).
1477. *Taylor W. J., Wagman D. D., Williams M. G., Pitzer K. S. and Rossini F. D.*, J. Res. Natl. Bur. Std., **37**, 95—122 (1946).
1478. *Teranishi H. and Benson S. W.*, J. Am. Chem. Soc., **85**, 2890—2892 (1963).
1479. *Terres E. and Wesemann H.*, Angew. Chem., **45**, 795—802 (1932).
1480. *Tetrode H.*, Ann. Phys., **38**, 434—442 (1912).
1481. *Theimer R. and Nielsen J. R.*, J. Chem. Phys., **27**, 264—268 (1957).
1482. *Theimer R. and Nielsen J. R.*, J. Chem. Phys., **27**, 887—890 (1957).
1483. *Theimer R. and Nielsen J. R.*, J. Chem. Phys., **30**, 98—102 (1959).
1484. *Thomas L. F., Heeks J. S. and Sheridan J.*, Z. Elektrochem., **61**, 935—937 (1957).
1485. *Thomas L. F., Sherrard E. I. and Sheridan J.*, Trans. Faraday Soc., **51**, 619—625 (1955).
1486. *Thomas W. J. and Portalski S.*, Ind. Eng. Chem., **50**, 967—970 (1958).
1487. *Thompson H. W.*, Trans. Faraday Soc., **37**, 251—260 (1941).
1488. *Thompson H. W.*, Trans. Faraday Soc., **37**, 344—352 (1941).
1489. *Thompson H. W. and Cave W. T.*, Trans. Faraday Soc., **47**, 951—957 (1951).
1490. *Thompson H. W. and Dainton F. S.*, Trans. Faraday Soc., **33**, 1546—1555 (1937).
1491. *Thompson H. W. and Miller C. H.*, Trans. Faraday Soc., **46**, 22—27 (1950).
1492. *Thompson H. W. and Skerrett N. P.*, Trans. Faraday Soc., **36**, 812—817 (1940).
1493. *Thompson H. W. and Temple R. B.*, J. Chem. Soc., 1428—1432 (1948).
1494. *Thompson H. W. and Torkington P.*, Proc. Roy. Soc. (London), Ser. A, **21**—41 (1945).
1495. *Thomsen J.*, Thermochemische Untersuchungen, Barth, Leipzig, 1882—1886; Thermochemistry (Translated by K. A. Burke), Longmans, Green, London, 1908.
1496. *Thomson G. W.*, Chem. Rev., **38**, 1—39 (1946).
1497. *Thorne H. M., Murphy W. I. R., Ball J. S., Stanfield K. E. and Horne J. W.*, Ind. Eng. Chem., **43**, 20—27 (1951).
1498. *Thornton C. G.*, Univ. Microfilms Publ. No. 7746, 78 pp.; Dissertation Abstr., **14**, 604 (1954).
1499. *Timmermans J.*, Bull. Soc. Chim. Belges, **43**, 626—638 (1934).
1500. *Timmermans J.*, Bull. Soc. Chim. Belges, **44**, 17—40 (1935).
1501. *Timmermans J.*, Physico-Chemical Constants of Pure Organic Compounds, Elsevier, New York, 1950.
1502. *Timmermans J.*, Bull. Soc. Chim. Belges, **61**, 393—402 (1952).
1503. *Timmermans J.*, Les Constantes Physiques des Composés Organiques Cristallisés, Masson, Paris, 1953, p. 478.
1504. *Timmermans J. and Delcourt Y.*, J. Chim. Phys., **31**, 85—124 (1934).
1505. *Timmermans J. and Roland H.-R.*, J. Chim. Phys., **52**, 223—245 (1955).
1506. *Tjebbes J.*, Pure Appl. Chem., **2**, 129—132 (1961).
1507. *Tjebbes J.*, Acta Chem. Scand., **16**, 916—921 (1962).
1508. *Tjebbes J.*, Acta Chem. Scand., **16**, 953—957 (1962).
1509. *Tobin M. C.*, J. Am. Chem. Soc., **75**, 1788—1790 (1953).
1510. *Tobin M. C.*, Spectrochim. Acta, **16**, 1108—1110 (1960).
1511. *Todd S. S., Oliver G. D. and Huffman H. M.*, J. Am. Chem. Soc., **69**, 1519—1525 (1947).
1512. *Todd S. S. and Parks G. S.*, J. Am. Chem. Soc., **58**, 134—137 (1936).
1513. *Tolman R. C.*, The Principles of Statistical Thermodynamics, Oxford University Press, New York, 1938.
1514. *Tong L. K. J. and Kenyon W. O.*, J. Am. Chem. Soc., **69**, 2245—2246 (1947).
1515. *Toops E. E.*, J. Phys. Chem., **60**, 304—306 (1956).
1516. *Torkington P.*, Trans. Faraday Soc., **46**, 894—900 (1950).

1517. Trotter I. F. and Thompson H. W., J. Chem. Soc., 481—488 (1946).
 1518. Trouton F., Phil. Mag. [5], 18, 54—57 (1884).
 1519. Trowbridge J. C. and Westrum E. F., Jr., J. Phys. Chem., 67, 2381—2385 (1963).
 1520. Tschuikow-Roux E., J. Phys. Chem., 66, 1636—1639 (1962).
 1521. Tschuikow-Roux E., J. Phys. Chem., 69, 1075—1077 (1965).
 1522. Turner R. B. and Garner R. H., J. Am. Chem. Soc., 79, 253 (1957).
 1523. Turner T. E., Flora V. C. and Kendrick W. M., J. Chem. Phys., 23, 1966 (1955).
 1524. Ueberreiter K. and Orthmann H. J., Z. Naturforsch., 5a, 101—108 (1950).
 1525. Ukaji T. and Bonham R. A., J. Am. Chem. Soc., 84, 3627—3630 (1962).
 1526. Valentine R. H., Brodale G. E. and Giauque W. F., J. Phys. Chem., 66, 392—395 (1962).
 1527. Vanderkooi W. N. and De Vries T., J. Phys. Chem., 60, 636—639 (1956).
 1528. Van Krevelen D. W. and Chermin H. A. G., Ingenieur (Holland) 62, Ch65—74 (1950).
 1529. Vaughn J. D. and Muetterties E. L., J. Phys. Chem., 64, 1787—1788 (1960).
 1530. Веденев В. И., цит. по кн.: Семенов П. И., О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности, Изд. АН СССР, М., 1958.
 1531. Venkateswaran S., Indian J. Phys., 5, 219—236 (1930).
 1532. Venkateswaran S., Nature, 126, 434 (1930).
 1533. Venkateswarlu P., Baker J. G. and Gordy W., J. Mol. Spectrosc., 6, 215—228 (1961).
 1534. Verkade P. E., J. Chim. Phys., 29, 297—301 (1932).
 1535. Verkade P. E. and Coops J., Jr., Rec. Trav. Chim., 52, 747—767 (1933).
 1536. Verkade P. E., Coops J., Jr., Maan C. J., and Verkade-Sandbergen A., Ann., 467, 217—239 (1928).
 1537. Verkade P. E., Coops J., Jr., Verkade-Sandbergen A. and Maan C. J., Ann., 477, 279—297 (1930).
 1538. Verkade P. E. and Hartman H., Rec. Trav. Chim., 52, 945—968 (1933).
 1539. Verma R. D., J. Chem. Phys., 32, 738—749 (1960).
 1540. Voeltz F. L., Cleveland F. F., Meister A. G. and Bernstein R. B., J. Opt. Soc. Am., 43, 1061—1064 (1953).
 1541. Воеводский В. В., ДАН СССР, 79, 455—458 (1951).
 1542. Vogel A. I. and Cowan D. M., J. Chem. Soc., 16—24 (1943).
 1543. Vogel-Högler R., Acta Phys. Aust., 1, 311—322 (1948).
 1544. Vohra S. P. and Kobe K. A., J. Chem. Eng. Data, 4, 329—330 (1959).
 1545. Vold R. D., J. Am. Chem. Soc., 57, 1192—1195 (1935).
 1546. Воробьев А. Ф., Сурянов С. М. ЖХХ, 5, 679—681 (1960).
 1547. Vriens G. N. and Hill A. G., Ind. Eng. Chem., 44, 2732—2735 (1952).
 1548. Waddington G., Knowlton J. W., Scott D. W., Oliver G. D., Todd S. S., Hubbard W. N., Smith J. C. and Huffman H. M., J. Am. Chem. Soc., 71, 797—808 (1949).
 1549. Waddington G. and Skinner H. A., Thermochem.) Bull. (March 1955).
 1550. Waddington G., Smith J. C., Williamson K. D. and Scott D. W., J. Phys. Chem., 66, 1074—1077 (1962).
 1551. Waddington G., Sunner S. and Hubbard W. N., in F. D. Rossini (Ed.), Experimental Thermochemistry. Vol. I, Interscience Publishers, New York, 1956, Chap. 7.
 1552. Waddington G., Todd S. S. and Huffman H. M., J. Am. Chem. Soc., 69, 22—30 (1947).
 1553. Wadsö A. M. and Wadsö I., private communication, October 31, 1961.
 1554. Wadsö I., Acta Chem. Scand., 11, 1745—1751 (1957).
 1555. Wadsö I., Acta Chem. Scand., 12, 630—634 (1958).
 1556. Wadsö I., Acta Chem. Scand., 14, 561—565 (1960).
 1557. Wadsö, Acta Chem. Scand., 14, 903—908 (1960).
 1558. Wadsö, Acta Chem. Scand., 16, 471—478 (1962).

1559. Wagman D. D. and Evans W. H., Tables of Selected Values of Chemical Thermodynamic Properties, Series III, U. S. National Bureau of Standards, Washington, D. C., 1947—1956, looseleaf.
 1560. Wagman D. D., Evans W. H., Halow I., Parker V. B., Bailey S. M. and Schumm R. H., «Selected Values of Chemical Thermodynamic Properties, Part I. Tables for the First Twenty-Three Elements in the Standard Order of Arrangements», Natl. Bur. Std. Tech. Note No. 270-1, 1965.
 1561. Wagman D. D., Evans W. H., Halow I., Parker V. B., Bailey S. M. and Schumm R. H., «Selected Values of Chemical Thermodynamic Properties, Part 2. Tables for the Elements Twenty-Three Through Thirty-Two in the Standard Order of Arrangements», Natl. Bur. Std. Tech. Note No. 270-2, 1966.
 1562. Wagman D. D., Kilpatrick J. E., Taylor W. J., Pitzer K. S. and Rossini F. D., J. Res. Natl. Bur. Std., 34, 143—161 (1945).
 1563. Wagner J., Z. Phys. Chem. (Leipzig), B40, 36—50 (1938).
 1564. Wagner J., Z. Phys. Chem. (Leipzig), B40, 439—449 (1938).
 1565. Wagner R. S. and Dailey B. P., J. Chem. Phys., 26, 1588—1593 (1957).
 1566. Wagner R. S., Dailey B. P. and Solimene N., J. Chem. Phys., 26, 1593—1596 (1957).
 1567. Walker B. E., Jr., Brooks M. S., Ewing C. T. and Miller R. R., Chem. Eng. Data Ser., 3, 280—282 (1958).
 1568. Walker L. C., «NF₃ Calorimetry: The Enthalpy of Reaction of Cyanogen and Nitrogen Trifluoride, «Presented at the 22nd Calorimetry Conference, Thousand Oaks, Calif., 1967.
 1569. Walsh P. N. and Smith N. O., J. Chem. Eng. Data, 6, 33—35 (1961).
 1570. Walsh R., Golden D. M. and Benson S. W., J. Am. Chem. Soc., 88, 650—656 (1966).
 1571. Waring W., Chem. Rev., 51, 171—183 (1952).
 1572. von Wartenberg H., Z. Anorg. Chem., 258, 356—360 (1949).
 1573. von Wartenberg H. and Lerner-Steinberg B., Z. Angew. Chem., 38, 591—592 (1925).
 1574. von Wartenberg H. and Schiefer J., Z. Anorg. Allg. Chem., 278, 326—332 (1955).
 1575. von Wartenberg H. and Schütte R., Z. Anorg. Allg. Chem., 211, 222—226 (1933).
 1576. von Wartenberg H. and Schütza H., Z. Phys. Chem. (Leipzig), A164, 386—388 (1933).
 1577. Washburn E. W. (Ed.-in-Chief), International Critical Tables of Numerical Data, Physics, Chemistry and Technology, Vol. V, McGraw-Hill, New York, 1929.
 1578. Washburn E. W., J. Res. Natl. Bur. Std., 10, 525—558 (1933).
 1579. Wasserman A., Z. Phys. Chem. (Leipzig), A151, 113—128 (1930).
 1580. Wassermann A., J. Chem. Soc., 828—839 (1935).
 1581. Webb G. A. and Corson B. B., Ind. Eng. Chem., 39, 1153—1156 (1947).
 1582. Weber A., Meister A. G. and Cleveland F. F., J. Chem. Phys., 21, 930—933 (1953).
 1583. Weber L. A. and Kilpatrick J. E., J. Chem. Phys., 36, 829—834 (1962).
 1584. Weissman H. B., Bernstein R. B., Rosser S. E., Meister A. G. and Cleveland F. F., J. Chem. Phys., 23, 544—551 (1955).
 1585. Weissman H. B., Meister A. G. and Cleveland F. F., J. Chem. Phys., 29, 72—77 (1958).
 1586. Weltner W., Jr., J. Am. Chem. Soc., 77, 3941—3950 (1955).
 1587. Weltner W., Jr. private communication, March 15, 1955.
 1588. Weltner W., Jr., and Pitzer K. S., J. Am. Chem. Soc., 73, 2606—2610 (1951).
 1589. Wenker H., J. Am. Chem. Soc., 57, 2328 (1935).
 1590. West E. D., J. Am. Chem. Soc., 81, 29—37 (1959).
 1591. West E. D. and Ginnings D. C., J. Res. Natl. Bur. Std., 60, 309—316 (1958).

1592. West E. D. and Westrum E. F., Jr., «Adiabatic Calorimetry from 300 to 800° K», in McCullough J. P. and D. W. Scott (Eds.), *Experimental Thermodynamics*, Butterworths, London, 1968, Chap. 8.
1593. Westrum E. F., Jr., *J. Phys. Chem. Solids.*, **18**, 83—85 (1961).
1594. Westrum E. F., Jr., *J. Chem. Educ.*, **39**, 443—454 (1962).
1595. Westrum E. F., Jr., unpublished data.
1596. Westrum E. F., Jr. and Chang E., *Colloq. Intern. Centre Natl. Rech. Sci. (Paris)*, **156**, 163—173 (1967).
1597. Westrum E. F., Jr., Furukawa G. T. and McCullough J. P., «Adiabatic Low-Temperature Calorimetry», in J. P. McCullough and D. W. Scott (Eds.), *Experimental Thermodynamics*, Butterworths, London, 1968, Chap. 4.
1598. Уэструм Э., Мак-Каллаф Дж., Термодинамика кристаллов, в кн. Физика и химия твердого состояния органических соединений, т. I, изд. «Мир», М., 1967, стр. 8—160.
1599. Westrum E. F., Jr. and Trowbridge J. C., to be published.
1600. Westrum E. F., Jr., Wong W.-K. and Wong S.-W., «Strain Energies and Thermal Properties Through Fusion for Polynuclear Aromatic Hydrocarbons», Presented at the American Chemical Society Meeting, Miami Beach, April, 1967.
1601. Wheeler W. H., Whittaker H. and Pike H. H. M., *J. Inst. Fuel.*, **20**, 137—156, 159 (1947).
1602. Wheland G. W., *Resonance in Organic Chemistry*, Wiley, New York, 1955.
1603. Whiffen D. H., *J. Chem. Soc.*, 1350—1356 (1956).
1604. White A. G., *J. Chem. Soc.*, **121**, 1244—1270 (1922).
1605. White W. B., Johnson S. M. and Dantzig G. B., *J. Chem. Phys.*, **28**, 751—755 (1958).
1606. Whytlaw-Gray R., Reeves C. G. and Bottomley G. A. *Nature*, **181**, 1004 (1958).
1607. Wiberg K. B. and Bartley W. J., *J. Am. Chem. Soc.*, **82**, 6375—6380 (1960).
1608. Wiberg K. B., Bartley W. J. and Lossing F. P., *J. Am. Chem. Soc.*, **84**, 3980—3984 (1962).
1609. Wichers E., *J. Am. Chem. Soc.*, **80**, 4121—4124 (1958).
1610. Wieland H., Heymann K., Tsatsas T., Juchum D., Vavoglis G., Labriola G., Dobbelaitein O. and Boyd-Barrett H. S., *Ann.*, **514**, 145—181 (1934).
1611. Wilhoit R. C. and Lei I., *J. Chem. Eng. Data*, **10**, 166—168 (1965).
1612. Wilhoit R. C. and Shiao D., *J. Chem. Eng. Data*, **9**, 595—599 (1964).
1613. Wilks J., *The Third Law of Thermodynamics*, Oxford University Press, London, 1961.
1614. Williams G. C., *Ind. Eng. Chem.*, **40**, 340—341 (1948).
1615. Williams J. Q. and Gordy W., *J. Chem. Phys.*, **18**, 994—995 (1950).
1616. Williams M. M., McEwan W. S. and Henry R. A., *J. Phys. Chem.*, **61**, 261—267 (1957).
1617. Williamson K. D. and Harrison R. H., *J. Chem. Phys.*, **26**, 1409—1414 (1957).
1618. Willis J. B., *Trans. Faraday Soc.*, **43**, 97—102 (1947).
1619. Wilson A. H., *Thermodynamics and Statistical Mechanics*, Cambridge University Press, London, 1957.
1620. Wilson E. B., Jr., *Chem. Rev.*, **27**, 17—38 (1940).
1621. Wilson T. P., Cafilisch E. G. and Hurley G. F., *J. Phys. Chem.*, **62**, 1059—1061 (1958).
1622. Wirth H. E., Droege J. W. and Wood J. H., *J. Phys. Chem.*, **60**, 917—919 (1956).
1623. Witschonke C. R., *Anal. Chem.*, **26**, 562—564 (1954).
1624. Wong W.-K., *Doctoral Dissertation*, University of Michigan, Ann Arbor, June 1966.
1625. Wood J. L., Lagow R. J. and Margrave J. L., *J. Chem. Eng. Data*, **12**, 255—256 (1967).

1626. Wood R. E. and Stevenson D. P., *J. Am. Chem. Soc.*, **63**, 1650—1653 (1941).
1627. Wood W. W. and Shomaker V., *J. Chem. Phys.*, **20**, 555—560 (1952).
1628. Woodman A. L., Murbach W. J. and Kaufman M. H., *J. Phys. Chem.*, **64**, 658—660 (1960).
1629. Woolley H. W., *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **40**, 163—168 (1948).
1630. Woolley H. W., Scott R. B. and Brickwedde F. G., *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **41**, 379—475 (1948).
1631. Wu E. L., Zerbi G., Califano S. and Crawford B., Jr., *J. Chem. Phys.*, **35**, 2060—2064 (1961).
1632. Wulff C. A., *J. Chem. Phys.*, **39**, 1227—1234 (1963).
1633. Wulff C. A. and Westrum E. F., Jr., *J. Phys. Chem.*, **67**, 2376—2384 (1963).
1634. Wurmser R. and Mayer-Reich N., *Compt. Rend.*, **196**, 612—614 (1933).
1635. Wyss H.-R. and Günthard H. H., *Helv. Chim. Acta*, **44**, 625—631 (1961).
1636. Yamada S., *Bull. Chem. Soc. Japan*, **16**, 187—196 (1941).
1637. Yamaha M., *Bull. Chem. Soc. Japan*, **27**, 170—177 (1954).
1638. Yost D. M., Osborne D. W. and Garner C. S., *J. Am. Chem. Soc.*, **63**, 3492—3496 (1941).
1639. Yost D. M. and Stone W. E., *J. Am. Chem. Soc.*, **55**, 1889—1895 (1933).
1640. Young J. A., Keith J. E., Stehle P., Dzombak W. C. and Hunt H., *Ind. Eng. Chem.*, **48**, 1375—1378 (1956).
1641. Zahn C. T., *J. Chem. Phys.*, **2**, 674—680 (1934).
1642. Zeil W., Winnewisser M. and Mueller K., *Z. Naturforsch.*, **16a**, 1250 (1961).
1643. Zeise H., *Thermodynamik auf den Grundlagen der Quantentheorie, Quantenstatistik und Spektroskopie*, Band III/1, Tabellen, Band III/2, Graphische Darstellungen und Literatur, Hirzel-Verlag, Leipzig, 1954, 1957.
1644. Жданов А. К., *ЖОХ*, **15**, 895—902 (1945).
1645. Zietlow J. P., Cleveland F. F. and Meister A. G., *J. Chem. Phys.*, **24**, 142—146 (1956).
1646. Zimmer M. F., Baroody E. E., Graff M. G., Carpenter G. A. and Robb R. A., *J. Chem. Eng. Data*, **11**, 579—581 (1966).
1647. Zimmer M. F., Baroody E. E., Schwartz M. and McAllister M. P., *J. Chem. Eng. Data*, **9**, 527—529 (1964).
1648. Zimmer M. F., Robb R. A., Baroody E. E. and Carpenter G. A., *J. Chem. Eng. Data*, **11**, 577—579 (1966).
1649. Ziomek J. S. and Cleveland F. F., *J. Chem. Phys.*, **17**, 578—581 (1949).
1650. Ziomek J. S., Meister A. G., Cleveland F. F. and Decker C. E., *J. Chem. Phys.*, **21**, 90—100 (1953).
1651. Зубарева Н. Д., Оберемок — Якубова А. П., Петров Ю. И., Клубуновский Е. И., Баландин А. А., *Изв. АН СССР, серия хим.*, 2207 (1963).
1652. Zürcher R. F. and Günthard H. H., *Helv. Chim. Acta*, **40**, 89—101 (1957).
1653. Zwolinski B. J. (Ed.), *Selected Values of Properties of Hydrocarbons and Related Compounds*, American Petroleum Institute Research Project 44, Thermodynamics Research Center Data Project, Texas A & M University, College Station, Tex., 1966.
1654. Zwolinski B. J. et al., *Selected Values of Properties of Chemical Compounds*, Thermodynamics Research Center Data Project, Texas A & M University, College Station, Tex., 1966.
1655. Anonymous, *Chem. Eng. News*, **43** (50), 33—34 (1965).
1656. IUPAC Recommendation on Symbols, *Compt. Rend. 21st Conf. Union Intern. Chim. Pure Appl.*, Montréal, August 2—5, 1961, p. 142.

Указатель соединений

Азот 233
 Азота двуокись 255
 Азота закись 256
 Азота окись 255
 Азотная кислота 251
 Азулен 454
 Акриловая кислота 511
 Акрилонитрил 537
 Аллен 369
 Аллиловый спирт 493
 Амилбензол 425
 Амиллафталин 450
 Амилловый спирт 484
трет-Амилловый спирт 484
 Амилпропилсульфид 654
 Амилциклогексан 408
 Аммиак 254
 Анилин 57, 119, 534
 Ацетальдегид 55, 497
 Ацетилен 373
 Ацетилхлорид 611
 Ацетон 55, 502
 Ацетонитрил 535

 Бензальдегид 241
 Бензойная кислота 516
 Бензол 71, 72, 149, 179, 180, 182, 211, 226, 413
 Бензолтиол 713
 Бензонитрил 540
 Бром 230
 Бромбензол 625
 1-Бромбутан 618
 2-Бромбутан 619
 Бромистый водород 235
 Бромметан 612
 2-Бром-2-метилпропан 620
 1-Бромпентан 623
 1-Бромпропан 615
 2-Бромпропан 616
 3-Бромпропан-1 624
 Бромциан 236
 Бромэтан 613
 Бромэтилен 623

 Бутадиен-1,2 54, 369
 Бутадиен-1,3 370
 Бутадиин 374
 Бутан 64, 130, 269, 641
 Бутанон-2 503
 1-Бутантиол 699
 2-Бутантиол 700
 Бутен-1 348
 Бутен-2, *транс* 349
 Бутен-2, *цис* 349
 Бутен-1-ин-3 375
 Бутиламинсульфид 655
 Бутиламин 525
втор-Бутиламин 526
трет-Бутиламин 526
 Бутилбензол 421
 Бутилгексадецилсульфид 681
 Бутилгексилсульфид 657
 Бутилгептилсульфид 660
 Бутилддецилсульфид 667
 Бутилдодецилсульфид 672
 Бутилметилсульфид 641, 645
 1-Бутилнафталин 449
 2-Бутилнафталин 450
 Бутилнонилсульфид 665
 Бутиловый спирт 480
втор-Бутиловый спирт 481
трет-Бутиловый спирт 55, 482
 Бутилоктилсульфид 662
 Бутилпентадецилсульфид 679
 Бутилпропилсульфид 650
 Бутилтетрадецилсульфид 677
 Бутилтридецилсульфид 675
 Бутилундецилсульфид 670
 Бутилциклогексан 407
 Бутилдихлорпентан 393
 Бутилэтилсульфид 641, 647
 Бутин-1 54, 375
 Бутин-2 54, 376
 Бутиронитрил 538

 Валериановый альдегид 499
 Винилацетилен 375
 Вода 132, 252

Водород 132, 229
 Водорода перекись 252

 Гексадекан 345
 Гексадеканол-1 490
 Гексадекантиол 709
 Гексадецен-1 367
 Гексадецилметилсульфид 676
 Гексадецилпропилсульфид 680
 Гексадецин-1 381
 Гексамтилбензол 119, 180, 182, 428
 Гексап 162, 272, 641
 Гексапаль 499
 Гексаповый альдегид 499
 Гексантиол 704
 Гексафторбензол 575
 Гексафторэтан 57, 566
 Гексахлорбензол 610
 Гексахлорэтан 588
 Гексаэтилбензол 433
 Гексен-1 354
 Гексен-2, *транс* 355
 Гексен-2, *цис* 354
 Гексен-3, *транс* 356
 Гексен-3, *цис* 355
 Гексилбензол 426
 Гексилметилсульфид 651
 Гексильовый спирт 485
 Гексилпропилсульфид 656
 Гексин-1 377
 Гептадекан 345
 Гептадеканол-1 491
 Гептадекантиол 710
 Гептадецен-1 367
 Гептадецилметилсульфид 678
 Гептадецилпропилсульфид 683
 Гептадецин-1 382
 Гептан 46, 47, 76, 274, 641
 Гептаналь 500
 Гептантиол 704
 Гептен-1 362
 Гептилметилсульфид 653
 Гептиловый спирт 486
 Гептилпропилсульфид 658
 Гептин-1 378
 Гидразин 254
 Рафит 229

 Декагидронафталин, *транс* 455
 Декагидронафталин, *цис* 454
 Декан 305, 641
 Деканаль 501
 Декантиол 706
 Децен-1 364
 Децилметилсульфид 660

 Дециловый спирт 487
 Децилпропилсульфид 665
 Децилсульфид 682
 Децилэтилсульфид 663
 Децин-1 379
 Динамилдисульфид 687
 Динамилсульфид 659
 Диациетилен 374
 1,2-Дибромбутан 621
 2,3-Дибромбутан 621
 2,3-Дибром-2-метилбутан 622
 1,2-Дибромпропан 617
 1,2-Дибромэтан 615
 Дибутилдисульфид 641, 687
 Дибутиловый эфир 460, 471
 Ди-*втор*-бутиловый эфир 460, 472
 Ди-*трет*-бутиловый эфир 460, 472
 Дибутилсульфид 652
 Дигексилдисульфид 688
 Дигексилсульфид 663
 Дигептилдисульфид 688
 Дигептилсульфид 668
 Дидецилдисульфид 690
 Диизопропиловый эфир 460, 470
 Диизопропилсульфид 648
 1,2-Диодбутан 634
 Диодметан 628
 1,2-Диодпропан 633
 1,2-Диодэтан 630
 Диметиламин 56, 527
 Диметилацетилен 58, 376
 2,2-Диметилбутан 162, 273
 2,3-Диметилбутан 162, 274
 2,3-Диметилбутен-1 361
 3,3-Диметилбутен-1 361
 2,3-Диметилбутен-2 362
 2,2-Диметилгексан 281
 2,3-Диметилгексан 281
 2,4-Диметилгексан 281
 2,5-Диметилгексан 282
 3,3-Диметилгексан 283
 3,4-Диметилгексан 283
 2,2-Диметилгептан 290
 2,3-Диметилгептан 291
 2,4-Диметилгептан 291
 2,5-Диметилгептан 292
 2,6-Диметилгептан 292
 3,3-Диметилгептан 293
 3,4-Диметилгептан 293
 3,5-Диметилгептан 294
 4,4-Диметилгептан 294
 Диметилдисульфид 641, 684
 2,4-Диметил-3-изопропилпентан 339
 1,2-Диметилнафталин 442
 1,3-Диметилнафталин 443
 1,4-Диметилнафталин 443
 1,5-Диметилнафталин 444
 1,6-Диметилнафталин 444

1,7-Диметилнафталин 445
 2,3-Диметилнафталин 445
 2,6-Диметилнафталин 446
 2,7-Диметилнафталин 446
 Диметиловый эфир 460, 465
 2,2-Диметиллоктан 308
 2,3-Диметиллоктан 309
 2,4-Диметиллоктан 309
 2,5-Диметиллоктан 310
 2,6-Диметиллоктан 310
 2,7-Диметиллоктан 311
 3,3-Диметиллоктан 311
 3,4-Диметиллоктан 312
 3,5-Диметиллоктан 312
 3,6-Диметиллоктан 313
 4,4-Диметиллоктан 313
 4,5-Диметиллоктан 314
 2,2-Диметилпентаг 276
 2,3-Диметилпентаг 277
 2,4-Диметилпентаг 277
 3,3-Диметилпентаг 278
 2,2-Диметилпропан 54, 271
 Диметилсульфид 642, 641
 1,1-Диметилциклогексан 402
 1,2-Диметилциклогексан, *транс* 403
 1,2-Диметилциклогексан, *цис* 403
 1,3-Диметилциклогексан, *транс* 404
 1,3-Диметилциклогексан, *цис* 404
 1,4-Диметилциклогексан, *транс* 405
 1,4-Диметилциклогексан, *цис* 405
 1,1-Диметилциклопентаг 390
 1,2-Диметилциклопентаг, *транс* 391
 1,2-Диметилциклопентаг, *цис* 391
 1,3-Диметилциклопентаг, *транс* 392
 1,3-Диметилциклопентаг, *цис* 392
 Динитрил ацетилендикарбоновой кислоты 244
 Динонилдисульфид 689
 Динонилсульфид 678
n-Диоксан 475
 Диоктилдисульфид 689
 Диоктилсульфид 674
 Дипропилдисульфид 641, 686
 Дипропиловый эфир 460, 469
 Дипропилсульфид 649
 Дифенил 456
m-Дифторбензол 572
o-Дифторбензол 573
n-Дифторбензол 574
 Диформетан 560
 1,1-Дифторэтан 57, 564
 1,1-Дифторэтилен 569
m-Дихлорбензол 608
o-Дихлорбензол 607
n-Дихлорбензол 609
 Дихлорметан 578
 1,2-Дихлорпропан 591
 1,3-Дихлорпропан 592
 2,2-Дихлорпропан 592
 1,1-Дихлорэтан 57, 583
 1,2-Дихлорэтан 584
 1,1-Дихлорэтилен 600
 1,2-Дихлорэтилен, *транс* 602
 1,2-Дихлорэтилен, *цис* 601
 Дициан 243
 Диэтиламин 528
m-Диэтилбензол 421
o-Диэтилбензол 422
n-Диэтилбензол 422
 3,3-Диэтилгексаг 328
 3,4-Диэтилгексаг 328
 Диэтилдисульфид 641, 685
 3,3-Диэтил-2-метилпентаг 339
 Диэтиловый эфир 460, 466
 3,3-Диэтилпентаг 301
 Диэтилсульфид 641, 643
 Додекан 343
 1-Додекантиол 707
 Додецен-1 365
 Додецилметилсульфид 666
 Додециловый спирт 488
 Додецилпропилсульфид 671
 Додецилэтилсульфид 668
 Додэцин-1 379
 Изобутан 186, 269
 Изобутиронитрил 539
 Изопентаг 270
 Изопрен 373
 Изопропил-*трет*-бутиловый эфир 460, 471
 4-Изопропилгептан 315
 3-Изопропил-2-метилгексаг 327
 Изопропилметилсульфид 641, 644
 Изопропилнитрат 550
 Изопропиловый спирт 55, 479
 Изотиоциановая кислота 713
 Иод 232
 Иодбензол 635
 Иодистый водород 251
 Иодметан 627
 2-Иод-2-метилпропан 633
 1-Иодпропан 631
 2-Иодпропан 632
 3-Иодпропан-1 635
 Иодциан 240
 Иодэтан 629
 Кетен 505
 Кислород 132, 234
m-Крезол 514
o-Крезол 515
n-Крезол 515

-Ксилол 119, 178, 415
 Ксилол 54, 119, 178, 416
 Ксилол 119, 178, 416
 Кумол 417
 Масляный альдегид 464, 498
 Мезитилен 420
 Метан 80, 132, 188—191, 267
 Метантиол 56, 696
 Метиламидсульфид 649
 Метиламин 56, 522
 Метилацетилен 374
 Метилбутилен-1,2 372
 Метилбутилен-1,3 373
 Метилбутан 270, 641
 Метил-2-бутиантиол 702
 Метилбутен-1 352
 Метилбутен-1 353
 Метилбутен-2 353
 Метил-*трет*-бутиловый эфир 460, 469
 Метилбутиг-1 377
 Метилгексаг 275
 Метилгексаг 275
 Метилгептан 279
 Метилгептан 280
 Метилгептан 280
 Метилизопропиловый эфир 460, 468
 Метилнафталин 440
 Метилнафталин 441
 Метилнитрат 57, 547
 Метилнитрат 546
 Метилнонадецилсульфид 684
 Метилнонан 305
 Метилнонан 306
 Метилнонан 306
 Метилнонан 307
 Метилнонилсульфид 659
 Метиловый спирт 55, 476
 Метилорктадецилсульфид 681
 2-Метиллоктан 288
 3-Метиллоктан 288
 4-Метиллоктан 289
 Метилорктилсульфид 656
 Метилпентадецилсульфид 673
 2-Метилпентаг 162, 272
 3-Метилпентаг 162, 273
 2-Метилпентаг-1 356
 3-Метилпентаг-1 357
 4-Метилпентаг-1 357
 2-Метилпентаг-2 358
 3-Метилпентаг-2, *транс* 359
 3-Метилпентаг-2, *цис* 358
 4-Метилпентаг-2, *транс* 360
 4-Метилпентаг-2, *цис* 359
 2-Метилпропан 54, 269
 2-Метил-1-пропантиол 701
 2-Метил-2-пропантиол 56, 701
 2-Метилпропен 350
 Метилпропиловый эфир 460, 468
 Метилпропилсульфид 641, 645
 α -Метилстирол 436
 β -Метилстирол, *транс* 437
 β -Метилстирол, *цис* 437
m-Метилстирол 438
o-Метилстирол 438
n-Метилстирол 439
 Метилтетрадецилсульфид 672
 2-Метилтиофен 695
 3-Метилтиофен 695
 Метилтридецилсульфид 669
 Метилундецилсульфид 664
 Метилформиаг 509
 Метилциклогексаг 401
 Метилциклопентаг 227, 389
 1-Метилциклопентаг 399
 3-Метилциклопентаг 400
 4-Метилциклопентаг 401
 Муравьиная кислота 507
 Нафталин 439
 Неопентаг 271
 1-Нитробутан 544
 2-Нитробутан 545
 1-Нитропропан 543
 2-Нитропропан 543
 Нитроэтан 542
 Нонадекан 346
 Нонадеканол-1 492
 1-Нонадекантиол 711
 Нонадецен-1 368
 Нонадецин-1 383
 Нональ 501
 Нонан 287
 1-Нонантиол 706
 Нонен-1 363
 Нониловый спирт 487
 Нонилпропилсульфид 664
 Нонил-1 379
 Озон 257
 Октадекан 346
 Октадеканол-1 491
 1-Октадекантиол 710
 Октадецен-1 367
 Октадецин-1 382
 Октаг 279, 641
 Октагаль 500
 1-Октаантиол 705
 Октафторциклобутан 568
 Октен-1 363

Октиловый спирт 486
 Октилпропилсульфид 662
 Октин-1 378

Пентадекан 344
 Пентадеканол-1 490
 1-Пентадекантиол 709
 Пентадецен-1 366
 Пентадецилпропилсульфид 679
 Пентадецин-1 381
 Пентадецен-1,2 370
 Пентадецен-1,3, *транс* 371
 Пентадецен-1,3, *цис* 370
 Пентадецен-1,4 371
 Пентадецен-2,3 371
 Пентаметилбензол 180, 182, 425
 2,2,3,3,4-Пентаметилпентан 341
 2,2,3,4,4-Пентаметилпентан 342
 Пентан 270, 641
 Пентаон-2 504
 1-Пентантиол 703
 Пентахлорэтан 587
 Пентаэтилбензол 432
 Пентен-1 351
 Пентен-2, *транс* 352
 Пентен-2, *цис* 351
 Пентин-1 376
 Пентин-2 376
 Перфторилхлорид 245
 α -Пиколин 533
 β -Пиколин 533
 Пиридин 532
 Пирролидин 531
 Пропадиен 369
 Пропан 54, 168, 268, 641
 1-Пропантиол 698
 2-Пропантиол 56, 698
 Пропен 348
 Пропенилбензол, *транс* 437
 Пропенилбензол, *цис* 437
 Пропиламин 524
 Процилбензол 178, 417
 4-Процилгептан 314
 Процилена окись 55, 471
 1-Процилнафталин 447
 2-Процилнафталин 447
 Процилнитрат 549
 Проциловый спирт 478
 Процилонитрил 537
 Процилтетрадецилсульфид 676
 Процилтридецилсульфид 674
 Процилундецилсульфид 670
 Процилциклогексан 406
 Процилциклопентан 393
 Процин 374
 Пропионовый альдегид 464, 498

Сера 234
 Сера однохлористая 248
 Серная кислота 253
 Сероуглерод 242
 Серы двуокись 256
 Серы трехокись 258
 Спиропентан 451
 Спирол 192, 436
 Сульфурилхлорид 247

Тетрадекан 344
 Тетрадеканол-1 489
 1-Тетрадекантиол 708
 Тетрадецен-1 366
 Тетрадецин-1 381
 1,2,3,4-Тетраметилбензол 180, 182, 423
 1,2,3,5-Тетраметилбензол 180, 182, 424
 1,2,4,5-Тетраметилбензол 180, 182, 424
 2,2,3,3-Тетраметилбутан 287
 2,2,3,3-Тетраметилгексан 333
 2,2,3,4-Тетраметилгексан 334
 2,2,3,5-Тетраметилгексан 334
 2,2,4,4-Тетраметилгексан 335
 2,2,4,5-Тетраметилгексан 335
 2,2,5,5-Тетраметилгексан 336
 2,3,3,4-Тетраметилгексан 336
 2,3,3,5-Тетраметилгексан 337
 2,3,4,4-Тетраметилгексан 337
 2,3,4,5-Тетраметилгексан 338
 3,3,4,4-Тетраметилгексан 338
 2,2,3,3-Тетраметилпентан 303
 2,2,3,4-Тетраметилпентан 303
 2,2,4,4-Тетраметилпентан 304
 2,3,3,4-Тетраметилпентан 304
 Тетрафторэтилен 570
 1,1,2,2-Тетрахлорэтан 586
 Тетрахлорэтилен 604
 1,2,3,4-Тетраэтилбензол 429
 1,2,3,5-Тетраэтилбензол 430
 1,2,4,5-Тетраэтилбензол 431
 Тиациклобутан 691
 Тиациклогексан 692
 Тиациклогептан 693
 Тиациклопентан 692
 Тиациклопропан 690
 Тионилхлорид 247
 Тиоуксусная кислота 714
 Тиофен 694
 Толуол 54, 119, 180, 182, 414
 Тридекан 343
 Тридеканол-1 489
 1-Тридекантиол 708
 Тридецен-1 365
 Тридецин-1 380
 Триодметан 629
 Триметиламин 56, 528

2,3-Триметилбензол 180, 182, 419
 2,4-Триметилбензол 42, 178, 180, 182, 420
 2,3-Триметилбутан 278
 2,3-Триметилгексан 297
 2,4-Триметилгексан 297
 2,5-Триметилгексан 298
 3,3-Триметилгексан 298
 3,4-Триметилгексан 299
 2,3,5-Триметилгексан 299
 2,4,4-Триметилгексан 300
 3,4-Триметилгексан 300
 2,2,3-Триметилгептан 319
 2,2,4-Триметилгептан 320
 2,2,5-Триметилгептан 320
 2,2,6-Триметилгептан 321
 2,3,3-Триметилгептан 321
 2,3,4-Триметилгептан 322
 2,3,5-Триметилгептан 322
 2,3,6-Триметилгептан 323
 2,4,4-Триметилгептан 323
 2,4,5-Триметилгептан 324
 2,4,6-Триметилгептан 324
 2,5,5-Триметилгептан 325
 3,3,4-Триметилгептан 325
 3,3,5-Триметилгептан 326
 3,4,4-Триметилгептан 326
 3,4,5-Триметилгептан 327
 2,2,3-Триметилпентан 284
 2,2,4-Триметилпентан 285
 2,3,3-Триметилпентан 285
 2,3,4-Триметилпентан 286
 1,3,5-Триэтилциклогексан, *цис*, *транс* 407
 1,3,5-Триэтилциклогексан, *цис*, *цис* 406
 Трифторметан 561
 α,α,α -Трифтортолуол 575
 1,1,1-Трифторэтан 57, 565
 Трифторэтилен 570
 1,2,3-Трихлорпропан 593
 1,1,2-Трихлорэтан 585
 Трихлорэтилен 603
 Триэтиламин 529
 1,2,3-Триэтилбензол 426
 1,2,4-Триэтилбензол 427
 1,3,5-Триэтилбензол 427
 Триэтилендиамин 39

Углерод 229
 Углерода недоокись 244
 Углерода окись 240
 Уксусная кислота 55 208, 508
 Уксусный ангидрид 509
 Ундекан 342
 1-Ундекантиол 707

Ундецен-1 364
 Ундециловый спирт 488
 Ундецин-1 379

Фенилацетилен 453
 1-Фенилгексадекан 435
 1-Фенилгептан 428
 1-Фенилдекан 432
 1-Фенилдодекан 433
 1-Фенилнонан 431
 1-Фенилоктан 429
 1-Фенилпентадекан 435
 1-Фенилтетрадекан 434
 1-Фенилтридекан 434
 1-Фенилундекан 433
 Фенол 55, 119, 513
 Формальдегид 205, 495
 Фосген 237
 Фтор 231
 Фторбензол 572
 Фтористый водород 248
 Фтористый карбонил 238
 Фтористый нитрозил 249
 Фторметан 560
 Фторокись азота 250
 1-Фторпропан 567
 2-Фторпропан 567
n-Фтортолуол 576
 Фторэтан 563
 Фуран 112, 113, 475

Хлор 231
 Хлорбензол 606
 1-Хлорбутан 594
 2-Хлорбутан 594
 Хлористый водород 245
 Хлористый нитрозил 246
 Хлорметан 577
 1-Хлор-3-метилбутан 597
 2-Хлор-2-метилбутан 598
 1-Хлор-2-метилпропан 595
 2-Хлор-2-метилпропан 596
 Хлорокись азота 246
 Хлороформ 579
 1-Хлорпентан 597
 1-Хлорпропан 589
 2-Хлорпропан 590
 3-Хлорпропан-1 605
 Хлорциан 237
 Хлорэтан 582
 Хлорэтилен 599

Цианистый водород 239
 Циклобутан 384

Циклобутен 387
 Циклогексан 179, 385
 Циклогексен 388
 Циклогексанол 494
 Циклогексапон 506
 1-Циклогексилгексадекан 413
 1-Циклогексилгексан 408
 1-Циклогексилгептан 409
 1-Циклогексилдекан 410
 1-Циклогексилдодекан 411
 1-Циклогексилнонан 409
 1-Циклогексилоктан 409
 1-Циклогексилпентадекан 412
 1-Циклогексилтетрадекан 412
 1-Циклогексилтридекан 411
 1-Циклогексилундекан 411
 Циклогептан 386
 1,3,5-Циклогептатриен 452
 Циклооктан 387
 1,3,5,7-Циклооктатетраен 453
 Циклопентан 385
 Циклопентантиол 712
 Циклопентен 388
 1-Циклопентилгексадекан 399
 1-Циклопентилгексан 394
 1-Циклопентилгептан 395
 1-Циклопентилдекан 396
 1-Циклопентилдодекан 397
 1-Циклопентилнонан 395
 1-Циклопентилоктан 395
 1-Циклопентилпентадекан 398
 1-Циклопентилпентан 394
 1-Циклопентилтетрадекан 398
 1-Циклопентилтридекан 397
 1-Циклопентилундекан 397
 Циклопропан 383

 Четырехфтористая сера 250
 Четырехфтористый углерод 562
 Четыреххлористый углерод 580

 Эйкозан 347
 Эйкозанол-1 492
 1-Эйкозантиол 711
 Эйкозен-1 368
 Эйковин-1 383
 Энаптовый альдегид 464, 500
 Этан 54, 268
 Этантиол 56, 697
 Этиламилсульфид 651
 Этиламин 523
 Этилацетат 510
 Этилацетилен 375
 Этилбензол 83, 119, 178, 192, 415
 2-Этилбутен-1 360

Этилгексадецилсульфид 677
 3-Этилгексан 280
 Этилгексилсульфид 653
 Этилгептадецилсульфид 680
 3-Этилгептан 289
 4-Этилгептан 290
 Этилгептилсульфид 655
 3-Этил-2, 2-диметилгексан 329
 4-Этил-2,2-диметилгексан 329
 3-Этил-2,3-диметилгексан 330
 4-Этил-2,3-диметилгексан 330
 3-Этил-2,4-диметилгексан 331
 4-Этил-2,4-диметилгексан 331
 3-Этил-2,5-диметилгексан 332
 4-Этил-3,3-диметилгексан 332
 3-Этил-3,4-диметилгексан 333
 3-Этил-2,2-диметилпентан 301
 3-Этил-2,3-диметилпентан 302
 3-Этил-2,4-диметилпентан 302
 Этилен 347
 Этилена окись 473
 Этиленгликоль 493
 Этиленмин 530
 3-Этил-2-метилгексан 295
 4-Этил-2-метилгексан 295
 3-Этил-3-метилгексан 296
 3-Этил-4-метилгексан 296
 3-Этил-2-метилгептан 315
 4-Этил-2-метилгептан 316
 5-Этил-2-метилгептан 316
 3-Этил-3-метилгептан 317
 4-Этил-3-метилгептан 317
 3-Этил-5-метилгептан 318
 3-Этил-4-метилгептан 318
 4-Этил-4-метилгептан 319
 2-Этил-3-метилнафталин 448
 2-Этил-6-метилнафталин 448
 2-Этил-7-метилнафталин 449
 Этилметиловый эфир 460, 466
 3-Этил-2-метилпентан 284
 3-Этил-3-метилпентан 284
 Этилметилсульфид 641, 642
 1-Этилнафталин 441
 2-Этилнафталин 442
 Этилянтрат 548
 Этилнонилсульфид 661
 Этиловый спирт 55, 477
 Этилоктадецилсульфид 683
 3-Этилоктан 307
 4-Этилоктан 308
 Этилоктилсульфид 657
 Этилпентадецилсульфид 675
 3-Этилпентан 276
 Этилпропилсульфид 641, 646
 Этилтетрадецилсульфид 673
 м-Этилтолуол 418
 о-Этилтолуол 418
 п-Этилтолуол 419

Этилтридецилсульфид 671
 3-Этил-2,2,3-триметилпентан 340
 3-Этил-2,2,4-триметилпентан 340
 3-Этил-2,3,4-триметилпентан 341
 Этилундецилсульфид 667

 Этилциклогексан 402
 Этилциклопентан 227, 389
 Этин 373
 Этивилбензол 453

Предметный указатель

- Абсолютный джоуль 27
 Авогадро число 222, 720
 Адиабатическая оболочка 34—37
 Адиабатный метод 34—37
 Азот, термодинамические функции 233
 Активность 139, 201, 220, 720
 каталитическая в однотипных реакциях 212
 Алкилциклопентаны, теплосмкость 227
 Аллена метод корреляции 163, 265—267
 Андерсона, Бейера, Уотсона метод расчета термодинамических свойств с учетом групповых вкладов 165
 Аптуана уравнение 29—31
 Атмосфера стандартная 222
- Беневиза, Росснера эмпирическое уравнение 160
 Бензол
 термодинамические функции 226
 энтальпия испарения 72
 Бертло уравнение 24
 Бром, термодинамические функции 230
- Ван Кривелена и Чермина метод расчета энергии разрыва связи молекул 172
 Вант-Гоффа уравнение 155
 Виральные коэффициенты 24, 720
 Вклады
 вторичного замещения метильных групп 165
 кратных связей 165
 первичного замещения метильных групп 165
 Вода, точка кипения 22
 Водород, термодинамические функции 230
- Воеводского метод расчета энергии разрыва связи С—С в парафиновых углеводородах 165
 Вращение
 заторможенное 53, 126
 свободное внутреннее 58
 симметричного волчка 61, 62
- Газовая постоянная 21, 222
 удельная 21
 универсальная 21
 Газ
 идеальный 23, 24
 реальный 24
 Гаттермана — Коха реакция 240
 Гиббса — Гельмгольца уравнение 135
 Гипотетическое состояние 21
 Гравитация стандартная 222
 Графит, термодинамические функции 229
 Гудриформинг циклогексана 179
- Давление 20, 720
 влияние на химическое равновесие 201
 — на энтальпию 201
 критическое 71, 720
 пара 29, 150
 — приведенное 25, 148
 Длина связи 116
 Добраца уравнение 161
 Дублетный механизм 215, 216
- Единица энергии 27
- Заряд электрона 222
 Заторможенное вращение 59—63, 124—126
 Золото, точка плавления 22

- Идеальных газов закон 21
 Энтальпия химической реакции 140
 Инкремент 261—263
 Интегрирующий множитель 106
 Иод, термодинамические функции 232
- Калориметр 34, 35—37, 44, 45
 адиабатический 34—39
 бомбовый 84—90
 прецизионный 34
 Калориметрическая установка 34—37, 44—45
 Калориметрия
 бомбовая 84—90
 — сгорания веществ в газообразном и парообразном состоянии 83—92
 Калория 27
 термодинамическая 222
 Караша — Шера уравнение 161
 Катализатор 198, 199
 термодинамический порядок активности 213
 Каталитический комплекс, термодинамический анализ образования 211
 Кислород
 термодинамические функции 234
 точка кипения 22
 Кирхгофа уравнение 81, 89
 Клагеса метод расчета термодинамических свойств по типам связей 162
 Клайзуса — Клапейрона уравнение 73
 Клапейрона уравнение 71
 Ключевые соединения 260, 261
 Константа равновесия 140, 141, 220, 720
 зависимость от температуры 154, 155
 реакции пиролиза и окисления метанола 203
 стандартная 225
 Константы 221
 основные 222
 по определению 222
 производные 222
 Коэффициент летучести 201
 Критерий осуществимости реакций 176
- Лед, точка плавления 22, 23, 222
 Лейдлера метод расчета термодинамических свойств с учетом вкладов валентных связей 163
 Летучесть 139, 149, 201, 720
 компонента 201
 коэффициент 148, 721
- Метанол
 каталитическое окисление 203
 производство из формальдегида 203—208
 синтез 200
 Метод приближенного расчета термодинамических величин 159—172
 Андерсона, Бейера, Уотсона 165
 Ван Кривелена, Чермина 172
 Воеводского 165
 Капдинера и Бринкли 181
 Клагеса 162
 корреляции Аллена 265—267
 Паркса, Хаффмана 165
 Пятцера 170
 по групповым инкрементам 168, 169, 172
 средних энергий связи 162
 с учетом вкладов валентных связей 160
 Франклина 165, 171
 Метод расчета по «трем точкам» 30
 Методы расчета термодинамических свойств с учетом групповых вкладов 165—172
 — вкладов валентных связей 160—165
- Модель
 Дебая 40
 Фаянса 162
 Цана 163
 Эйнштейна 39
 Момент инерции 62, 115, 118, 720
 приведенный 62
 Мультиплетная теория катализа 215
 Мультиплетность 52
 Муравьиная кислота, каталитическое разложение в присутствии различных металлов 215
- Неорганические соединения, термодинамические свойства 235—258
 Несимметричный волчок, расчет термодинамических свойств 59—63
- Объем 20, 720
 критический 71
 Окисление метанола 203—208
- Парафины, термодинамические особенности поведения 179, 263—267
 Паркса, Хаффмана метод расчета термодинамических свойств с учетом групповых вкладов 165

- Пентантиол, теплоемкость 168
 Персона, Пиментела уравнение 170, 171
 Планка постоянная 222, 720
 Плотность критическая 71, 720
 Подбор катализаторов, использование термодинамических данных 213
 Поправка на неидеальность газов 109
 Последовательных приближений метод 142—145
 Постоянная Планка 222
 Потенциальный барьер 53—63
 энергии внутреннего вращения 54—57
 Правило знаков 25
 Правило парабол Симпсона 67, 68, 129—131
 Приведенная функция энергии Гиббса 219, 225
 Принцип равномерного распределения энергии по степеням свободы 48, 49
 Принцип энергетического соответствия 215, 216
 Промежуточный комплекс 212
 Процессы 19, 219
 вращения 219
 испарения 219
 обратимые 105
 плавления 219
 полиморфного превращения 219
 реальные или самопроизвольные 105
 сгорания 79, 80, 83—92, 219
 сублимации 219
- Равновесие**
 анализ реакций с участием бензола и 12 метилбензолов 180
 в газах при высоких давлениях 148—150
 в системах с участием конденсированных фаз 150—153
 гетерогенное 150
 гомогенное 150
 зависимость от температуры 154, 155
 истинное 19
 метастабильное 19, 137
 сложное 153, 154
 устойчивое 137, 138
- Равновесие, расчет равновесного состава газовой смеси для реакций типа $A = B$ 143
 — — $2A = B$ 143
 — — $A = B + C$ 144
 — — $2A = B + C$ 145
 — — $A + B = C + D$ 145
- Разбавленные растворы 70
- Расчет термодинамических данных с помощью вычислительных машин 224
 равновесий 180
 энтальпий 67—69
 энтропий 129—131
 Раули закон 70
 Реакции 19
 критерий осуществимости 176
 Реакция Гаттермана — Коха 210—213
 Россини эмпирическое соотношение 171
- Сакура уравнение 114
 Сакура — Тетроде уравнение 114
 Свободная энергия реакции 134—142
 Свойства 17
 интенсивные 19
 термические 17
 экстенсивные 18
- Сера
 термодинамические функции 234
 точка кипения 22
- Серебро, точка плавления 22
 Симметрии число 118, 119, 721
 Симпсона правило парабол 67, 68, 129—131
- Синтез
 акрилонитрила 197
 метанола 200
 углеводородов 187
 формальдегида 205
 хлористого винила 198
- Система 18
 гетерогенная 18
 гомогенная 18
 термодинамическая 18, 19
 Скорость света в вакууме 222, 720
- Состояние 21
 гипотетическое 21
 исходное 19, 25
 конечное 19, 25
 системы 19
 стандартное 28, 29, 131, 135, 219, 228—259
- Стандартная атмосфера 222
 Стандартная гравитация 222
 Стандартная константа равновесия 225
 Стандартная энергия образования Гиббса 135, 225
 Стандартная энтропия образования 225
- Статистический метод Питцера расчета теплоемкостей газообразных нормальных парафинов 170

- Степени свободы 48, 49
 вращательные 49
 колебательные 49
 поступательные 49
- Сурьма, точка плавления 21
- Схема расчета термодинамических свойств с учетом вкладов валентных связей
 Аллена 162
 Бейсона и Басса 163
 Лейдлера 163
 по энергиям связи 162, 164
- Татевского, Бендерского, Ярового метод расчета термодинамических свойств с учетом вкладов валентных связей 159, 162, 163
- Температура 20—23
 влияние на химическое равновесие 201
 — на энтальпию 201
 Дебая 40
 критическая 71
 приведенная 25, 74, 148
 Эйнштейна 40
- Теплоемкость 32, 33, 719
 алкилциклопентанов 227
 газообразного *n*-бутана 130
 газообразного пентантиола 168
 газообразных веществ 43—63, 65
 жидкостей 43
 истинная 32
 при постоянном давлении 32, 33, 219
 при постоянном объеме 32
 средняя 32
 удельная 33
- Теплоемкость газов, экспериментальное определение 43—48
- Теплоемкость конденсированных фаз при низких температурах
 теоретическая оценка 39—43
 экспериментальное определение 33—39
- Теплоемкость
 методы расчета 50—63
 — — для газов на основе статистической термодинамики 48—64
- Теплота 26—28, 720
 реакции 221
- Термодинамика 17, 172
 химическая 17
- Термодинамики законы
 второй 105
 первый 25—27
 третий 109—110
- Термодинамические данные, машинный расчет 224
- Термодинамические свойства
 закономерности изменения для углеводородов 263—267
 определение по второму закону термодинамики 95—101, 155
 — по третьему закону термодинамики 101, 104, 156—157
- Термодинамические функции азота 233
 бензола 226
 брома 230
 водорода 230
 графита 229
 иода 232
 кислорода 234
 серы 234
 фтора 231
 хлора 231
 этилциклопентана 227
- Термодинамические функции, закономерности для гомологического ряда углеводородов в газообразном состоянии 264—267
- Термодинамический анализ 173—177, 186, 187, 197, 198, 200, 208
 реакции образования каталитического комплекса 211
- Термохимическая калория 24
- Термохимия 17
- Точка кипения 71
 воды 22
 кислорода 22
 нормальная 71
 серы 22
 сурьмы 21
- Точка плавления 69, 221
 золота 22
 льда 22, 23, 222
 серебра 22
 цинка 22
- Траугона соотношение 74
- Тройная точка 70, 221
- Углы валентные 116, 117
- Уксусная кислота, получение 208—210
- Уравнение
 Антуана 29, 30
 Бертоля 24
 Вант-Гоффа 155
 Гиббса — Гельмгольца 135
 Кирхгофа 81, 82
 Клапейрона 71
 Клаузиуса — Клапейрона 73
 Сакура — Тетроде 114

- состояния 23, 24
теплоемкости 39, 40, 43, 64, 65
Эйнштейна для вклада каждого гармонического осциллятора в теплоемкость и энтропию 39, 120
Формальдегида синтез 205
Франклина метод расчета энергии разрыва связей молекул 165, 171
- Фтор**, термодинамические функции 231
- Функция**
работы 134
распределения 114
энергии Гиббса 156, 157
— приведенная 225
энтальпии 69
- Функция теплоемкостей**
по Дебаю 40
по Эйнштейну 41
- Хлор**, термодинамические функции 231
- Цинк**, точка плавления 22
- Частоты**
валентные 160
деформационные 160
колебательные 120—127
- Число симметрии** 118, 119
вращающейся части молекулы 118
молекулы 118
полное 118
- Шкала температур**
Кельвина 20, 21, 221, 720
международная 21, 221, 720
термодинамическая 20, 21, 221
- Эйнштейна уравнение** 39, 120
Эмпирическое соотношение России 171
- Энергия** 25—27, 719
внутреннего вращения 52, 53
вращательного движения 49
Гельмгольца 134, 719
Гиббса 18, 134—140, 151—157, 218, 219
— изменение 134—140, 151—157, 175, 176, 187—192, 197, 211—215, 719
— стандартная 135, 140, 151, 152, 175, 176, 719
— функция 156, 157
единица 27
кинетическая 25
поступательного движения 48, 49
потенциальная 25
потенциальных барьеров внутреннего вращения 54—57
простого гармонического осциллятора 49, 50
свободная 134
- Энергия Гиббса**, применение для подбора катализаторов 213—217
- Энергия образования Гиббса** 135—137, 151, 152, 180, 719
стандартная 135, 140, 151, 152, 225
- Энтальпия** 27, 28, 65, 66, 218, 719
зависимость от температуры 81—83
изменение 27, 28
— как показатель каталитической активности 215
— в процессе испарения 221, 719
— — плавления 220, 719
— — сублимации 221, 719
при реакции сгорания 221, 719
испарения 43, 221
плавления 69, 220, 719
реакции 78—83
стандартная 219
сублимации 71, 73—76, 221
функция 69
- Энтальпия испарения** 719
бензола 72
экспериментальное определение 43—48
- Энтальпия образования** 77, 219, 719
закономерности для некоторых гомологических рядов углеводородов 263—267
комплекса 212
углеводородов и алифатических сульфидов 170
углеводородов и тиолов 170
- Энтальпия образования**, определение 104
по равновесным данным 95—104
по теплотам реакций 92—95
- Энтальпия реакций**, зависимость от температуры 81—83
- Энтальпия сгорания графита**, определение 223

- Энтальпия сгорания**, определение методом бомбовой калориметрии 84—90
органических веществ в газообразном и парообразном состоянии 90—92
- Энтальпия сгорания хлорсодержащих соединений** 223
- Энтальпия фазовых переходов** при постоянном давлении, зависимость от температуры 69, 70
- Энтропии вычисление**
методом статистической механики 112—127
на основе третьего закона термодинамики 110
по данным низкотемпературных теплоемкостей 111, 112
- Энтропийная единица** 106
- Энтропия** 105, 106, 720
абсолютная 111—114
влияние давления 107
внутреннего вращения 114, 119
вращательного движения 114, 115
колебательного движения 114, 120
общее выражение 110
полная 120
поступательного движения 114
практическая 219
смешанная 107
фазовых переходов 107
фурана 112
- Энтропия**, изменение
в процессе испарения 221
— плавления 220
— сублимации 221
химической реакции 131, 221
при нагревании системы 106
- Энтропия**, расчет температурной зависимости 127—131
интегрирование по правилу парабол Симпсона 129, 130
на основе третьего закона 111, 127, 128
— спектроскопических данных 127
- Этилциклонентан**, термодинамические функции 227

УВАЖАЕМЫЙ ЧИТАТЕЛЬ!

Ваши замечания о содержании книги, ее оформлении, качестве перевода и другие просим присылать по адресу:

Москва, И-278, 1-й Рижский пер., д. 2. Издательство «Мир».

Selected Values for Inorganic Compounds from Chapter 8

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_{f298}° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_{f298}° (kcal/mole)	Log Kp
BRH	HYDROGEN BROMIDE	(G)	80.924	-8.66	T (10)	47.44	T (10)	-12.73	9.329
CLF03	PERCHLORYL FLUORIDE	(G)	102.457	-6.49	T (24)	66.65	T (24)	10.72	-7.858
CLH	HYDROGEN CHLORIDE	(G)	36.465	-22.06	T (25)	44.64	T (25)	-22.77	16.692
CLNO	NITROSYL CHLORIDE	(G)	65.465	12.57	T (26)	62.53	T (26)	16.00	-11.727
CLNO2	NITRYL CHLORIDE	(G)	81.465	-3.12	T (27)	65.01	T (27)	6.87	-5.039
CL205	THIONYL CHLORIDE	(G)	118.980	-50.60	T (28)	73.23	T (28)	-46.97	34.425
CL2025	SULFURYL CHLORIDE	(G)	134.980	-95.40	T (29)	74.37	T (29)	-74.80	54.827
CL252	SULFUR MONOCHLORIDE	(G)	135.046	-4.66	T (30)	76.35	T (30)	-6.99	5.120
FH	HYDROGEN FLUORIDE	(G)	20.008	-64.80	T (31)	41.51	T (31)	-65.30	47.865
FNO	NITROSYL FLUORIDE	(G)	49.008	-15.70	T (32)	59.27	T (32)	-12.02	8.811
FNO2	NITRYL FLUORIDE	(G)	65.008	-19.00	T (33)	62.24	T (33)	-8.90	6.525
F4S	SULFUR TETRAFLUORIDE	(G)	108.066	-174.10	T (34)	69.58	T (34)	-163.68	119.976
HI	HYDROGEN IODIDE	(G)	127.918	6.30	T (35)	49.35	T (35)	0.38	-0.276
HN03	HYDROGEN NITRATE	(G)	63.016	-32.02	T (36)	63.68	T (36)	-17.62	12.912
H2O	WATER	(G)	18.016	-57.80	T (37)	45.11	T (37)	-54.64	40.049
H2O2	HYDROGEN PEROXIDE	(G)	34.016	-32.53	T (38)	55.66	T (38)	-25.21	18.478
H2O44	SULFURIC ACID (ANHYDROUS)	(L)	98.082	-194.45	T (39)	37.49	T (39)	-164.83	120.815
H2S	HYDROGEN SULFIDE	(G)	34.082	-4.82	T (40)	49.18	T (40)	-7.90	5.792
H3N	AMMONIA	(G)	17.032	-10.92	T (41)	46.03	T (41)	-3.86	2.831
H4N2	HYDRAZINE	(G)	32.048	22.75	T (42)	57.41	T (42)	37.89	-27.773
NO	NITRIC OXIDE	(G)	30.008	21.60	T (43)	50.35	T (43)	20.72	-15.184
NO2	NITROGEN DIOXIDE	(G)	46.008	8.09	T (44)	57.35	T (44)	12.42	-9.107
N2O	NITROUS OXIDE	(G)	44.016	19.49	T (45)	52.56	T (45)	24.77	-18.156
O2S	SULFUR DIOXIDE	(G)	64.066	-70.95	T (46)	59.30	T (46)	-71.74	52.588
O3	OZONE	(G)	48.000	34.00	T (47)	57.05	T (47)	38.91	-28.517
O3S	SULFUR TRIOXIDE	(G)	80.066	-94.47	T (48)	61.19	T (48)	-88.52	64.886

Selected Values for Organic Compounds

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log K _p
CBRCLF2	BROMOCHLORODIFLUOROMETHANE	(G)	165.383	-117.7	E(938)	76.14	S(465)	-107.18	78.563
CBRCL0	CARBONYL BROMIDE CHLORIDE	(G)	143.383			72.04	S(1094)		
CBRCL2F	BROMODICHLOROFUOROMETHANE	(G)	181.840	-64.4	E(938)	78.87	S(484)	-58.98	43.228
CBRCL3	BROMOTRICHLOROMETHANE	(G)	198.297	-8.9	R(104)	79.55	S(912)	-2.96	2.167
CBRF3	BROMOTRIFLUOROMETHANE	(G)	148.926	-155.1	A(833)	71.19	S(975)	-148.83	109.089
CBRN	CYANOGEN BROMIDE	(S)	105.934	32.5	H(883)				
CBRN	CYANOGEN BROMIDE	(G)	105.934	43.35	T(11)	59.07	T(11)	38.39	-28.140
CBR2CLF	DIBROMOCHLOROFUOROMETHANE	(G)	226.249	-55.4	E(938)	81.89	S(484)	-53.40	39.13A
CBR2CL2	DIBROMODICHLOROMETHANE	(G)	242.756	-7.0	E(938)	83.23	S(312)	-4.67	3.425
CBR2F2	DIBROMODIFLUOROMETHANE	(G)	209.842	-107.7	E(938)	77.66	S(317)	-100.16	73.413
CBR20	CARBONYL BROMIDE	(L)	187.842	-30.0	C(1249)				
CBR20	CARBONYL BROMIDE	(G)	187.842	-23.0	C(1249)	73.82	S(1094)	-26.45	19.388
CBR3CL	TRIBROMOCHLOROMETHANE	(G)	287.215	3.0	E(938)	85.36	S(465)	2.17	-1.592
CBR3F	TRIBROMOFUOROMETHANE	(G)	270.758	-45.4	E(938)	82.65	S(465)	-46.14	33.821
CBR4	CARBON TETRABROMIDE	(G)	331.674	12.0	C(1249)	85.53	S(465)	8.60	-6.304
CCLF0	CARBONYL CHLORIDE FLUORIDE	(G)	82.467			66.18	S(888)		
CCLF3	CHLOROTRIFLUOROMETHANE	(G)	104.467	-166.0	R(833)	68.28	S(8)	-156.34	114.595
CCLN	CYANOGEN CHLORIDE	(G)	61.475	31.60	T(12)	56.28	T(12)	29.99	-21.984
CCLN306	TRINITROCHLOROMETHANE	(L)	185.491	-5.57	A(1647)				
CCL2F2	DICHLORODIFLUOROMETHANE	(G)	120.924	-115.0	R(833)	71.91	S(8)	-105.70	77.477
CCL20	PHOSGENE	(G)	98.924	-52.80	T(13)	67.82	T(13)	-49.42	36.225
CCL2S	THIOPHOSGENE	(G)	114.990			70.19	S(1487)		
CCL3F	TRICHLOROFUOROMETHANE	(G)	137.381	-68.0	R(833)	74.13	S(8)	-58.64	42.983
CCL4	CARBON TETRACHLORIDE	(L)	153.838	-31.75	T(725)	51.67	M(598)	-14.97	10.975
CCL4	CARBON TETRACHLORIDE	(G)	153.838	-24.00	T(725)	74.12	T(725)	-13.92	10.201
CCL4S	TRICHLOROMETHANESULFENYL								
CCL4S	CHLORIDE	(G)	185.904			88.43	S(412)		
CFN	CYANOGEN FLUORIDE	(G)	45.018			53.97	S(890)		
CFN306	TRINITROFLUOROMETHANE	(L)	169.034	-53.4	A(1648)				
CF20	CARBONYL FLUORIDE	(G)	66.010	-153.00	T(14)	61.84	T(14)	-149.28	109.421
CF3I	TRIFLUOROIODOMETHANE	(G)	195.920	-141.0	A(833)	73.50	S(975)	-136.70	100.201
CF4	CARBON TETRAFLUORIDE	(G)	88.010	-223.00	T(704)	62.50	T(704)	-212.34	155.641
CF40	TRIFLUOROMETHYL HYPOFLUORITE	(G)	104.010	-187.6	C(1435)				
CHBRCLF	BROMOCHLOROFUOROMETHANE	(G)	147.391	-70.5	E(938)	72.88	S(465)	-66.58	48.807
CHBRCL2	BROMODICHLORUMETHANE	(G)	163.848	-14.0	E(938)	75.56	S(1174)	-10.16	7.445
CHBRF2	BROMODIFLUORUMETHANE	(G)	130.934	-110.8	E(938)	70.51	S(1100)	-106.90	78.353

II

Formula	Name	State	Mol Wt	(kcal/mole)	Source	(cal/mole °K)	Source	(kcal/mole)	Log K _p
CHBR2CL	DIBROMOCHLOROMETHANE	(G)	208.307	-5.0	E(938)	78.31	S(1179)	-4.50	3.297
CHBR2F	DIBROMOFUOROMETHANE	(G)	191.850	-53.4	E(938)	75.70	S(1037)	-52.84	38.732
CHBR2I	DIBROMOIODOMETHANE	(G)	299.760	20.0	E(938)				
CHBR3	TRIBROMOMETHANE	(L)	252.766	-4.8	C(1249)				
CHBR3	TRIBROMOMETHANE	(G)	252.766	6.0	C(1249)	79.03	S(465)	3.77	-2.762
CHCLF2	CHLORODIFLUOROMETHANE	(G)	86.475	-119.9	E(938)	67.13	M(1049)	-112.47	82.437
CHCL2F	DICHLOROFUOROMETHANE	(G)	102.932	-71.4	E(938)	69.99	S(1585)	-64.10	46.983
CHCL3	CHLOROFORM	(L)	119.389	-31.6	T(724)	48.5	S(1249)	-17.17	12.885
CHCL3	CHLOROFORM	(G)	119.389	-24.2	T(724)	70.66	T(724)	-16.38	12.004
CHF12	FLUOROIODOMETHANE	(G)	285.838	-22.4	E(938)				
CHF2I	DIFLUOROIODOMETHANE	(G)	177.928	-94.8	E(938)				
CHF3	TRIFLUOROMETHANE	(G)	70.018	-166.71	T(703)	62.04	T(703)	-158.48	116.165
CHF3S	TRIFLUOROMETHANETHIOL	(G)	102.084			73.72	S(329)		
CHI3	TRIIODOMETHANE	(S)	393.748	33.60	C(1249)				
CHI3	TRIIODOMETHANE	(G)	393.748	50.40	T(777)	85.00	T(777)	42.53	-31.174
CHN	HYDROCYANIC ACID	(G)	27.026	31.20	T(15)	48.21	T(15)	28.71	-21.042
CHNO	ISOCYANIC ACID	(G)	43.026			56.92	S(892)		
CHNS	ISOTHIDCYANIC ACID	(G)	59.092	30.50	T(917)	59.28	T(917)	26.98	-19.777
CHN306	TRINITROMETHANE	(L)	151.042	-9.2	A(1193)				
CHN306	TRINITROMETHANE	(L)	151.042	-6.2	C(1640)				
CHN306	TRINITROMETHANE	(L)	151.042	18.6	C(613)				
CH2BRCL	BROMOCHLOROMETHANE	(G)	129.399	-12.0	E(938)	68.67	S(1582)	-9.39	6.886
CH2BRF	BROMOFUOROMETHANE	(G)	112.942	-60.4	E(938)	65.97	S(465)	-57.71	42.302
CH2BRI	BROMOIODOMETHANE	(G)	220.852	12.0	E(938)	73.49	S(465)	9.36	-6.862
CH2BR2	DIBROMOMETHANE	(G)	173.858	-1.0	E(1249)	70.08	S(345)	-1.34	0.979
CH2CLF	CHLOROFUOROMETHANE	(G)	68.483	-69.5	E(938)	63.16	S(465)	-63.45	46.510
CH2CL1	CHLOROIODOMETHANE	(G)	176.393	3.0	E(938)	70.78	S(465)	3.69	-2.705
CH2CL2	DICHLOROMETHANE	(L)	84.940	-29.7	T(723)	42.7	S(1249)	-16.83	12.337
CH2CL2	DICHLOROMETHANE	(G)	84.940	-22.80	T(723)	64.59	T(723)	-16.46	12.063
CH2F2	DIFLUOROMETHANE	(G)	52.026	-108.24	T(702)	58.94	T(702)	-101.66	74.513
CH2I2	DIIODOMETHANE	(L)	267.846	15.89	C(1249)				
CH2I2	DIIODOMETHANE	(G)	267.846	28.20	T(776)	73.88	T(776)	24.16	-17.709
CH2N2	CYANAMIDE	(S)	42.042	14.65	A(1275)				
CH2N2	CYANAMIDE	(G)	42.042			56.64	S(1041)		
CH2N2	DIAZOMETHANE	(G)	42.042	46.0	C(847)	58.03	S(1024)	52.06	-38.156
CH2N4	TETRAZOLE	(S)	70.058	56.7	B(974)				

III

AI

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° ₂₉₈ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f° ₂₉₈ (kcal/mole)	Log Kp
CH2N4O	TETRAZOL-5-OL	(S)	86.058	1.5	B(1616)				
CH2N6O2	1-AZIDO-N NITROFORMAMIDINE	(S)	130.074	71.3	C(974)				
CH2N6O2	5-NITRAMINOTETRAZOLE	(S)	130.074	60.3	C(974)				
CH2O	FORMALDEHYDE	(G)	30.026	-27.70	T(544)	52.29	T(544)	-26.27	19.258
CH2O	PARAFORMALDEHYDE	(S)	30.026	-40.20	C(744)				
CH2O2	FORMIC ACID	(L)	46.026	-101.52	T(559)	30.82	T(559)	-86.39	63.320
CH2O2	FORMIC ACID	(G)	46.026	-90.49	T(559)	59.45	T(559)	-83.89	61.492
CH2S3	TRITHIOCARBONIC ACID	(L)	110.224	6.0	B(460)	53.3	M(460)	6.65	-4.871
CH3BR	BROMOMETHANE	(G)	94.950	-9.00	T(759)	58.75	T(759)	-6.73	4.932
CH3CL	CHLOROMETHANE	(G)	50.491	-20.63	T(722)	56.04	T(722)	-15.03	11.017
CH3F	FLUOROMETHANE	(G)	34.034	-55.90	T(701)	53.25	T(701)	-50.19	36.789
CH3I	IODOMETHANE	(L)	141.944	-3.29	T(775)	38.9	S(1249)	3.61	-2.649
CH3I	IODOMETHANE	(G)	141.944	3.34	T(775)	60.71	T(775)	3.74	-2.742
CH3NO	FORMAMIDE	(S)	45.042	-61.6	C(1249)				
CH3NO	FORMAMIDE	(G)	45.042	-44.5	C(82)	59.38	S(82)	-33.71	24.710
CH3NO2	METHYL NITRITE	(G)	61.042	-15.30	T(629)	67.95	T(629)	0.24	-0.174
CH3NO2	NITROMETHANE	(L)	61.042	-27.03	A(1193)	41.05	M(702)	-3.47	2.545
CH3NO2	NITROMETHANE	(G)	61.042	-17.86	T(623)	65.73	T(623)	-1.66	1.217
CH3NO3	METHYL NITRATE	(L)	77.042	-36.9	T(630)	51.86	M(528)	-9.26	6.787
CH3NO3	METHYL NITRATE	(G)	77.042	-28.80	T(630)	72.15	T(630)	-7.21	5.284
CH3N3O3	NITROUREA	(S)	105.058	-67.2	B(981)				
CH3N5	5-AMINOTETRAZOLE	(S)	85.074	49.7	B(974)				
CH4	METHANE	(G)	16.042	-17.89	T(101)	44.52	T(101)	-12.15	8.903
CH4N2O	UREA	(S)	60.058	-79.63	A(1265)	25.00	M(1265)	-47.12	34.535
CH4N2O	UREA	(G)	60.058	-58.7	B(1450)	59.6	M(1450)	-36.90	26.756
CH4N2S	THIOUREA	(S)	76.124	-21.5	C(91)	27.67	M(1596)	5.19	-3.802
CH4N2S	THIOUREA	(G)	76.124			72.44	S(909)		
CH4N4O2	NITROGUANIDINE	(S)	104.074	-21.5	B(981)				
CH4N4O2	NITROGUANIDINE	(S)	104.074	-22.2	B(974)				
CH4N4O4	N,N'-DINITROMETHANEDIAMINE	(S)	136.074	-13.8	B(1039)				
CH4O	METHANOL	(L)	32.042	-57.02	T(517)	30.3	M(732)	-39.73	29.123
CH4O	METHANOL	(G)	32.042	-48.08	T(517)	57.29	T(517)	-38.84	28.468
CH4S	METHANETHIOL	(L)	48.108	-11.18	A(511)				
CH4S	METHANETHIOL	(G)	48.108	-5.49	T(890)	60.96	T(890)	-2.37	1.739
CH5N	METHYLAMINE	(L)	31.058	-11.31	A(678)				
CH5N	METHYLAMINE	(G)	31.058	-5.5	T(601)	57.98	T(601)	7.71	-5.648

AI

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f° (kcal/mole)	Log Kp
CH5N3	GUANIDINE	(S)	59.074	-17.0	C(1249)				
CH5N3O4	UREA NITRATE	(S)	123.074	-134.5	B(981)				
CH5N3S	HYDRAZINIUM THIOCYANATE	(S)	91.140	9.2	B(1446)				
CH5N3S	THIOSEMICARBAZIDE	(S)	91.140	5.7	B(1446)				
CH5N5O2	AMINONITROGUANIDINE	(S)	119.090	5.3	B(974)				
CH6CLN	METHYLAMINE HYDROCHLORIDE	(S)	67.523	-71.2	A(47)	33.13	M(47)	-37.99	27.845
CH6N2	METHYLHYDRAZINE	(L)	46.074	12.7	B(41)	39.66	M(34)	42.84	-31.403
CH6N2	METHYLHYDRAZINE	(G)	46.074	20.4	B(41)	66.61	S(34)	42.51	-31.158
CH6N2O2	AMMONIUM CARBAMATE	(S)	78.074	-154.21	C(1249)	39.70	F(1249)	-109.47	80.238
CH6N2O3	METHYLAMINE NITRATE	(S)	94.074	-84.3	C(983)				
CH6N2O3	METHYLAMINE NITRATE	(S)	94.074	-80.6	C(277)				
CH8N6O3	DIAMINO GUANIDINE NITRATE	(S)	152.122	-37.6	B(974)				
CIN	IODINE CYANIDE	(S)	152.928	38.30	A(883)	30.80	S(1249)	40.48	-29.674
CIN	IODINE CYANIDE	(G)	152.928	53.80	T(16)	61.33	T(16)	46.88	-34.363
CI4	TETRAIODOMETHANE	(G)	519.650			93.61	S(1278)		
CI4	TETRAIODOMETHANE	(G)	519.650			93.60	S(539)		
CN4O8	TETRANITROMETHANE	(L)	196.042	8.9	B(1252)				
CN4O8	TETRANITROMETHANE	(L)	196.042	8.8	B(459)				
CO	CARBON MONOXIDE	(G)	28.010	-26.42	T(17)	47.30	T(17)	-32.81	24.050
CO5	CARBONYL SULFIDE	(G)	60.076	-33.08	T(18)	55.32	T(18)	-39.59	29.017
CO2	CARBON DIOXIDE	(G)	44.010	-94.05	T(19)	51.07	T(19)	-94.26	69.091
CS	CARBON MONOSULFIDE	(G)	44.076	55.0	C(1435)	50.30	S(1435)	42.68	-31.287
CS2	CARBON DISULFIDE	(L)	76.142	21.37	A(511)	36.10	M(175)	15.56	-11.407
CS2	CARBON DISULFIDE	(G)	76.142	27.98	T(20)	56.83	T(20)	15.99	-11.722
C2BRCLF2	1-BROMO-1-CHLORO-								
C2BRCLF2	2,2-DIFLUOROETHYLENE	(G)	177.393			80.86	S(1483)		
C2BRF3	BROMOTRIFLUOROETHYLENE	(G)	160.936			80.02	S(918)		
C2BR2CLF3	1,2-DIBROMO-1-CHLORO-								
C2BR2CLF3	1,2,2-TRIFLUOROETHANE	(G)	276.309	-153.2	C(823)				
C2BR2F2	1,1-DIBROMO-								
C2BR2F2	2,2-DIFLUOROETHYLENE	(G)	221.852			83.62	S(1076)		
C2BR2F4	1,1-DIBROMO-								
C2BR2F4	1,2,2,2-TETRAFLUOROETHANE	(G)	259.852	-188.5	B(823)				
C2BR4	TETRABROMOETHYLENE	(G)	343.684			92.49	S(923)		
C2CLF2N	CHLORODIFLUOROACETONITRILE	(G)	111.485			76.08	S(682)		

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_{298}° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole K)	Source	ΔG_{298}° (kcal/mole)	Log K_p
C2CLF3	CHLOROTRIFLUOROETHYLENE	(G)	116.477	-130.2	C(755)	77.12	S(917)	-122.77	89.989
C2CLF3	CHLOROTRIFLUOROETHYLENE	(G)	116.477	-133.9	C(797)	77.12	S(917)	-126.47	92.701
C2CLF3	CHLOROTRIFLUOROETHYLENE	(G)	116.477	-124.2	C(1574)	77.12	S(917)	-116.77	85.591
C2CLF5	CHLOROPENTAFLUROETHANE	(G)	154.477			85.47	M(45)		
C2CL2FN	DICHLOROFLUROACETONITRILE	(G)	127.942			79.33	S(682)		
C2CL2F2	1,1-DICHLORO-2,2-DIFLUOROETHYLENE	(G)	132.934	-80.2	A(833)				
C2CL2F4	1,2-DICHLORO-1,1,2,2-TETRAFLUROETHANE	(G)	170.934	-218.6	C(755)				
C2CL2F4	1,2-DICHLORO-1,1,2,2-TETRAFLUROETHANE	(G)	170.934	-214.6	B(831)				
C2CL2F4	1,1,2,2-TETRAFLUROETHANE	(G)	170.934	-214.6	B(831)				
C2CL2O2	OXALYL CHLORIDE	(G)	126.934			79.27	S(1650)		
C2CL3F	TRICHLOROFLUROETHYLENE	(G)	149.391			81.86	S(924)		
C2CL3F3	1,1,2-TRICHLORO-1,2,2-TRIFLUOROETHANE	(G)	187.391	-178.2	C(831)				
C2CL3F3	1,1,1-TRICHLORO-2,2,2-TRIFLUOROETHANE	(G)	187.391			86.37	S(891)		
C2CL3N	TRICHLOROACETONITRILE	(G)	144.399			79.38	S(682)		
C2CL4	TETRACHLOROETHYLENE	(L)	165.848	-12.8	B(1384)				
C2CL4	TETRACHLOROETHYLENE	(G)	165.848	-3.40	T(751)	81.46	T(751)	4.90	-3.592
C2CL4F2	1,1,1,2-TETRACHLORO-2,2-DIFLUOROETHANE	(G)	203.848	-121.1	B(833)	90.85	S(1074)	-101.15	74.145
C2CL40	TRICHLOROACETYL CHLORIDE	(G)	181.848	-67.7	B(1187)				
C2CL5F	PENTACHLOROFLUROETHANE	(G)	220.305	-75.8	E(833)	93.54	S(1074)	-55.93	40.999
C2CL6	HEXACHLOROETHANE	(S)	236.762	-49.3	B(1384)				
C2CL6	HEXACHLOROETHANE	(G)	236.762	-33.80	T(732)	94.77	T(732)	-13.58	9.954
C2F3N	TRIFLUOROACETONITRILE	(G)	95.028			71.22	S(682)		
C2F3N	TRIFLUOROACETONITRILE	(G)	95.028			71.27	M(1098)		
C2F4	TETRAFLUROETHYLENE	(G)	100.020	-157.40	T(714)	71.69	T(714)	-149.07	109.269
C2F6	HEXAFLUROETHANE	(G)	138.020	-321.00	T(708)	79.37	T(708)	-300.52	220.275
C2HBRCLF3	1-BROMO-2-CHLORO-1,1,2-TRIFLUOROETHANE	(G)	197.401	-159.9	C(830)				
C2HBRCLF3	2-BROMO-2-CHLORO-1,1,1-TRIFLUOROETHANE	(G)	197.401			86.77	S(1482)		
C2HBRCL2F2	1-BROMO-1,1-DIFLUORO-2,2-DICHLOROETHANE	(G)	213.858	-111.7	B(833)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_{298}° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole K)	Source	ΔG_{298}° (kcal/mole)	Log K_p
C2HBRF2	2-BROMO-1,1-DIFLUOROETHYLENE	(G)	162.944			75.24	S(1481)		
C2HBRF4	1-BROMO-1,1,2,2-TETRAFLUROETHANE	(G)	180.944	-198.9	B(830)				
C2HBR3	TRIBROMOETHYLENE	(G)	264.776			85.56	S(393)		
C2HBR3O	TRIBROMOACETALDEHYDE	(L)	280.776	-74.9	C(1189)				
C2HCLF2	2-CHLORO-1,1-DIFLUOROETHYLENE	(G)	98.485	-79.2	B(833)	72.28	S(1072)	-72.90	53.433
C2HCL2F	1,1-DICHLORO-2,2-DIFLUOROETHYLENE	(G)	114.942			74.95	S(1033)		
C2HCL2F3	1,2-DICHLORO-1,1,2-TRIFLUOROETHANE	(G)	152.942	-167.3	B(832)				
C2HCL2F3	2,2-DICHLORO-1,1,1-TRIFLUOROETHANE	(G)	152.942			84.10	S(891)		
C2HCL3	TRICHLOROETHYLENE	(L)	131.399	-9.6	B(1384)				
C2HCL3	TRICHLOROETHYLENE	(G)	131.399	-1.40	T(750)	77.63	T(750)	4.75	-3.482
C2HCL3O	DICHLOROACETYL CHLORIDE	(S)	147.399	-68.2	B(1187)				
C2HCL3O	TRICHLOROACETALDEHYDE	(L)	147.399	-56.4	C(1189)				
C2HCL3O2	TRICHLOROACETIC ACID	(S)	163.399	-121.7	B(1384)				
C2HCL5	PENTACHLOROETHANE	(L)	202.313	-45.3	B(1384)				
C2HCL5	PENTACHLOROETHANE	(G)	202.313	-34.00	T(731)	90.95	T(731)	-15.93	11.678
C2HF3	TRIFLUOROETHYLENE	(G)	82.028	-118.50	T(713)	69.94	T(713)	-112.22	82.257
C2HN5	TETRAZOLE-5-CARBONITRILE	(S)	95.068	96.1	B(1616)				
C2H2	ACETYLENE	(G)	26.036	54.19	T(314)	48.00	T(314)	50.00	-36.646
C2H2BRF3	2-BROMO-1,1,1-TRIFLUOROETHANE	(G)	162.952			80.22	S(1075)		
C2H2BR2	1,2-DIBROMOETHYLENE, CIS	(G)	185.868			74.38	S(346)		
C2H2BR2	1,2-DIBROMOETHYLENE, TRANS	(G)	185.868			74.90	S(346)		
C2H2CLF	1-CHLORO-1-FLUROETHYLENE	(G)	80.493			67.71	S(921)		
C2H2CLF3	2-CHLORO-1,1,1-TRIFLUOROETHANE	(G)	118.493			78.05	S(1073)		
C2H2CL2	1,1-DICHLOROETHYLENE	(L)	96.950	-6.00	A(1359)	48.17	M(599)	5.64	-4.136
C2H2CL2	1,1-DICHLOROETHYLENE	(G)	96.950	0.30	T(747)	68.85	T(747)	5.78	-4.235
C2H2CL2	1,2-DICHLOROETHYLENE, CIS	(L)	96.950	-6.7	B(1384)				
C2H2CL2	1,2-DICHLOROETHYLENE, CIS	(G)	96.950	0.45	T(748)	69.20	T(748)	5.82	-4.268
C2H2CL2	1,2-DICHLOROETHYLENE, TRANS	(L)	96.950	-6.1	B(1384)				
C2H2CL2	1,2-DICHLOROETHYLENE, TRANS	(G)	96.950	1.00	T(749)	69.29	T(749)	6.35	-4.652
C2H2CL2O	CHLOROACETYL CHLORIDE	(L)	112.950	-68.5	B(1187)				
C2H2CL2O2	DICHLOROACETIC ACID	(L)	128.950	-119.7	B(1384)				
C2H2CL3NO	TRICHLOROACETAMIDE	(S)	162.415	-86.6	B(1384)				

III

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_{298}° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole K)	Source	ΔG_{298}° (kcal/mole)	Log Kp
C2H2CL4	1,1,2,2-TETRACHLOROETHANE	(G)	167.864	-36.50	T(730)	86.69	T(730)	-20.45	14.992
C2H2CL4	1,1,1,2-TETRACHLOROETHANE	(G)	167.864			85.07	S(1071)		
C2H2F2	1,1-DIFLUOROETHYLENE	(G)	64.036	-82.50	T(712)	63.38	T(712)	-76.84	56.319
C2H2F2O2	DIFLUOROACETIC ACID	(L)	96.036	-207.5	C(1249)				
C2H2I2	DIiodoETHYLENE, CIS	(G)	279.856			79.81	S(1205)		
C2H2I2	DIiodoETHYLENE, TRANS	(G)	279.856			80.11	S(1205)		
C2H2O	KETENE	(G)	42.036	-14.60	T(557)	57.79	T(557)	-14.41	10.561
C2H2O2	GLYOXAL	(L)	58.036	-83.7	C(1249)				
C2H2O4	OXALIC ACID	(S)	90.036	-198.36	A(1612)	28.70	M(1108)	-167.58	122.833
C2H3BR	BROMOETHYLENE	(G)	106.960	18.73	T(772)	65.83	T(772)	19.30	-14.144
C2H3BR0	ACETYL BROMIDE	(L)	122.960	-53.2	A(198)				
C2H3BR3O2	TRIBROMOACETALDEHYDE								
C2H3BR3O2	MONOHYDRATE	(S)	298.792	-113.0	C(1249)				
C2H3CL	CHLOROETHYLENE	(G)	62.501	8.40	T(746)	63.08	T(746)	12.31	-9.021
C2H3CLF2	1-CHLORO-1,1-DIFLUOROETHYLENE	(G)	100.501			73.61	S(979)		
C2H3CLO	ACETYL CHLORIDE	(L)	78.501	-65.5	A(1187)				
C2H3CLO	ACETYL CHLORIDE	(G)	78.501	-58.30	T(758)	70.47	T(758)	-49.29	36.130
C2H3CLO	CHLOROACETALDEHYDE	(L)	78.501	-61.3	C(1249)				
C2H3CLO2	CHLOROACETIC ACID	(S)	94.501	-122.6	B(1384)				
C2H3CLO2F	1,1-DICHLORO-1-FLUOROETHANE	(S)	116.958			76.49	S(1376)		
C2H3CL3	1,1,1-TRICHLOROETHANE	(L)	133.415			54.37	M(1261)		
C2H3CL3	1,1,1-TRICHLOROETHANE	(G)	133.415			77.09	S(776)		
C2H3CL3	1,1,2-TRICHLOROETHANE	(L)	133.415	-42.7	B(1354)				
C2H3CL3	1,1,2-TRICHLOROETHANE	(G)	133.415	-33.10	T(729)	80.57	T(729)	-18.52	13.575
C2H3CL3O2	TRICHLOROACETALDEHYDE								
C2H3CL3O2	MONOHYDRATE	(S)	165.415	-132.2	C(1249)				
C2H3FO	ACETYL FLUORIDE	(L)	62.044	-111.4	A(1188)				
C2H3FO	ACETYL FLUORIDE	(G)	62.044	-105.2	A(1188)				
C2H3FO2	FLUOROACETIC ACID	(S)	78.044	-162.3	C(1249)				
C2H3F2NO	DIFLUOROACETAMIDE	(S)	95.052	-167.8	C(1249)				
C2H3F3	1,1,1-TRIFLUOROETHANE	(G)	84.044	-178.20	T(707)	68.66	T(707)	-162.23	118.915
C2H3F3	1,1,2-TRIFLUOROETHANE	(G)	84.044	-158.9	A(833)				
C2H3F3O	2,2,2-TRIFLUOROETHANOL	(L)	100.044	-207.6	A(798)				
C2H3I	IODoETHYLENE	(G)	153.954			68.04	S(1224)		
C2H3IO	ACETYL IODIDE	(L)	169.954	-39.0	A(198)				
C2H3IO	ACETYL IODIDE	(G)	169.954	12.7	C(1249)	35.76	M(1209)	23.63	-17.321

XI

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_{298}° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole K)	Source	ΔG_{298}° (kcal/mole)	Log Kp
C2H3N	ACETONITRILE	(G)	41.052	21.00	T(617)	58.19	T(617)	25.24	-18.503
C2H3N	METHYL ISOCYANIDE	(L)	41.052	28.1	C(1249)				
C2H3N	METHYL ISOCYANIDE	(G)	41.052	35.9	C(1249)	58.98	S(1148)	39.91	-29.252
C2H3NO	GLYCLONITRILE	(L)	57.052	-34.1	C(1249)				
C2H3NO	METHYL ISOCYANATE	(L)	57.052	-21.5	C(1249)				
C2H3NO3	OXAMIC ACID	(S)	89.052	-161.4	C(1249)				
C2H3NS	METHYL ISOTHIOCYANATE	(S)	73.118	18.7	A(1443)				
C2H3NS	METHYL ISOTHIOCYANATE	(G)	73.118			69.29	S(909)		
C2H3NS	METHYL THIOCYANATE	(L)	73.118	25.1	C(1249)				
C2H3N3O6	1,1,1-TRINITROETHANE	(S)	165.068	-27.53	A(1193)				
C2H3N5O2	3-NITRAMINO-1,2,4-TRIAZOLE	(S)	129.084	26.9	B(1616)				
C2H4	ETHYLENE	(G)	28.052	12.50	T(261)	52.45	T(261)	16.28	-11.936
C2H4BR2	1,2-DIBROMOETHANE	(L)	187.884	-19.3	A(1249)	53.37	M(1151)	-4.94	3.622
C2H4BR2	1,2-DIBROMOETHANE	(G)	187.884	-9.30	T(761)	78.81	T(761)	-2.53	1.852
C2H4CLNO	CHLOROACETAMIDE	(S)	93.517	-81.1	B(1384)				
C2H4CL2	1,1-DICHLOROETHANE	(L)	98.966	-38.42	T(727)	50.61	M(862)	-18.20	13.339
C2H4CL2	1,1-DICHLOROETHANE	(G)	98.966	-31.05	T(727)	72.89	T(727)	-17.47	12.806
C2H4CL2	1,2-DICHLOROETHANE	(L)	98.966	-39.44	T(728)	49.84	M(1151)	-18.99	13.919
C2H4CL2	1,2-DICHLOROETHANE	(G)	98.966	-31.00	T(728)	73.66	T(728)	-17.65	12.938
C2H4FNO	2-FLUOROACETAMIDE	(S)	77.060	-117.7	C(1249)				
C2H4F2	1,1-DIFLUOROETHANE	(G)	66.052	-118.00	T(706)	67.52	T(706)	-104.26	76.424
C2H4F2N2O2	2,2-DIFLUORO-N-NITRO-								
C2H4F2N2O2	ETHYLAMINE	(L)	126.068	-118.9	C(1249)				
C2H4F2O	2,2-DIFLUOROLTHANOL	(L)	82.052	-164.2	C(1249)				
C2H4I2	1,2-DIiodoETHANE	(S)	281.872	0.2	R(1)				
C2H4I2	1,2-DIiodoETHANE	(G)	281.872	15.90	T(779)	83.30	T(779)	18.76	-13.753
C2H4N2O	2-URETIDINONE	(S)	72.068	-77.7	B(1472)				
C2H4N2O2	FORMYLUREA	(L)	88.068	-117.5	C(1249)				
C2H4N2O2	GLYOXIME	(S)	88.068	-21.1	B(1013)				
C2H4N2O2	OXAMIDE	(S)	88.068	-121.2	C(1249)	28.23	M(374)	-81.94	60.059
C2H4N2O2	OXAMIDE	(G)	88.068			72.56	M(374)		
C2H4N2O4	1,1-DINITROETHANE	(L)	120.068	-34.67	A(1193)				
C2H4N2O4	1,2-DINITROETHANE	(S)	120.068	-43.9	B(984)				
C2H4N2O6	ETHYLENE DINITRATE	(L)	152.068	-58.02	C(1230)				
C2H4N4	3-AMINO-1,2,4-TRIAZOLE	(S)	84.084	18.4	B(1616)				
C2H4N4	CYANOGUANIDINE	(S)	84.084	7.14	A(1275)	30.90	M(1411)	44.64	-32.721

X

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole K)	Source	$\Delta G_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Log Kp
C2H4N4O	5-METHOXYTETRAZOLE	(S)	100.084	16.5	B(1616)				
C2H4N4O2	1,1'-AZOBISFORMAMIDE	(S)	116.084	-69.9	B(1616)				
C2H4N4O2	URAZINE	(S)	116.084	-63.0	B(1640)				
C2H4N1O	5,5'-HYDRAZODITETRAZOLE	(S)	168.132	135.0	C(974)				
C2H4O	ACETALDEHYDE	(L)	44.052	-45.9	A(245)				
C2H4O	ACETALDEHYDE	(G)	44.052	-39.76	T(545)	63.15	T(545)	-31.86	23.353
C2H4O	ETHYLENE OXIDE	(L)	44.052	-18.5	T(513)	36.76	M(997)	-2.73	2.003
C2H4O	ETHYLENE OXIDE	(G)	44.052	-12.58	T(513)	57.94	T(513)	-3.13	2.292
C2H4O5	THIOACETIC ACID	(L)	76.118	-52.39	A(1447)				
C2H4O5	THIOACETIC ACID	(G)	76.118	-43.49	T(918)	74.86	T(918)	-36.81	26.979
C2H4O2	ACETIC ACID	(L)	60.052	-115.7	A(389)	38.20	M(1108)	-93.06	68.209
C2H4O2	ACETIC ACID	(G)	60.052	-103.93	T(560)	67.52	T(560)	-90.03	65.989
C2H4O2	METHYL FORMATE	(L)	60.052	-90.4	C(1249)				
C2H4O2	METHYL FORMATE	(G)	60.052	-83.6	T(561)	72.0	T(561)	-71.03	52.067
C2H4O3	GLYCOLIC ACID	(S)	76.052	-158.1	C(1249)				
C2H4S	THIACYCLOPROPANE	(L)	60.118	12.41	A(1447)				
C2H4S	THIACYCLOPROPANE	(G)	60.118	19.65	T(882)	61.01	T(882)	23.16	-16.974
C2H5BR	BROMOETHANE	(L)	108.976	-21.9	T(760)				
C2H5BR	BROMOETHANE	(G)	108.976	-15.30	T(760)	68.71	T(760)	-6.29	4.608
C2H5CL	CHLOROETHANE	(L)	64.517	-32.5	T(726)	45.60	M(518)	-14.08	10.318
C2H5CL	CHLOROETHANE	(G)	64.517	-26.70	T(726)	65.93	T(726)	-14.34	10.509
C2H5CLO	2-CHLOROETHANOL	(L)	80.517	-70.3	C(1249)				
C2H5F	FLUOROETHANE	(G)	48.060	-62.50	T(705)	63.32	T(705)	-50.08	36.709
C2H5FO	2-FLUOROETHANOL	(L)	64.060	-111.1	C(1249)				
C2H5F2N	2,2-DIFLUOROETHYLAMINE	(L)	81.068	-118.3	C(1249)				
C2H5I	IODOETHANE	(L)	155.970	-9.7	T(778)				
C2H5I	IODOETHANE	(G)	155.970	-2.00	T(778)	70.82	T(778)	5.10	-3.737
C2H5N	ETHYLENIMINE	(L)	43.068	21.96	A(1052)				
C2H5N	ETHYLENIMINE	(G)	43.068	29.50	T(611)	59.90	T(611)	42.54	-31.180
C2H5NO	ACETALDEHYDE OXIME	(S)	59.068	-18.2	C(1249)				
C2H5NO	ACETAMIDE	(L)	59.068	-75.9	B(188)				
C2H5NO2	ETHYL NITRITE	(G)	75.068	-24.8	C(1249)				
C2H5NO2	GLYCINE	(S)	75.068	-128.4	A(666)	24.74	M(665)	-90.27	66.165
C2H5NO2	GLYCINE	(S)	75.068	-126.33	A(653)	24.74	M(665)	-88.20	64.647
C2H5NO2	NITROETHANE	(L)	75.068	-34.33	A(1193)				
C2H5NO2	NITROETHANE	(G)	75.068	-24.20	T(624)	75.39	T(624)	-1.17	0.857

IX

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Log Kp
C2H5NO3	ETHYL NITRATE	(L)	91.068	-45.5	A(405)	59.08	M(529)	-10.30	7.551
C2H5NO3	ETHYL NITRATE	(G)	91.068	-36.80	T(631)	83.25	T(631)	-8.81	6.456
C2H5NO3	2-NITROETHANOL	(S)	91.068	-83.6	B(983)				
C2H5N3O	2-AZIDOETHANOL	(L)	87.084	22.47	A(401)				
C2H5N3O6	1,1,1-TRINITROPROPANE	(L)	179.094	-28.06	A(1193)				
C2H5N5	5-AMINO-1H-METHYL TETRAZOLE	(S)	99.100	46.2	B(1616)				
C2H5N5	5-AMINO-2H-METHYL TETRAZOLE	(S)	99.100	50.4	B(1616)				
C2H5N5	AMINO-5-METHYL TETRAZOLE	(S)	99.100	48.4	B(1616)				
C2H5N5O3	3-AMINO-1,2,4-TRIAZOLE NITRATE(S)	(S)	147.100	-40.9	C(1616)				
C2H5N5O3	1-(NITROAMINO)SEMICARBAZIDE(S)	(S)	147.100	-35.1	B(1616)				
C2H5N7	(TETRAZOL-5-YL)GUANIDINE	(S)	127.116	40.6	B(974)				
C2H6	ETHANE	(G)	30.068	-20.24	T(102)	54.85	T(102)	-7.87	5.765
C2H6N2O	N-NITROSODIMETHYLAMINE	(L)	74.084	0.7	C(1249)				
C2H6N2O2	N-NITROETHYLAMINE	(L)	90.084	-20.6	B(1039)				
C2H6N2O2	N-NITRODIMETHYLAMINE	(S)	90.084	-19.9	B(1039)				
C2H6N2O2	N-NITRODIMETHYLAMINE	(S)	90.084	-17.0	B(1621)				
C2H6N2O5	GLYCINE NITRATE	(S)	138.084	-173.6	C(277)				
C2H6N4O2	BIUREA	(S)	118.100	-119.2	B(1616)				
C2H6N4O2	OXALYL DIHYDRAZIDE	(S)	118.100	-70.5	B(747)				
C2H6N4O4	N,N'-DINITROETHYLENEDIAMINE (S)	(S)	150.100	-24.7	B(985)				
C2H6N6O3	1-(NITROAMINO)SEMICARBAZIDE(S)	(S)	162.116	-80.1	B(204)				
C2H6O	ETHYL ALCOHOL	(L)	46.068	-66.20	A(215)	38.40	M(733)	-41.62	30.504
C2H6O	ETHYL ALCOHOL	(G)	46.068	-56.12	T(518)	67.54	T(518)	-40.22	29.483
C2H6O	METHYL ETHER	(G)	46.068	-43.99	T(501)	63.83	T(501)	-26.99	19.781
C2H6O5	METHYL SULFOXIDE	(L)	78.134	-47.2	B(908)				
C2H6O5	METHYL SULFOXIDE	(G)	78.134	-34.6	B(908)				
C2H6O2	ETHYLENE GLYCOL	(L)	62.068	-108.73	A(1121)	39.9	M(1108)	-77.29	56.651
C2H6O2	ETHYLENE GLYCOL	(G)	62.068	-93.05	T(542)	77.33	T(542)	-72.77	53.337
C2H6O2	ETHYL HYDROPEROXIDE	(L)	62.068	-58.0	C(1406)				
C2H6O2	METHYL PEROXIDE	(G)	62.068	-30.0	B(64)				
C2H6O2S	METHYL SULFONE	(L)	94.134	-107.5	B(908)	34.77	M(1595)	-72.25	52.960
C2H6O2S	METHYL SULFONE	(G)	94.134	-89.1	B(908)				
C2H6O4	BIS(HYDROXYMETHYL) PEROXIDE (S)	(S)	94.068	-163.7	B(685)				
C2H6S	ETHANETHIOL	(L)	62.134	-17.60	A(958)	49.48	A(958)	-1.35	0.989
C2H6S	ETHANETHIOL	(G)	62.134	-11.02	T(891)	70.77	T(891)	-1.12	0.818
C2H6S	METHYL SULFIDE	(L)	62.134	-15.63	A(958)	46.94	M(1092)	1.38	-1.010

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Log Kp
C2H6S	METHYL SULFIDE	(G)	62.134	-8.97	T(800)	68.32	T(800)	1.66	-1.220
C2H6S2	1,2-ETHANEDITHIOL	(L)	94.200	-12.83	A(925)				
C2H6S2	1,2-ETHANEDITHIOL	(G)	94.200	-2.15	A(925)				
C2H6S2	METHYL DISULFIDE	(L)	94.200	-14.96	A(627)	56.26	M(1302)	1.54	-1.132
C2H6S2	METHYL DISULFIDE	(G)	94.200	-5.77	T(872)	80.46	T(872)	3.52	-2.580
C2H7Cl	METHYL ETHER HYDROCHLORIDE	(G)	82.533	-71.1	C(1249)	89.3	C(1249)	-49.09	35.986
C2H7N	DIMETHYLAMINE	(L)	45.084	-10.50	A(678)				
C2H7N	DIMETHYLAMINE	(G)	45.084	-4.50	T(607)	65.24	T(607)	16.25	-11.913
C2H7N	ETHYLAMINE	(L)	45.084	-17.71	A(678)				
C2H7N	ETHYLAMINE	(G)	45.084	-11.00	T(602)	68.08	T(602)	8.91	-6.528
C2H7NO	2-AMINOETHANOL	(L)	61.084	-65.6	B(1354)				
C2H7NO3S	2-AMINOETHANESULFONIC ACID	(S)	125.150	-187.8	C(1249)	36.8	M(652)	-134.38	98.497
C2H7N9O2	GUANIDINE SALT OF								
C2H7N9O2	5-NITRAMINOTETRAZOLE	(S)	189.148	26.6	B(974)				
C2H8N2	1,1-DIMETHYLHYDRAZINE	(L)	60.100	11.9	A(336)	47.86	M(46)	49.31	-36.143
C2H8N2	1,1-DIMETHYLHYDRAZINE	(G)	60.100	20.3	(CALC)	72.82	M(46)	50.27	-36.846
C2H8N2	1,2-DIMETHYLHYDRAZINE	(L)	60.100	12.1	A(336)	47.60	M(37)	49.59	-36.347
C2H8N2	1,2-DIMETHYLHYDRAZINE	(G)	60.100	21.5	A(41)	74.39	M(37)	51.00	-37.382
C2H8N2	ETHYLENEDIAMINE	(L)	60.100	-6.36	C(1249)				
C2H8N2O3	DIMETHYLAMINE NITRATE	(S)	108.100	-79.0	C(277)				
C2H8N2O3	ETHYLAMINE NITRATE	(S)	108.100	-86.9	C(277)				
C2H8N2O4	2-AMINOETHANOL NITRATE	(S)	124.100	-137.6	C(277)				
C2H8N2O4	AMMONIUM OXALATE	(S)	124.100	-268.7	C(1249)				
C2H8N100	1-AMINO-4-(5-TETRAZOLYL)-								
C2H8N100	TETRAZENE HYDRATE	(S)	188.164	45.2	B(1616)				
C2H10N2O	ETHYLENEDIAMINE MONOHYDRATE	(S)	78.116	-77.1	C(1249)				
C2H10N4O6	ETHYLENEDIAMINE DINITRATE	(S)	186.132	-155.8	B(981)				
C2H12N6O4	DIAMMONIUM SALT OF								
C2H12N6O4	N,N'-DINITROETHYLENEDIAMINE	(S)	184.164	-80.1	B(986)				
C2I2	DIIDOACETYLENE	(G)	277.840			74.80	S(1649)		
C2I4	TETRAIODOETHYLENE	(S)	531.660	73.0	C(1249)				
C2N2	CYANOGEN	(G)	52.036	73.84	T(21)	57.90	T(21)	71.03	-52.067
C2N2S	SULFUR DICYANIDE	(G)	84.102			71.81	S(1144)		
C2N6O12	HEXANITROETHANE	(S)	300.068	28.6	B(1079)				

P 0126

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Log Kp
C3Cl2F6	1,1,2,3,3,3-HEXAFLUOROPROPANE	(G)	220.944	-313.3	C(832)				
C3Cl3N3	CYANURIC CHLORIDE	(S)	184.425	21.9	A(663)				
C3F6	HEXAFLUOROPROPENE	(G)	150.030	-266.2	C(360)				
C3F8	OCTAFLUOROPROPANE	(G)	188.030	-417.9	E(833)				
C3H2N2	MALONONITRILE	(S)	66.062	44.6	C(744)				
C3H2N2	MALONONITRILE	(G)	66.062	59.7	(CALC)	69.05	S(567)	63.28	-46.384
C3H2N2O3	IMIDAZOLIDINETRIONE	(S)	114.062	-138.0	C(744)				
C3H2O	PROPYNAL	(G)	54.046			65.66	S(1211)		
C3H3Br	1-BROMOPROPYNE	(G)	118.970			70.61	S(1649)		
C3H3Br	3-BROMOPROPYNE	(G)	118.970			72.24	S(396)		
C3H3Cl	1-CHLOROPROPYNE	(G)	74.511			67.89	S(1649)		
C3H3Cl	3-CHLOROPROPYNE	(G)	74.511			69.46	S(396)		
C3H3Cl3O2	METHYL TRICHLOROACETATE	(L)	177.425	-111.8	B(1384)				
C3H3I	1-IODOPROPYNE	(G)	165.964			72.42	S(1649)		
C3H3N	ACRYLONITRILE	(L)	53.062	35.9	A(314)				
C3H3N	ACRYLONITRILE	(G)	53.062	44.20	T(618)	65.47	T(618)	46.68	-34.219
C3H3NO2	CYANOACETIC ACID	(S)	85.062	-85.6	C(744)				
C3H3N3	5-TRIAZINE	(S)	81.078	40.2	6(1549)				
C3H3N3O3	CYANURIC ACID	(S)	129.078	-165.1	6(1549)				
C3H3N5O4	4-METHYL-3,5-DINITROTRIAZOLE	(S)	173.094	29.35	A(1193)				
C3H4	ALLENE	(G)	40.062	45.92	T(304)	58.30	T(304)	48.37	-35.452
C3H4	CYCLOPROPENE	(G)	40.062	66.0	A(1608)	58.38	S(1607)	68.42	-50.153
C3H4	PROPYNE	(G)	40.062	44.32	T(315)	59.30	T(315)	46.47	-34.060
C3H4Cl2	DICHLOROCYCLOPROPANE	(U,L)	110.976	-71.0	C(744)				
C3H4Cl2O2	METHYL DICHLOROACETATE	(L)	142.976	-116.1	B(1384)				
C3H4N2	IMIDAZOLE	(S)	68.078	14.53	A(96)				
C3H4N2	IMIDAZOLE	(G)	68.078	30.5	B(96)				
C3H4N2	PYRAZOLE	(S)	68.078	28.32	A(96)				
C3H4N2	PYRAZOLE	(G)	68.078	43.3	B(96)				
C3H4N2O	CYANOACETAMIDE	(S)	84.078	-42.3	C(744)				
C3H4N2O5	THIOHYDANTOIN	(S)	116.144	-59.6	C(744)				
C3H4N2O5	2-THIOHYDANTOIN	(S)	116.144	-224.95	C(744)				
C3H4N2O2	HYDANTOIN	(S)	100.078	-106.9	C(744)				
C3H4N2O4	OXALURIC ACID	(S)	132.078	-211.2	C(744)				
C3H4N4O	N-ACETYLTETRAZOLE	(S)	112.094	19.6	B(1557)				
C3H4O	ACROLEIN	(L)	56.062	-29.17	C(744)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C3H40	ACROLEIN	(L)	56.062	-25.09	C(744)				
C3H40	2-PROPYN-1-OL	(L)	56.062	-5.2	C(843)				
C3H40	2-PROPYN-1-OL	(G)	56.062	10.1	C(744)				
C3H402	ACRYLIC ACID	(L)	72.062	-91.8	T(556)				
C3H402	ACRYLIC ACID	(G)	72.062	-80.36	T(564)	75.29	T(564)	-68.37	50.113
C3H402	METHYLGLYOXAL	(L)	72.062	-73.9	B(1031)				
C3H402	BETA-PROPIOLACTONE	(L)	72.062	-78.85	A(146)				
C3H402	BETA-PROPIOLACTONE	(G)	72.062	-67.61	A(146)				
C3H403	ETHYLENE CARBONATE	(S)	88.062	-138.8	A(1349)				
C3H403	HYDROXYMALONALDEHYDE	(S)	88.062	-120.7	B(385)				
C3H403	PYRUVIC ACID	(L)	88.062	-139.7	C(744)	42.9	F(1634)	-110.75	81.176
C3H404	MALONIC ACID	(S)	104.062	-212.97	A(1612)				
C3H405	TARTRONIC ACID	(S)	120.062	-253.4	C(744)				
C3H406	DIHYDROXYMALONIC ACID	(S)	136.062	-290.6	C(744)				
C3H58R	3-BROMOPROPENE	(G)	120.986	11.80	T(773)	75.80	T(773)	19.11	-14.004
C3H5CL	3-CHLOROPROPENE	(G)	76.527	-0.15	T(752)	73.29	T(752)	10.42	-7.641
C3H5CLO	1-CHLORO-2,3-EPOXYPROPANE	(L)	92.527	-35.6	A(141)				
C3H5CLO	2-CHLORO-2-PROPEN-1-OL	(S)	92.527	-88.3	C(843)				
C3H5CLO2	2-CHLOROPROPIONIC ACID	(L)	108.527	-125.4	B(1384)				
C3H5CLO2	3-CHLOROPROPIONIC ACID	(S)	108.527	-131.5	B(1384)				
C3H5CLO2	METHYL CHLORUACETATE	(L)	108.527	-111.4	B(1384)				
C3H5CL3	1,2,3-TRICHLOROPROPANE	(L)	147.441	-55.65	A(141)				
C3H5CL3	1,2,3-TRICHLOROPROPANE	(G)	147.441	-44.40	T(738)	91.52	T(738)	-23.37	17.132
C3H5I	3-IODO-1-PROPENE	(L)	167.980	14.0	B(466)				
C3H5I	3-IODO-1-PROPENE	(G)	167.980	22.90	T(785)	76.46	T(785)	28.72	-21.053
C3H5IO2	2-IODOPROPIONIC ACID	(L)	199.980	-109.8	A(1251)				
C3H5N	ETHYL ISOCYANIDE	(L)	55.078	28.0	C(744)				
C3H5N	PROPIONITRILE	(L)	55.078	3.5	C(744)	45.25	M(1583)	21.31	-15.622
C3H5N	PROPIONITRILE	(G)	55.078	12.10	T(619)	68.50	T(619)	22.98	-16.844
C3H5NO	ETHYL ISOCYANATE	(L)	71.078	-28.2	C(744)				
C3H5NO	LACTONITRILE	(L)	71.078	-31.6	C(744)				
C3H5NO2	PYRUALDEHYDE OXIME	(S)	87.078	-50.0	C(1056)				
C3H5NO3	METHYL OXAMATE	(S)	103.078	-147.4	C(744)				
C3H5NO4	METHYL NITROACETATE	(L)	119.078	-110.9	B(1640)				
C3H5NS	ETHYL ISOTHIOCYANATE	(L)	87.144	7.0	C(744)				
C3H5NS	ETHYL THIOCYANATE	(L)	87.144	17.0	C(744)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C3H5N3O9	NITROGLYCERINE	(L)	227.094	-89.0	B(1474)				
C3H5N5O	5-ACETAMIDOTETRAZOLE	(S)	127.110	-1.8	B(974)				
C3H5N5O2	3-NITRAMINO-5-METHYL- 1,2,4-TRIAZOLE	(S)	143.110	12.7	B(1616)				
C3H6	CYCLOPROPANE	(G)	42.078	12.74	T(338)	56.75	T(338)	24.95	-18.291
C3H6	PROPENE	(G)	42.078	4.88	T(262)	63.80	T(262)	14.99	-10.989
C3H6BR2	1,2-DIBROMOPROPANE	(G)	201.910	-17.40	T(764)	89.90	T(764)	-4.22	3.094
C3H6CL2	1,2-DICHLOROPROPANE	(L)	112.992	-48.3	T(735)				
C3H6CL2	1,2-DICHLOROPROPANE	(G)	112.992	-39.60	T(735)	84.80	T(735)	-19.86	14.558
C3H6CL2	1,3-DICHLOROPROPANE	(L)	112.992	-48.3	B(1384)				
C3H6CL2	1,3-DICHLOROPROPANE	(G)	112.992	-38.60	T(736)	87.76	T(736)	-19.74	14.472
C3H6CL2	2,2-DICHLOROPROPANE	(L)	112.992	-49.65	B(1384)				
C3H6CL2	2,2-DICHLOROPROPANE	(G)	112.992	-42.00	T(737)	77.92	T(737)	-20.21	14.813
C3H6CL2O	1,3-DICHLORO-2-PROPANOL	(L)	128.992	-92.4	A(141)				
C3H6CL2O	2,3-DICHLORO-1-PROPANOL	(L)	128.992	-91.4	A(141)				
C3H6I2	1,2-DIIODOPROPANE	(G)	295.898	8.60	T(782)	94.60	T(782)	17.81	-13.051
C3H6N2O2	ACETYLUREA	(S)	102.094	-126.0	C(744)				
C3H6N2O2	MALONAMIDE	(S)	102.094	-130.0	B(1471)				
C3H6N2O2	MALONAMIDE	(S)	102.094	-128.0	C(744)				
C3H6N2O2	METHYLGLYOXIME	(S)	102.094	-29.6	B(1013)				
C3H6N2O2S	N-CARBAMOYLTHIOGLYCINE	(S)	134.160	-132.5	C(744)				
C3H6N2O3	HYDANTOIC ACID	(S)	118.094	-178.0	C(744)				
C3H6N2O4	1,1-DINITROPROPANE	(L)	134.094	-40.04	A(1193)				
C3H6N2O4	1,1-DINITROPROPANE	(L)	134.094	-40.8	B(613)				
C3H6N2O4	1,3-DINITROPROPANE	(L)	134.094	-53.5	B(613)				
C3H6N2O4	2,2-DINITROPROPANE	(S)	134.094	-45.71	A(1193)				
C3H6N2O4	2,2-DINITROPROPANE	(S)	134.094	-44.9	B(613)				
C3H6N4	1,5-DIMETHYLTETRAZOLE	(S)	98.110	45.1	B(974)				
C3H6N4O	1,4-DIMETHYL- 2-TETRAZOLIN-5-ONE	(S)	114.110	6.7	B(1616)				
C3H6N6	MELAMINE	(S)	126.126	-15.35	A(1275)	35.63	M(1411)	44.10	-32.323
C3H6N6O3	HEXAHYDRO-1,3,5-TRINITROSO- S-TRIAZINE	(S)	174.126	69.1	B(320)				
C3H6N6O3	HEXAHYDRO-1,3,5-TRINITROSO- S-TRIAZINE	(S)	174.126	67.8	B(981)				

IAX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_{298}° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_{298}° (kcal/mole)	Log Kp
C3H6N6O3	S-TRIAZINE	(S)	174.126	66.0	B(1640)				
C3H6N6O6	HEXAHYDRO-1,3,5-TRINITRO-S-TRIAZINE (ROX)	(S)	222.126	13.6	B(1640)				
C3H6N6O6	HEXAHYDRO-1,3,5-TRINITRO-S-TRIAZINE (ROX)	(S)	222.126	16.8	B(184)				
C3H6N6O6	HEXAHYDRO-1,3,5-TRINITRO-S-TRIAZINE (ROX)	(S)	222.126	16.9	B(320)				
C3H6O	ACETONE	(L)	58.078	-59.3	T(554)	47.9	M(734)	-37.14	27.225
C3H6O	ACETONE	(G)	58.078	-52.00	T(554)	70.49	T(554)	-36.58	26.811
C3H6O	ALLYL ALCOHOL	(L)	58.078	-44.6	C(744)				
C3H6O	ALLYL ALCOHOL	(G)	58.078	-31.55	T(541)	73.51	T(541)	-17.03	12.481
C3H6O	PROPIONALDEHYDE	(L)	58.078	-52.95	A(1508)				
C3H6O	PROPIONALDEHYDE	(G)	58.078	-45.90	T(546)	72.83	T(546)	-31.18	22.851
C3H6O	PROPYLENE OXIDE	(L)	58.078	-28.84	A(1356)	46.91	M(1083)	-6.39	4.682
C3H6O	PROPYLENE OXIDE	(G)	58.078	-22.17	T(514)	68.53	T(514)	-6.16	4.517
C3H6O	TRIMETHYLENE OXIDE	(G)	58.078	-19.25	A(1133)	65.46	S(1652)	-2.33	1.706
C3H6O2	1,3-DIOXOLANE	(L)	74.078	-80.7	A(431)				
C3H6O2	ETHYL FORMATE	(L)	74.078	-95.44	C(744)				
C3H6O2	ETHYL FORMATE	(G)	74.078	-88.74	C(744)				
C3H6O2	GLYCIDOL	(L)	74.078	-71.3	A(141)				
C3H6O2	LACTALDEHYDE	(S)	74.078	-105.0	C(249)				
C3H6O2	METHYL ACETATE	(L)	74.078	-105.5	B(262)				
C3H6O2	METHYL ACETATE	(G)	74.078	-97.9	B(940)				
C3H6O2	PROPIONIC ACID	(L)	74.078	-122.1	A(853)				
C3H6O2S	2-MERCAPTOPROPIONIC ACID	(L)	106.144	-111.9	B(646)	54.70	M(646)	-82.19	60.243
C3H6O3	DIMETHYL CARBONATE	(L)	90.078	-146.6	C(744)				
C3H6O3	GLYCERALDEHYDE, D,L	(S)	90.078	-148.9	E(1057)				
C3H6O3	LACTIC ACID, D	(S)	90.078			34.3	M(649)		
C3H6O3	LACTIC ACID, L	(S)	90.078	-165.89	A(1279)	34.00	M(649)	-124.98	91.607
C3H6O3	LACTIC ACID, D,L	(L)	90.078	-161.2	C(744)	45.9	M(1117)	-123.84	90.769
C3H6O3	TRIOXYMETHYLENE, S	(S)	90.078	-124.4	B(320)				
C3H6S	1,2-EPITHIOPROPANE	(L)	74.144	2.77	A(1447)				
C3H6S	1,2-EPITHIOPROPANE	(G)	74.144	11.02	A(1447)				
C3H6S	THIACYCLOBUTANE	(L)	74.144	6.04	T(883)	44.72	M(1304)	24.12	-17.677

IAX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_{298}° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_{298}° (kcal/mole)	Log Kp
C3H6S	THIACYCLOBUTANE	(G)	74.144	14.61	T(883)	68.17	T(883)	25.69	-18.834
C3H7BR	1-BROMOPROPANE	(L)	123.002	-28.8	T(762)				
C3H7BR	1-BROMOPROPANE	(G)	123.002	-21.00	T(762)	79.08	T(762)	-5.37	3.934
C3H7BR	2-BROMOPROPANE	(L)	123.002	-30.7	T(763)				
C3H7BR	2-BROMOPROPANE	(G)	123.002	-23.20	T(763)	75.53	T(763)	-6.51	4.771
C3H7CL	1-CHLOROPROPANE	(L)	78.543	-38.0	T(733)				
C3H7CL	1-CHLOROPROPANE	(G)	78.543	-31.10	T(733)	76.27	T(733)	-12.11	8.876
C3H7CL	2-CHLOROPROPANE	(L)	78.543	-41.5	T(734)				
C3H7CL	2-CHLOROPROPANE	(G)	78.543	-35.00	T(734)	72.70	T(734)	-14.94	10.954
C3H7CLO2	2-CHLORO-1,3-PROPANEDIOL	(L)	110.543	-123.8	A(141)				
C3H7CLO2	3-CHLORO-1,2-PROPANEDIOL	(L)	110.543	-125.6	A(141)				
C3H7F	1-FLUOROPROPANE	(G)	62.086	-67.20	T(709)	72.71	T(709)	-47.87	35.087
C3H7F	2-FLUOROPROPANE	(G)	62.086	-69.00	T(710)	69.82	T(710)	-48.81	35.775
C3H7I	1-IODOPROPANE	(L)	169.996	-15.9	T(780)				
C3H7I	1-IODOPROPANE	(G)	169.996	-7.30	T(780)	80.32	T(780)	6.68	-4.894
C3H7I	2-IODOPROPANE	(L)	169.996	-18.7	T(781)				
C3H7I	2-IODOPROPANE	(G)	169.996	-10.00	T(781)	77.55	T(781)	4.80	-3.521
C3H7N	ALLYLAMINE	(L)	57.094	3.93	C(744)				
C3H7N	ALLYLAMINE	(G)	57.094	6.88	C(744)				
C3H7NO	ACETONE OXIME	(S)	73.094	-30.80	C(744)				
C3H7NO	PROPIONAMIDE	(S)	73.094	-81.1	C(744)				
C3H7NO2	ALANINE, D	(S)	89.094	-134.03	A(650)	31.6	M(644)	-88.23	64.672
C3H7NO2	ALANINE, D,L	(S)	89.094	-134.72	A(653)	31.6	M(648)	-88.92	65.178
C3H7NO2	ALANINE, L	(S)	89.094	-134.5	A(666)	30.88	M(665)	-88.49	64.860
C3H7NO2	ETHYL CARBAMATE	(S)	89.094	-123.8	C(744)				
C3H7NO2	1-NITROPROPANE	(L)	89.094	-40.15	T(625)				
C3H7NO2	1-NITROPROPANE	(G)	89.094	-29.80	T(625)	85.00	T(625)	0.08	-0.056
C3H7NO2	2-NITROPROPANE	(L)	89.094	-43.3	T(626)				
C3H7NO2	2-NITROPROPANE	(G)	89.094	-33.50	T(626)	83.10	T(626)	-3.06	2.240
C3H7NO2	SARCOSINE	(S)	89.094	-121.3	B(164)				
C3H7NO2S	CYSTEINE, L	(S)	121.160	-127.6	B(646)	40.6	M(647)	-82.21	60.258
C3H7NO3	ISOPROPYL NITRATE	(L)	105.094	-54.92	A(405)				
C3H7NO3	ISOPROPYL NITRATE	(G)	105.094	-45.65	T(633)	89.20	T(633)	-9.72	7.125
C3H7NO3	ISOSERINE	(S)	105.094	-177.0	C(744)				
C3H7NO3	PROPYL NITRATE	(L)	105.094	-51.27	A(405)				
C3H7NO3	PROPYL NITRATE	(G)	105.094	-41.60	T(632)	42.10	T(632)	-6.53	4.790

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole K)	Source	$\Delta G_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Log Kp
C3H7NO3	SERINE, L	(S)	105.094	-173.6	C(668)	45.63	M(668)	-121.70	89.207
C3H7N3S	ACETALDEHYDE THIOSEMICARBAZONE(S)	(S)	117.176	15.0	B(1446)				
C3H7N5	5-(DIMETHYLAMINO)TETHAZOLE . (S)	(S)	113.126	43.7	B(1616)				
C3H7N5	1-METHYL-5-(METHYL-AMINO)TETRAZOLE . (S)	(S)	113.126	47.8	B(1616)				
C3H7N5O3	1-ACETAMIDO-2-NITROGUANIDINE (S)	(S)	161.126	-46.3	B(1616)				
C3H7N5O3	3-AMINO-5-METHYL-1,2,4-TRIAZOLE NITRATE (S)	(S)	161.126	-54.6	B(1616)				
C3H7N5O5	1-(2-NITROXYETHYL)-3-NITROGUANIDINE (S)	(S)	193.126	-48.9	B(1040)				
C3H7N5O5	2-AMINO-1-NITROIMIDAZOLINE NITRATE (S)	(S)	193.126	-59.3	B(1040)				
C3H8	PROPANE,	(G)	44.094	-24.82	T(103)	64.51	T(103)	-5.61	4.115
C3H8N2O	ETHYLUREA	(S)	88.110	-83.2	C(744)				
C3H8N2O2	PROPYL NITRAMINE	(L)	104.110	-25.8	B(1039)				
C3H8N2O3	1,3-BIS(HYDROXYMETHYL)UREA . (S)	(S)	120.110	-170.78	A(1275)				
C3H8N4O2	MALONYL DIHYDRAZIDE	(S)	132.126	-79.4	B(747)				
C3H8N6O3	1,3-DIMETHYL-5-IMINOTETRAZOLE NITRATE (S)	(S)	176.142	-1.3	B(1616)				
C3H8O	ETHYL METHYL ETHER	(G)	60.094	-51.73	T(502)	74.24	T(502)	-28.12	20.611
C3H8O	ISOPROPYL ALCOHOL	(L)	60.094	-76.0	T(520)	43.16	M(20)	-43.12	31.609
C3H8O	ISOPROPYL ALCOHOL	(G)	60.094	-65.15	T(520)	74.07	T(520)	-41.49	30.411
C3H8O	PROPYL ALCOHOL	(L)	60.094	-72.79	A(215)	46.1	M(159)	-40.79	29.898
C3H8O	PROPYL ALCOHOL	(G)	60.094	-61.55	T(519)	77.63	T(519)	-38.95	28.550
C3H8O2	DIMETHOXYMETHANE	(L)	76.094	-92.3	C(744)	58.32	M(973)	-56.64	41.515
C3H8O2	DIMETHOXYMETHANE	(G)	76.094			80.24	M(973)		
C3H8O2	2-METHOXYETHANOL	(L)	76.094	-114.8	C(1351)				
C3H8O2	1,2-PROPANEDIOL	(L)	76.094	-119.3	B(1032)				
C3H8O2	PROPYL HYDROPEROXIDE	(L)	76.094	-76.1	C(1406)				
C3H8O2S	ETHYL METHYL SULFONE	(L)	108.160	-116.2	B(186)				
C3H8O2S	ETHYL METHYL SULFONE	(G)	108.160	-97.9	B(186)				
C3H8O3	GLYCEROL	(L)	92.094	-159.8	A(1121)	48.87	M(4)	-114.02	83.572
C3H8S	ETHYL METHYL SULFIDE	(L)	76.160	-21.89	A(638)	57.14	M(1308)	1.79	-1.311
C3H8S	ETHYL METHYL SULFIDE	(G)	76.160	-14.25	T(801)	79.62	T(801)	2.73	-1.998
C3H8S	1-PROPANETHIOL	(L)	76.160	-23.87	A(638)	57.96	M(1136)	-0.44	0.320
C3H8S	1-PROPANETHIOL	(G)	76.160	-16.22	T(892)	80.40	T(892)	0.52	-0.384

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole K)	Source	$\Delta G_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Log Kp
C3H8S	2-PROPANETHIOL	(L)	76.160	-25.30	A(638)	55.82	M(955)	-1.23	0.900
C3H8S	2-PROPANETHIOL	(G)	76.160	-18.22	T(893)	77.51	T(893)	-0.61	0.451
C3H8S2	1,3-PROPANEDITHIOL	(L)	108.226	-18.84	A(925)				
C3H8S2	1,3-PROPANEDITHIOL	(G)	108.226	-6.97	A(925)				
C3H9N	PROPYLAMINE	(L)	59.110	-24.8	T(603)				
C3H9N	PROPYLAMINE	(G)	59.110	-17.30	T(603)	77.48	T(603)	9.51	-6.974
C3H9N	TRIMETHYLAMINE	(L)	59.110	-10.94	A(678)				
C3H9N	TRIMETHYLAMINE	(G)	59.110	-5.70	T(609)	69.02	T(609)	23.64	-17.325
C3H9N5O4	ACETIC ACID								
C3H9N5O4	2-AMIDINOHYDRAZIDE NITRATE (S)	(S)	179.142	-118.0	B(1616)				
C3H9N6O3	TRINITROSOTRIMETHYLENETRIAMINE(S)	(S)	177.150	-68.0	B(320)				
C3H9N6O6	TRINITROTRIMETHYLENETHIAMINE (S)	(S)	225.150	-15.7	B(320)				
C3H10N2	TRIMETHYLHYDRAZINE	(L)	74.126			56.34	M(48)		
C3H10N2	TRIMETHYLHYDRAZINE	(G)	74.126			80.00	M(48)		
C3H10N2O3	TRIMETHYLAMINE NITRATE	(S)	122.126	-73.1	C(277)				
C3H12N6O3	GUANIDINE CARBONATE	(S)	180.174	-232.13	A(641)	70.59	M(649)	-133.27	97.688
C3H12N6O3	GUANIDINE CARBONATE	(S)	180.174	-230.8	B(985)	70.59	M(649)	-131.94	96.713
C3N2O	CARBONYL CYANIDE	(L)	80.046	49.5	B(493)				
C3O	CARBON SUBOXIDE	(L)	68.030	-28.03	A(819)				
C3O	CARBON SUBOXIDE	(G)	68.030	-22.34	T(22)	66.05	T(22)	-26.25	19.237
C4F12F6	1,2-DICHLORO-1,2,3,3,4,4-HEXAFLUOROCYCLOBUTANE (G)	(G)	232.954	-289.4	C(50)				
C4F6	HEXAFLUOROCYCLOBUTANE	(G)	162.040	-289.4	C(50)				
C4F6	HEXAFLUORO-1,3-BUTADIENE	(G)	162.040	-240.0	C(50)				
C4F8	OCTAFLUOROCYCLOBUTANE	(G)	200.040	-365.20	T(711)	95.69	T(711)	-334.83	24,057
C4F10	DECAFLUOROBUTANE	(G)	238.040	-516.0	E(833)				
C4F10	DECAFLUOROISOBUTANE	(G)	238.040	-524.1	E(833)				
C4H14N	2,3,4,5-TETRAIDOPYRROLE	(S)	570.696	92.81	C(744)				
C4H2	1,3-DIADYNE	(G)	50.056	113.00	T(316)	59.76	T(316)	106.11	-77.778
C4H2	1-TIAZOLECARBONITRILE	(S)	110.138	52.64	A(927)				
C4H2	1-TIAZOLECARBONITRILE	(G)	110.138	70.31	A(927)				
C4H2O	MALLEIC ANHYDRIDE	(S)	98.056	-112.43	A(1612)				
C4H4O	ACETYLENEDICARBOXYLIC ACID . (S)	(S)	114.056	-138.1	A(432)				
C4H6	1-BUTENE-1-ENE	(G)	52.072	72.80	T(317)	66.77	T(317)	73.13	-23,601
C4H6N	N-BROMOSUCCINIMIDE	(S)	177.946	-80.35	A(618)				

XX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298} (cal/mole K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C4H4CLN02	N-CHLOROSUCCINIMIDE	(S)	133.537	+85.58	A(618)				
C4H4N2	PYRAZINE	(S)	80.088	33.4	A(1507)				
C4H4N2	PYRAZINE	(G)	80.088	46.86	A(1507)				
C4H4N2	PYRIDAZINE	(L)	80.088	53.7	A(1507)				
C4H4N2	PYRIDAZINE	(G)	80.088	66.53	A(1507)				
C4H4N2	PYRIMIDINE	(L)	80.088	35.0	A(1507)				
C4H4N2	PYRIMIDINE	(G)	80.088	46.99	A(1507)				
C4H4N2	SUCCINONITRILE	(S)	80.088	33.24	C(744)	45.79	M(1633)	53.47	-39.191
C4H4N2	SUCCINONITRILE	(G)	80.088	20.1	C(1628)	79.04	M(1633)	30.41	-22.293
C4H4N2O2	5-METHYLHYDANTION	(S)	112.088	-55.6	B(1471)				
C4H4N2O3	BARBITURIC ACID	(S)	128.088	-153.9	C(744)				
C4H4N2O4	N-NITROSUCCINIMIDE	(S)	144.088	-77.1	B(1640)				
C4H4N2O5	ALLOXAN MONOHYDRATE	(S)	160.088	-239.19	A(1471)	44.6	M(1422)	-182.08	133.463
C4H4N8O14	BIS(TRINITROETHYL)NITRAZINE (S)		388.136	-32.7	B(1640)				
C4H4O	FURAN	(L)	68.072	-14.90	A(551)	42.22	M(551)	0.05	-0.038
C4H4O	FURAN	(G)	68.072	-8.29	T(515)	63.86	T(515)	0.21	-0.154
C4H4O2	3-BUTYNOIC ACID	(S)	84.072	-55.2	B(432)				
C4H4O2	METHYL PROPIOLATE	(L)	84.072	-33.9	R(432)				
C4H4O2	TETROLIC ACID	(S)	84.072	-60.1	C(744)				
C4H4O3	SUCCINIC ANHYDRIDE	(S)	100.072	-142.9	R(1538)				
C4H4O4	FUMARIC ACID, TRANS	(S)	116.072	-193.85	A(1612)	39.7	M(1104)	-156.23	114.515
C4H4O4	MALEIC ACID, CIS	(S)	116.072	-188.96	A(1612)	38.1	M(1104)	-150.86	110.581
C4H4S	THIOPHENE	(L)	84.138	19.37	A(1444)	43.30	M(1548)	28.97	-21.234
C4H4S	THIOPHENE	(G)	84.138	27.66	T(887)	66.65	T(887)	30.30	-22.208
C4H5CL3O2	ETHYL TRICHLOROACETATE	(L)	191.451	-115.8	R(1384)				
C4H5N	ALLYL ISOCYANIDE	(L)	67.088	62.6	C(744)				
C4H5N	3-BUTENENITRILE	(L)	67.088	26.4	C(744)				
C4H5N	CROTONONITRILE	(L)	67.088	25.3	C(744)				
C4H5N	CROTONONITRILE, TRANS (G)		67.088			71.31	S(1635)		
C4H5N	CYCLOPROPANE CARBONITRILE (L)		67.088	35.0	C(744)				
C4H5N	CYCLOPROPANE CARBONITRILE (G)		67.088			79.78	S(304)		
C4H5N	ISOCROTONONITRILE	(L)	67.088	27.3	C(744)				
C4H5N	PYRRDLE	(L)	67.088	21.2	C(744)				
C4H5NO	2-METHYLISOXAZOLE	(L)	83.088	-5.6	C(1467)				
C4H5NO	4-METHYLISOXAZOLE	(L)	83.088	-4.1	C(1467)				
C4H5NO2	METHYL CYANOACETATE	(L)	99.088	-75.1	C(744)				

IXX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298} (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C4H5N02	SUCCINIMIDE	(S)	99.088	-109.72	A(247)				
C4H5N5	ALLYL ISOTHIOCYANATE	(L)	99.154	42.0	C(744)				
C4H5N5	ALLYL ISOTHIOCYANATE	(G)	99.154	55.0	C(744)				
C4H5N5	4-METHYLTHIAZOLE	(L)	99.154	16.32	A(927)				
C4H5N5	4-METHYLTHIAZOLE	(G)	99.154	26.80	A(927)				
C4H5N3	IMINOACETONITRILE	(L)	95.104	44.0	C(744)				
C4H5N3O3	AMINOCARBITURIC ACID	(U,S)	143.104	-167.7	C(744)				
C4H6	1,2-BUTADIENE	(L)	54.088	33.2	(CALC)	50.10	M(44)	47.80	-35.038
C4H6	1,2-BUTADIENE	(G)	54.088	38.77	T(305)	70.03	T(305)	47.43	-34.766
C4H6	1,3-BUTADIENE	(L)	54.088	20.4	(CALC)	47.58	M(1327)	35.75	-26.207
C4H6	1,3-BUTADIENE	(G)	54.088	26.33	T(306)	66.62	T(306)	36.01	-26.393
C4H6	1-BUTYNE	(L)	54.088	33.8	(CALC)	49.08	M(39)	48.71	-35.701
C4H6	1-BUTYNE	(G)	54.088	39.48	T(318)	69.51	T(318)	48.30	-35.400
C4H6	2-BUTYNE	(L)	54.088	28.65	(CALC)	46.63	M(1638)	44.29	-32.462
C4H6	2-BUTYNE	(G)	54.088	34.97	T(319)	67.71	T(319)	44.32	-32.487
C4H6	CYCLOBUTENE	(G)	54.088	31.00	T(344)	62.98	T(344)	41.76	-30.611
C4H6CL2O2	ETHYL DICHLOROACETATE	(L)	157.002	-119.6	B(1384)				
C4H6F2O2	DIFLUOROETHYL ACETATE	(U,L)	124.088	-211.5	C(744)				
C4H6F2O2	ETHYL DIFLUOROACETATE	(L)	124.088	-230.5	C(744)				
C4H6N2O2	5-METHYLHYDANTOIN	(S)	114.104	-105.0	B(1471)				
C4H6N2O2	5-METHYLHYDANTOIN	(S)	114.104	-115.3	B(1471)				
C4H6N2O2	2,5-PIPERAZINEDIONE	(S)	114.104	-105.8	C(744)				
C4H6N4O2	(ETHANEDIYLIDENE)DIUREA	(S)	142.120	-116.8	B(1472)				
C4H6N4O3	ALLANTOIN	(S)	158.120	-171.50	A(1421)	46.6	M(1421)	-106.65	78.171
C4H6N4O6	OIMETHYL OINITROXAMIDE	(S)	206.120	-73.1	B(985)				
C4H6N4O7	N-(1,1-DINITROETHYL)- 1-NITROACETALDOXIME (S)		222.120	-38.8	B(1640)				
C4H6N4O7	(2-HYDROXYETHYL)-N'-NITRO- OXAMIDE NITRATE (S)		222.120	-132.7	B(984)				
C4H6N4O8	2,2,3,3-TETRANITROBUTANE	(S)	238.120	1.4	B(1001)				
C4H6N4O11	NITROISOBUTANETRIOLTRINITRATE(S)		286.120	-54.6	H(981)				
C4H6N8	5,5'-ETHYLENEBISTETRAZOLE	(S)	166.152	106.2	B(1616)				
C4H6N10	5,5'-AZOBIS- (1-METHYLTETRAZOLE), CIS (S)		194.168	188.6	B(1616)				
C4H6N10	5,5'-AZOBIS- (1-METHYLTETRAZOLE), TRANS (S)		194.168	189.3	B(1616)				

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole K)	Source	$\Delta G_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Log Kp
C4H6N10	5,5'-AZOBIS(2-METHYLTETRAZOLE)	(S)	194.168	180.40	B(1616)				
C4H6O	CROTONALDEHYDE	(L)	70.088	-34.45	A(1506)				
C4H6O	METHYL 2-PROPYNYL ETHER	(G)	70.088	19.7	C(744)				
C4H6O	VINYL ETHER	(G)	70.088	-3.03	A(1146)				
C4H6O2	ALLYL FORMATE	(G)	86.088	-55.4	C(744)				
C4H6O2	2,3-BUTANEDIONE	(L)	86.088	-87.60	A(1112)				
C4H6O2	2,3-BUTANEDIONE	(L)	86.088	-87.35	A(1067)				
C4H6O2	2,3-BUTANEDIONE	(L)	86.088	-86.36	A(1403)				
C4H6O2	2,3-BUTANEDIONE	(G)	86.088	-78.2	(CALC)				
C4H6O2	2-BUTYNE-1,4-DIOL	(S)	86.088	-54.3	C(843)				
C4H6O2	CROTONIC ACID	(S)	86.088	-103.1	C(744)				
C4H6O2	CYCLOPROPANECARBOXYLIC ACID	(S)	86.088	-101.1	C(744)				
C4H6O2	CYCLOPROPANECARBOXYLIC ACID	(S)	86.088	-97.5	C(744)				
C4H6O2	4-HYDROXYBUTYRIC ACID	(L)	86.088	-99.20	C(843)				
C4H6O2	GAMMA LACTONE	(L)	86.088	-103.9	C(1364)				
C4H6O2	METHACRYLIC ACID	(L)	86.088	-83.6	B(334)				
C4H6O2	VINYL ACETATE	(L)	86.088	-83.6	B(334)				
C4H6O2S	2,5-DIHYDROTHIOPHENE	(L)	118.154	-76.2	B(906)				
C4H6O2S	1,1-DIOXIDE	(L)	118.154	-76.2	B(906)				
C4H6O2S	2,5-DIHYDROTHIOPHENE	(G)	118.154	-61.2	B(906)				
C4H6O3	1,1-DIOXIDE	(G)	118.154	-61.2	B(906)				
C4H6O3	ACETIC ANHYDRIDE	(L)	102.088	-149.14	A(1558)	64.2	M(968)	-116.83	85.632
C4H6O3	ACETIC ANHYDRIDE	(G)	102.088	-137.60	T(562)	93.20	T(562)	-113.93	83.511
C4H6O4	ACETYL PEROXIDE	(L)	118.088	-127.9	B(679)				
C4H6O4	DIMETHYL OXALATE	(S)	118.088	-179.9	C(744)				
C4H6O4	METHYLMALONIC ACID	(S)	118.088	-218.8	C(744)				
C4H6O4	SUCCINIC ACID	(S)	118.088	-224.88	A(1612)	42.0	M(1104)	-178.64	130.942
C4H6O5	MALIC ACID, D,L	(S)	134.088	-264.27	A(1612)				
C4H6O5	MALIC ACID, L	(S)	134.088	-263.78	A(1612)				
C4H6O6	ACETYLENEDICARBOXYLIC ACID	(S)	150.088	-278.4	A(432)				
C4H6O6	ACID DIHYDRATE	(S)	150.088	-278.4	A(432)				
C4H6O6	TARTARIC ACID, D	(S)	150.088	-300.4	B(358)				
C4H6O6	TARTARIC ACID, D,L (RACEMIC)	(S)	150.088	-305.5	B(358)				
C4H6O6	TARTARIC ACID, MESO	(S)	150.088	-301.0	B(358)				
C4H6S	2,3-DIHYDROTHIOPHENE	(L)	86.154	12.82	A(309)				
C4H6S	2,3-DIHYDROTHIOPHENE	(G)	86.154	21.84	A(309)				

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Log Kp
C4H6S	2,5-DIHYDROTHIOPHENE	(L)	86.154	11.37	A(309)				
C4H6S	2,5-DIHYDROTHIOPHENE	(G)	86.154	20.92	A(309)				
C4H7ClO2	2-CHLOROBUTYRIC ACID	(L)	122.553	-137.9	B(1384)				
C4H7ClO2	3-CHLOROBUTYRIC ACID	(L)	122.553	-133.3	B(1384)				
C4H7ClO2	4-CHLOROBUTYRIC ACID	(L)	122.553	-135.8	B(1384)				
C4H7ClO2	ETHYL CHLOROACETATE	(L)	122.553	-120.8	B(1384)				
C4H7ClO2	METHYL 2-CHLOROPROPIONATE	(L)	122.553	-117.3	B(1384)				
C4H7ClO2	METHYL 3-CHLOROPROPIONATE	(L)	122.553	-118.9	B(1384)				
C4H7FO2	ETHYL FLUOROACETATE	(L)	106.096	-155.2	C(744)				
C4H7FO2	FLUOROETHYL ACETATE	(U,L)	106.096	-158.3	C(744)				
C4H7F4N	TETRAFLUORODIETHYLAMINE	(U,L)	145.104	-220.6	C(744)				
C4H7N	BUTYRONITRILE	(L)	69.104	-1.39	A(388)				
C4H7N	BUTYRONITRILE	(G)	69.104	8.14	T(620)	77.78	T(620)	25.97	-19.032
C4H7N	ISOBUTYRONITRILE	(L)	69.104	-2.92	A(388)				
C4H7N	ISOBUTYRONITRILE	(G)	69.104	6.07	T(621)	74.88	T(621)	24.76	-18.149
C4H7NO	2-PYRROLIDINONE	(S)	85.104			32.7	M(794)		
C4H7NO3	ETHYL OXAMATE	(S)	117.104	-158.0	C(744)				
C4H7NO4	ASPARTIC ACID, L	(S)	133.104	-232.64	A(664)	40.66	M(664)	-174.53	127.925
C4H7NO4	DIGLYCOLIAMIDIC ACID	(S)	133.104	-219.0	C(744)				
C4H7N3O	CREATININE	(S)	113.120	-57.01	A(650)	40.0	M(644)	-6.97	5.109
C4H7N3O8	2-METHYL-2-NITRO-1,3-PROPANEDIOL DINITRATE	(S)	225.120	-93.1	B(984)				
C4H7N5	1-ALLYL-5-AMINOTETRAZOLE	(S)	125.136	63.4	B(1616)				
C4H7N5	2-ALLYL-5-AMINOTETRAZOLE	(S)	125.136	67.6	B(1616)				
C4H7N5O2	ETHYL 5-TETRAZOLECARBAMATE	(S)	157.136	-52.6	B(974)				
C4H8	1-BUTENE	(G)	56.104	-0.03	T(263)	73.04	T(263)	17.04	-12.489
C4H8	2-BUTENE, CIS	(G)	56.104	-1.67	T(264)	71.90	T(264)	15.74	-11.536
C4H8	2-BUTENE, TRANS	(G)	56.104	-2.67	T(265)	70.86	T(265)	15.05	-11.030
C4H8	CYCLOBUTANE	(L)	56.104	0.74	A(267)	43.44	M(1215)	26.63	-19.522
C4H8	CYCLOBUTANE	(G)	56.104	6.37	T(339)	63.43	T(339)	26.30	-19.280
C4H8	2-METHYLPROPENE	(G)	56.104	-4.04	T(266)	70.17	T(266)	13.88	-10.177
C4H8BR2	1,2-DIBROMOBUTANE	(L)	215.936	-34.5	T(768)				
C4H8BR2	1,2-DIBROMOBUTANE	(G)	215.936	-23.70	T(768)	97.70	T(768)	-3.14	2.299
C4H8BR2	2,3-DIBROMOBUTANE	(G)	215.936	-24.40	T(769)	94.40	T(769)	-2.85	2.091
C4H8I2	1,2-DIIODOBUTANE	(G)	309.924	2.85	T(784)	101.80	T(784)	19.62	-14.381
C4H8N2O2	DIMETHYLGLYOXIME	(S)	116.120	-41.7	B(1013)				

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_f^{\circ}_{298}$ (kcal/mole)	Source	S°_{298} (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_f^{\circ}_{298}$ (kcal/mole)	Log K_p
C4H8N2O2	SUCCINAMIDE	(S)	116.120	-140.0	C (744)				
C4H8N2O3	ASPARAGINE, L	(S)	132.120	-188.70	A (650)	41.7	M (644)	-126.73	92.889
C4H8N2O3	GLYCYLGLYCINE	(S)	132.120	-178.12	A (643)	45.4	M (642)	-117.25	85.942
C4H8N2O4	TARTARAMIDE, D	(L)	148.120	-222.3	C (744)				
C4H8N2O4	TARTARAMIDE, MESO	(L)	148.120	-222.7	C (744)				
C4H8N2S	1-ALLYL-2-THIOUREA	(S)	116.186	-1.5	C (744)				
C4H8N4O8	2,2'-(NITROIMINO)- DIETHANOL DINITRATE (S)	(S)	240.136	-72.1	B (1471)				
C4H8N4O8	2,2'-(NITROIMINO)- DIETHANOL DINITRATE (S)	(S)	240.136	-78.1	B (984)				
C4H8N8O8	OCTAHYDRO-1,3,5,7-TETRAZINIO- 1,3,5,7-TETRAZOCINE (HMX) (S)	(S)	296.168	17.93	A(1193)				
C4H8O	ALLYL METHYL ETHER	(G)	72.104	-25.5	C (744)				
C4H8O	2-BUTANONE	(L)	72.104	-65.31	A (538)	57.08	M (538)	-36.18	26.518
C4H8O	2-BUTANONE	(G)	72.104	-56.97	T (555)	80.81	T (555)	-34.91	25.591
C4H8O	BUTYRALDEHYDE	(L)	72.104	-57.06	T (547)	59.00	M(1109)	-28.50	20.890
C4H8O	BUTYRALDEHYDE	(G)	72.104	-49.00	T (547)	82.44	T (547)	-27.43	20.105
C4H8O	ETHYL VINYL ETHER	(G)	72.104	-33.50	A(1146)				
C4H8O	2-METHYLPROPIONALDEHYDE	(L)	72.104	-59.8	A(1508)				
C4H8O	TETRAHYDROFURAN	(L)	72.104	-51.68	A(1133)				
C4H8O	TETRAHYDROFURAN	(G)	72.104	-44.03	A(1133)				
C4H8O2	ETHYL THIOACETATE	(L)	104.170	-64.0	A(1554)				
C4H8O2	2-BUTENE-1,4-DIOL	(L)	88.104	-93.3	C (843)				
C4H8O2	RUTYRIC ACID	(L)	88.104	-127.6	A (853)	54.1	M(1105)	-90.27	66.170
C4H8O2	M-DIOXANE	(L)	88.104	-92.1	B(1391)				
C4H8O2	M-DIOXANE	(G)	88.104	-83.6	B(1391)				
C4H8O2	P-DIOXANE	(L)	88.104	-84.50	A(1391)	46.67	M (677)	-44.96	32.954
C4H8O2	P-DIOXANE	(G)	88.104	-75.30	T (516)	71.65	T (516)	-43.21	31.670
C4H8O2	ETHYL ACETATE	(L)	88.104	-114.49	A(1555)	62.0	M(1106)	-79.52	58.287
C4H8O2	ETHYL ACETATE	(G)	88.104	-105.86	T (563)	86.70	T (563)	-78.25	57.359
C4H8O2	3-HYDROXYBUTYRALDEHYDE	(L)	88.104	-102.9	C (744)				
C4H8O2	ISOBUTYRIC ACID	(L)	88.104	-132.1	C (744)				
C4H8O2	2-METHYL-1,3-DIOXOLANE	(L)	88.104	-90.3	C (744)				
C4H8O2	METHYL PROPIONATE	(L)	88.104	-113.04	C (843)				
C4H8O2S	ALLYL METHYL SULFONE	(L)	120.170	-91.5	B (186)				
C4H8O2S	ALLYL METHYL SULFONE	(G)	120.170	-72.6	B (186)				

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_f^{\circ}_{298}$ (kcal/mole)	Source	S°_{298} (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_f^{\circ}_{298}$ (kcal/mole)	Log K_p
C4H8O3	2-HYDROXYBUTYRIC ACID	(S)	104.104	-161.7	C (744)				
C4H8O3	HYDROXY-2-METHYLPROPIONIC- ACID	(U,S)	104.104	-177.7	C (744)				
C4H8O3	METHYL LACTATE	(L)	104.104	-152.3	C (744)				
C4H8S	1,2-EPITHIO-2-METHYLPROPANE (L)	(L)	88.170	-5.79	A(1447)				
C4H8S	1,2-EPITHIO-2-METHYLPROPANE (G)	(G)	88.170	2.76	A(1447)				
C4H8S	2,3-EPITHIOBUTANE, CIS	(L)	88.170	-5.79	A(1447)				
C4H8S	2,3-EPITHIOBUTANE, CIS	(G)	88.170	2.76	A(1447)				
C4H8S	2,3-EPITHIOBUTANE, TRANS	(L)	88.170	-7.03	A(1447)				
C4H8S	2,3-EPITHIOBUTANE, TRANS	(G)	88.170	0.92	A(1447)				
C4H8S	THIACYCLOPENTANE	(L)	88.170	-17.34	A (309)	49.67	M (628)	8.97	-6.576
C4H8S	THIACYCLOPENTANE	(G)	88.170	-8.08	T (884)	73.94	T (884)	11.00	-8.059
C4H9BR	1-BROMOBUTANE	(L)	137.028	-34.47	A (138)				
C4H9BR	1-BROMOBUTANE	(G)	137.028	-25.65	T (765)	88.39	T (765)	-3.08	2.259
C4H9BR	2-BROMOBUTANE	(L)	137.028	-37.12	A (138)				
C4H9BR	2-BROMOBUTANE	(G)	137.028	-28.70	T (766)	88.50	T (766)	-6.16	4.518
C4H9CL	2-BROMO-2-METHYLPROPANE	(G)	137.028	-32.00	T (767)	79.34	T (767)	-6.73	4.935
C4H9CL	1-CHLOROBUTANE	(L)	92.569	-43.2	B(1384)				
C4H9CL	1-CHLOROBUTANE	(G)	92.569	-35.20	T (739)	85.58	T (739)	-9.27	6.797
C4H9CL	2-CHLOROBUTANE	(L)	92.569	-46.2	B(1384)				
C4H9CL	2-CHLOROBUTANE	(G)	92.569	-38.60	T (740)	85.94	T (740)	-12.78	9.368
C4H9CL	1-CHLORO-2-METHYLPROPANE	(L)	92.569	-45.8	B(1384)				
C4H9CL	1-CHLORO-2-METHYLPROPANE	(G)	92.569	-38.10	T (741)	84.56	T (741)	-11.87	8.700
C4H9CL	-CHLORO-2-METHYLPROPANE	(L)	92.569	-50.8	T (742)				
C4H9CL	-CHLORO-2-METHYLPROPANE	(G)	92.569	-43.80	T (742)	77.00	T (742)	-15.32	11.226
C4H9F	2-FLUORO-2-METHYLPROPANE	(G)	76.112	-82.0	C (843)				
C4H9FN2O2	N-FLUORO-1,1-DIMETHYL- N-NITROETHYLAMINE (L)	(L)	136.128	-31.3	A(1646)				
C4H9FN2O2	N-FLUORO-1-METHYL- N-NITROPROPYLAMINE (L)	(L)	136.128	-38.7	A(1646)				
C4H9FN2O2	N-FLUORO-N-NITROBUTYLAMINE	(L)	136.128	-39.9	A(1646)				
C4H9I	2-IODO-2-METHYLPROPANE	(G)	184.022	-17.60	T (783)	81.79	T (783)	5.65	-4.142
C4H9N	PYRROLIDINE	(L)	71.120	-9.84	A (948)	48.76	M (948)	25.94	-19.016
C4H9N	PYRROLIDINE	(G)	71.120	-0.86	T (612)	73.97	T (612)	27.41	-20.089
C4H9NO	BUTYRAMIDE	(S)	87.120	-87.2	C (744)				
C4H9NO	2-BUTANONE OXIME	(L)	87.120	-37.14	C (744)				

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Log K_p
C4H9NO	ISOBUTYRAMIDE	(S)	87.120	-87.3	C(744)				
C4H9NO2	ISOBUTYL NITRITE	(G)	103.120	-39.10	C(744)				
C4H9NO2	1-NITROBUTANE	(L)	103.120	-46.0	B(613)				
C4H9NO2	1-NITROBUTANE	(G)	103.120	-34.40	T(627)	94.28	T(627)	2.42	-1.775
C4H9NO2	2-NITROBUTANE	(L)	103.120	-49.6	B(613)				
C4H9NO2	2-NITROBUTANE	(G)	103.120	-39.10	T(628)	91.62	T(628)	-1.49	1.089
C4H9NO2	PROPYL CARBAMATE	(S)	103.120	-132.1	B(1640)				
C4H9NO3	2-METHYL-2-NITRO-1-PROPANOL	(S)	119.120	-98.1	B(300)				
C4H9NO3	3-NITRO-2-BUTANOL	(L)	119.120	-93.3	B(300)				
C4H9NO4	2-METHYL-2-NITRO- 1,3-PROPANEDIOL	(S)	135.120	-138.6	B(300)				
C4H9NO5	2-(HYDROXYMETHYL)- 2-NITRO-1,3-PROPANEDIOL	(S)	151.120	-176.5	B(983)				
C4H9NO6	AMMONIUM BITARTRATE, D	(S)	167.120	-341.9	C(744)				
C4H9NO6	AMMONIUM BIRACEMATE	(S)	167.120	-343.1	C(744)				
C4H9NO6	AMMONIUM BITARTRATE, MESO . .	(S)	167.120	-342.4	C(744)				
C4H9NS2	DIHYDRO-5-METHYL-4H- 1,3,5-DITHIAZINE	(L)	135.252	-6.8	C(744)				
C4H9NS2	DIMETHYL METHYLDITHIO- IMIDOCARBONATE	(L)	135.252	-2.1	C(744)				
C4H9NS2	METHYL DIMETHYLDITHIO- CARBAMATE	(S)	135.252	-17.4	C(744)				
C4H9N3O2	CREATINE	(S)	131.136	-128.39	A(650)	45.3	M(644)	-63.32	46.412
C4H9N3S	ACETONE THIOSEMICARBAZONE . .	(S)	131.202	4.6	B(1446)				
C4H9N5O5	2-AMINO-1-NITRO-1,3-DIAZA- CYCLOPENTENE METHYL NITRATE	(S)	207.152	-62.7	B(1040)				
C4H9N5O5	2-AMINO-1-NITRO-5-METHYL- 1,3-DIAZACYCLOPENTENE NITRATE	(S)	207.152	-70.4	B(1040)				
C4H9N5O5	1-(2-NITROXYPROPYL)- 3-NITROGUANIDINE	(S)	207.152	-57.7	B(1040)				
C4H9N5O5	1-(3-NITROXYPROPYL)- 3-NITROGUANIDINE	(S)	207.152	-56.0	B(1040)				
C4H10	BUTANE	(L)	58.120	-35.29	A(1248)	55.2	M(40)	-3.60	2.637
C4H10	BUTANE	(G)	58.120	-30.15	T(104)	74.12	T(104)	-4.10	3.004
C4H10	2-METHYLPROPANE	(L)	58.120	-37.87	A(1248)	52.09	M(38)	-5.25	3.848
C4H10	2-METHYLPROPANE	(G)	58.120	-32.15	T(105)	70.42	T(105)	-4.99	3.661

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Log K_p
C4H10N2	PIPERAZINE	(S)	86.136	-10.93	A(93)				
C4H10N2O	TRIMETHYLUREA	(S)	102.136	-77.9	B(1472)				
C4H10N2O2	NITROBUTYLAMINE	(L)	118.136	-27.7	B(1039)				
C4H10N2O2	N-NITRODIETHYLAMINE	(L)	118.136	-25.6	B(1039)				
C4H10N2O2	N-NITRODIETHYLAMINE	(L)	118.136	-25.4	B(1621)				
C4H10N2O4	ASPARAGINE, L MONOHYDRATE . .	(S)	150.136	-259.7	A(664)	50.10	M(664)	-183.62	134.591
C4H10N2O6	ETHYL METHYLCARBAMATE NITRATE	(S)	182.136	-271.8	B(1471)				
C4H10N4O2	SUCCINYL DIHYDRAZIDE	(S)	146.152	-87.6	B(747)				
C4H10N4O9	BIS(2-HYDROXYETHYLNITRATE) AMMONIUM NITRATE	(S)	258.152	-139.4	B(984)				
C4H10O	BUTYL ALCOHOL	(L)	74.120	-77.87	T(521)	53.95	M(280)	-38.50	28.219
C4H10O	BUTYL ALCOHOL	(G)	74.120	-65.59	T(521)	86.60	T(521)	-36.01	26.397
C4H10O	SEC-BUTYL ALCOHOL	(L)	74.120	-81.9	T(522)				
C4H10O	SEC-BUTYL ALCOHOL	(G)	74.120	-69.86	T(522)	85.81	T(522)	-39.99	29.311
C4H10O	TERT-BUTYL ALCOHOL	(S)	74.120	-87.46	(CALC)	40.84	M(1082)	-44.18	32.383
C4H10O	TERT-BUTYL ALCOHOL	(L)	74.120	-85.87	A(1365)	46.16	M(1082)	-44.18	32.381
C4H10O	TERT-BUTYL ALCOHOL	(G)	74.120	-77.87	T(523)	77.98	T(523)	-45.66	33.471
C4H10O	ETHYL ETHER	(L)	74.120	-66.8	T(503)	60.5	M(1105)	-29.38	21.537
C4H10O	ETHYL ETHER	(G)	74.120	-60.28	T(503)	81.90	T(503)	-29.24	21.434
C4H10O	ISOBUTYL ALCOHOL	(L)	74.120	-79.73	A(215)				
C4H10O	ISOPROPYL METHYL ETHER	(G)	74.120	-60.24	T(505)	80.86	T(505)	-28.89	21.178
C4H10O	METHYL PROPYL ETHER	(G)	74.120	-56.82	T(504)	83.52	T(504)	-26.27	19.252
C4H10O5	ETHYL SULFOXIDE	(L)	106.186	-64.0	B(907)				
C4H10O5	ETHYL SULFOXIDE	(G)	106.186	-49.1	B(907)				
C4H10O2	ACETALDEHYDE DIMETHYL ACETAL	(L)	90.120	-97.4	C(744)				
C4H10O2	1,2-BUTANEDIOL	(L)	90.120	-124.9	C(1032)				
C4H10O2	1,3-BUTANEDIOL	(L)	90.120	-122.9	C(1032)				
C4H10O2	2,3-BUTANEDIOL	(L)	90.120	-129.2	C(1032)				
C4H10O2	ETHYL PEROXIDE	(L)	90.120	-53.4	B(64)				
C4H10O2	ETHYL PEROXIDE	(G)	90.120	-46.1	B(64)				
C4H10O2	2-METHYL-1,2-PROPANEDIOL . . .	(L)	90.120	-128.8	C(1032)				
C4H10O2	TERT-BUTYL HYDROPEROXIDE . . .	(L)	90.120	-70.2	B(807)				
C4H10O2S	ETHYLSULFONE	(L)	122.186	-123.1	B(904)				
C4H10O2S	ETHYLSULFONE	(G)	122.186	-102.9	B(904)				
C4H10O2S	ISOPROPYL METHYL SULFONE . . .	(L)	122.186	-120.4	B(186)				
C4H10O2S	ISOPROPYL METHYL SULFONE . . .	(G)	122.186	-103.3	B(186)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C4H1003	DIETHYLENE GLYCOL	(L)	106.120	-149.7	C(1032)				
C4H1003	TRIMETHYL ORTHOFORMATE	(G)	106.120	-121.1	C(744)				
C4H1004	ERYTHRITOL	(S)	122.120	-217.6	A(1121)	39.9	M(1105)	-152.12	111.505
C4H1006S3	TRIS(METHYLSULFONYL)METHANE	(S)	250.318			72.8	M(311)		
C4H10S	1-BUTANETHIOL	(L)	90.186	-29.79	A(1309)	65.96	M(1309)	0.97	-0.711
C4H10S	1-BUTANETHIOL	(G)	90.186	-21.05	T(894)	89.68	T(894)	2.64	-1.934
C4H10S	2-BUTANETHIOL	(L)	90.186	-31.13	A(956)	64.87	M(956)	-0.04	0.033
C4H10S	2-BUTANETHIOL	(G)	90.186	-23.00	T(895)	87.65	T(895)	1.29	-0.948
C4H10S	ETHYL SULFIDE	(L)	90.186	-28.52	A(631)	64.36	M(1305)	2.72	-1.992
C4H10S	ETHYL SULFIDE	(G)	90.186	-19.95	T(802)	87.96	T(802)	4.25	-3.116
C4H10S	ISOPROPYL METHYL SULFIDE	(L)	90.186	-29.79	A(631)	62.88	M(953)	1.89	-1.384
C4H10S	ISOPROPYL METHYL SULFIDE	(G)	90.186	-21.61	T(803)	85.87	T(803)	3.21	-2.356
C4H10S	2-METHYL-1-PROPANETHIOL	(L)	90.186	-31.54	A(614)	63.66	M(614)	-0.09	0.069
C4H10S	2-METHYL-1-PROPANETHIOL	(G)	90.186	-23.24	T(896)	86.73	T(896)	1.33	-0.973
C4H10S	2-METHYL-2-PROPANETHIOL	(L)	90.186	-33.56	A(963)	58.90	M(963)	-0.69	0.509
C4H10S	2-METHYL-2-PROPANETHIOL	(G)	90.186	-26.17	T(897)	80.79	T(897)	0.17	-0.124
C4H10S	METHYL PROPYL SULFIDE	(L)	90.186	-28.21	A(1309)	65.14	M(1309)	2.79	-2.048
C4H10S	METHYL PROPYL SULFIDE	(G)	90.186	-19.54	T(804)	88.84	T(804)	4.40	-3.224
C4H10S2	1,4-BUTANEDITHIOL	(L)	122.252	-25.12	A(925)				
C4H10S2	1,4-BUTANEDITHIOL	(G)	122.252	-11.90	A(925)				
C4H10S2	ETHYL DISULFIDE	(L)	122.252	-28.69	A(1301)	72.90	M(1307)	2.28	-1.668
C4H10S2	ETHYL DISULFIDE	(G)	122.252	-17.84	T(873)	99.07	T(873)	5.32	-3.902
C4H11N	BUTYLAMINE	(L)	73.136	-30.53	A(387)				
C4H11N	BUTYLAMINE	(G)	73.136	-22.00	T(604)	86.76	T(604)	11.76	-8.619
C4H11N	DIETHYLAMINE	(L)	73.136	-24.79	A(678)				
C4H11N	DIETHYLAMINE	(G)	73.136	-17.30	T(608)	84.18	T(608)	17.23	-12.628
C4H11N	ISOBUTYLAMINE	(L)	73.136	-37.8	C(744)				
C4H11N	SEC-BUTYLAMINE	(L)	73.136	-32.88	A(387)				
C4H11N	SEC-BUTYLAMINE	(G)	73.136	-24.90	T(605)	83.90	T(605)	9.71	-7.118
C4H11N	TERT-BUTYLAMINE	(L)	73.136	-35.95	A(387)				
C4H11N	TERT-BUTYLAMINE	(G)	73.136	-28.65	T(606)	80.76	T(606)	6.90	-5.056
C4H11N02	2,2'-IMINODIETHANOL	(L)	105.136	-112.6	B(1354)				
C4H11N3O3	CREATINE MONOHYDRATE	(S)	149.152	-198.6	C(744)	56.0	M(652)	-120.11	88.038
C4H12BRN	TETRAMETHYLAMMONIUM BROMIDE	(S)	154.060			47.99	M(211)		
C4H12CLN	TETRAMETHYLAMMONIUM CHLORIDE	(S)	109.601			45.58	M(211)		
C4H12IN	TETRAMETHYLAMMONIUM IODIDE	(S)	201.054			49.68	C(843)		

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C4H12N2O3	DIETHYLAMINE NITRATE	(S)	136.152	-98.7	C(277)				
C4H12N2O3	TETRAMETHYLAMMONIUM NITRATE	(S)	136.152	-82.6	B(984)				
C4H12N4	TETRAMETHYL TETRAZENE	(L)	116.168	55.34	B(336)				
C4H13CL2N	TETRAMETHYLAMMONIUM HYDROGEN DICHLORIDE	(S)	146.066			60.63	M(212)		
C4N2	ACETYLENEDICARBONITRILE	(L)	76.056	120.6	A(26)				
C4N2	ACETYLENEDICARBONITRILE	(G)	76.056	127.50	T(23)	69.31	T(23)	122.10	-89.500
C5F11N	UNDECAFLUOROPIPERIDINE	(L)	283.058	-496.3	A(515)	94.02	M(515)	-436.04	319.607
C5F11N	UNDECAFLUOROPIPERIDINE	(G)	283.058	-489.1	A(515)	116.10	M(515)	-435.42	319.155
C5F12	ODECAFLUOROPENTANE	(G)	288.050	-613.6	E(833)				
C5HN3	ETHENETRICARBONITRILE	(S)	103.082	105.0	A(154)				
C5HN3	ETHENETRICARBONITRILE	(G)	103.082	123.9	A(154)				
C5H4N4O	HYPOXANTHENE	(S)	136.114	-26.47	A(1421)	34.8	M(1421)	18.39	-13.480
C5H4N4O	PURINE-8(7H)-ONE	(S)	136.114	-14.7	C(744)				
C5H4N4O2	XANTHINE	(S)	152.114	-90.70	A(1421)	38.5	M(1421)	-39.64	29.054
C5H4O2	2-FURALDEHYDE	(L)	96.082	-46.6	C(1006)	52.10	M(1006)	-26.88	19.705
C5H4O2S	2-THIOPHENECARBOXYLIC ACID	(S)	128.148	-104.6	C(744)				
C5H4O3	CITRACONIC ANHYDRIDE	(L)	112.082	-120.6	A(258)				
C5H4O3	2-FUROIC ACID	(S)	112.082	-119.1	A(1116)				
C5H4O3	ITACONIC ANHYDRIDE	(S)	112.082	-125.1	C(744)				
C5H5CL3O2	ALLYL TRICHLOROACETATE	(L)	203.461	-95.8	B(1384)				
C5H5N	PYRIDINE	(L)	79.098	23.9	A(949)	42.52	M(949)	43.34	-31.766
C5H5N	PYRIDINE	(G)	79.098	33.50	T(613)	67.59	T(613)	45.46	-33.324
C5H5NO	2-PYRROLECARBOXALDEHYDE	(S)	95.098	-24.0	C(1414)				
C5H5NO2S	4-METHYLTHIAZOLE	(L)	143.164	16.32	A(927)				
C5H5NO2S	4-METHYLTHIAZOLE	(G)	143.164	26.80	A(927)				
C5H5NO3	URIC ACID	(S)	169.122	-147.91	A(1421)	41.4	M(1421)	-85.75	62.857
C5H5N5	ADENINE	(S)	135.130	22.94	A(1421)	36.1	M(1421)	71.58	-52.469
C5H5N5O	GUANINE	(S)	151.130	-43.96	A(1421)	38.3	M(1421)	11.33	-8.306
C5H5N7	5-(GUANYLAMINO) TETRAZOLE	(S)	163.146	40.6	B(974)				
C5H6	CYCLOPENTADIENE	(L)	66.098	25.1	B(1580)				
C5H6	CYCLOPENTADIENE	(G)	66.098	32.00	A(762)	64.00	(CALC)	42.86	-31.419
C5H6	3-PENTEN-1-YNE, CIS	(L)	66.098	54.2	A(1364)				
C5H6	3-PENTEN-1-YNE, TRANS	(L)	66.098	54.6	A(1364)				
C5H6CL2O2	ALLYL DICHLOROACETATE	(L)	169.012	-93.4	B(1384)				

VXX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log K_p
C5H6N2	GLUTARONITRILE	(L)	94.114	-77.9	C(744)	17.23 M(134)	35	-1.03	-17.696
C5H6N2	GLUTARONITRILE	(G)	94.114	4.0	C(1628)	18.1 M(134)	235	4.2	-42.677
C5H6N2O	1-ACETYLIMIDAZOLE	(S)	110.114	-27.1	A(1557)				
C5H6N2O	2-PYRROLECARBOXYALDEHYDE OXIME (S)	(S)	110.114	9.7	C(1414)				
C5H6N2O2	5,5-DIMETHYLHYDANTOIN	(S)	126.114	-67.9	H(1471)				
C5H6N2O2	4-METHYLURACIL	(S)	126.114	-108.2	C(744)				
C5H6N2O2	THYMINE	(S)	126.114	-109.5	C(744)				
C5H6N2O3	5-METHYLIMIDAZOLIDINE TRIOXIME (S)	(S)	142.114	-131.6	C(744)				
C5H6N4O4	5-SFUODURIC ACID	(L+S)	186.131	-221.8	C(744)				
C5H6N8O13	4-IS(TRINITROETHYL)URACIL	(S)	386.162	-77.9	C(1640)				
C5H6O	2-METHYLFURAN	(L)	82.098			1.12 M(11)	90		
C5H6O2	ETHYL PROPIONATE	(L)	98.098	-40.4	C(744)				
C5H6O2	FURFURYL ALCOHOL	(L)	98.098	-66.05	A(1116)	1.50 M(11)	96	-6.45	27.010
C5H6O2	3-PENTENOIC ACID	(S)	98.098	-67.8	A(432)				
C5H6O3	GLUTARIC ANHYDRIDE	(S)	114.098	-146.9	C(744)				
C5H6O3	METHYLSUCCINIC ANHYDRIDE	(S)	114.098	-147.6	H(1538)				
C5H6O3	METHYLSUCCINIC ANHYDRIDE	(L)	114.098	-145.4	H(1538)				
C5H6O4	1,2-CYCLOPROPANEDICARBOXYLIC ACID (L)	(S)	130.098	-191.0	C(744)				
C5H6O4	1,1-CYCLOPROPANEDICARBOXYLIC ACID (S)	(S)	130.098	-192.0	C(744)				
C5H6O4	CITRACONIC ACID, CIS	(S)	130.098	-197.06	A(1611)				
C5H6O4	ITACONIC ACID	(S)	130.098	-201.05	A(1611)				
C5H6O4	MESACONIC ACID, TRANS	(S)	130.098	-198.5	C(744)				
C5H6O5	2-OXOGLUTARIC ACID	(S)	146.098	-245.37	A(1611)				
C5H6S	2-METHYLTHIOPHENE	(L)	98.164	10.70	A(1134)	57.22 M(1134)	34	27.35	-20.048
C5H6S	2-METHYLTHIOPHENE	(G)	98.164	20.00	C(888)	76.62 T(888)	388	29.38	-21.532
C5H6S	3-METHYLTHIOPHENE	(L)	98.164	10.34	A(965)	52.14 M(965)	65	27.00	-19.791
C5H6S	3-METHYLTHIOPHENE	(G)	98.164	19.79	T(889)	76.72 T(889)	889	29.12	-21.341
C5H7ClO2	ALLYL CHLOROACETATE	(L)	134.563	-92.2	H(1384)				
C5H7Cl3O2	ISOPROPYL TRICHLOROACETATE	(L)	205.477	-129.2	H(1384)				
C5H7Cl3O2	PROPYL TRICHLOROACETATE	(L)	205.477	-123.2	H(1384)				
C5H7NO	3,5-DIMETHYLISOXAZOLE	(L)	97.114	-14.1	C(1467)				
C5H7NO2	ETHYL CYANOACETATE	(L)	111.114	-74.9	C(744)				
C5H7NO4	N-METHYL(2-AMINO)METHANOL	(S)	145.134	-192.6	C(744)				
C5H7N4	2,6-DIAMINOPYRIMIDINE	(L)	122.130	-1.5	C(1640)				

IXXX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log K_p
C5H8	CYCLOPENTENE	(L)	68.114	1.02	A(821)	48.10 M(645)		25.93	-19.006
C5H8	CYCLOPENTENE	(G)	68.114	7.87	T(345)	69.23 T(345)		26.48	-19.410
C5H8	2-METHYL-1,3-BUTADIENE	(L)	68.114	11.80	A(1248)	54.81 M(99)		34.71	-25.442
C5H8	2-METHYL-1,3-BUTADIENE	(G)	68.114	18.10	T(313)	75.44 T(313)		34.86	-25.551
C5H8	3-METHYL-1,2-BUTADIENE	(G)	68.114	31.00	T(312)	76.40 T(312)		47.47	-34.797
C5H8	3-METHYL-1-BUTYNE	(G)	68.114	32.60	T(322)	76.23 T(322)		49.12	-36.006
C5H8	1,2-PENTADIENE	(G)	68.114	34.80	T(307)	79.70 T(307)		50.29	-36.861
C5H8	1,3-PENTADIENE, CIS	(G)	68.114	18.70	T(308)	77.50 T(308)		34.84	-25.540
C5H8	1,3-PENTADIENE, TRANS	(G)	68.114	18.60	T(309)	76.40 T(309)		35.07	-25.708
C5H8	1,4-PENTADIENE	(L)	68.114	18.68	A(1119)	58.2 M(1119)		39.96	-29.289
C5H8	1,4-PENTADIENE	(G)	68.114	25.20	T(310)	79.70 T(310)		40.69	-29.824
C5H8	2,3-PENTADIENE	(G)	68.114	33.10	T(311)	77.60 T(311)		49.21	-36.074
C5H8	1-PENTYNE	(G)	68.114	34.50	T(320)	78.82 T(320)		50.25	-36.833
C5H8	2-PENTYNE	(G)	68.114	30.80	T(321)	79.30 T(321)		46.41	-34.016
C5H8	SPIROPENTANE	(L)	68.114	37.67	A(1303)	46.29 M(1303)		63.12	-46.266
C5H8	SPIROPENTANE	(G)	68.114	44.27	T(469)	67.45 T(469)		63.41	-46.479
C5H8	VINYLCYCLOPROPANE	(L)	68.114	18.5	C(1372)				
C5H8BR2	1,2-DIBROMOCYCLOPENTANE	(L)	227.946	-25.0	A(878)				
C5H8BR4	1,3-DIBROMO-								
C5H8BR4	2,2-BIS(BROMOMETHYL)PROPANE (S)	(S)	387.778			69.58 M(1132)			
C5H8Cl2O2	ISOPROPYL DICHLOROACETATE	(L)	171.028	-129.1	H(1384)				
C5H8Cl2O2	PROPYL DICHLOROACETATE	(L)	171.028	-124.9	H(1384)				
C5H8Cl4	1,3-DICHLORO-								
C5H8Cl4	2,2-BIS(CHLOROMETHYL)PROPANE (S)	(S)	209.942			61.54 M(1132)			
C5H8I4	1,3-DIIODO-								
C5H8I4	2,2-BIS(IODOMETHYL)PROPANE	(S)	575.754			75.70 M(1132)			
C5H8N2O2	5,5-DIMETHYLHYDANTOIN	(S)	128.130	-126.1	B(1471)				
C5H8N2O2	4-METHYLHYDROURACIL	(S)	128.130	-124.3	C(744)				
C5H8N2O5	GLYCYLGLYCINICARBOXYLIC ACID(U,S)	(U,S)	176.130	-271.5	C(744)				
C5H8N4O12	PENTAERYTHRITOL TETRANITRATE (S)	(S)	316.146	-127.2	B(184)				
C5H8N6O	3-(5-TETRAZOLYLAZO)-2-BUTANONE(S)	(S)	168.162	40.0	H(1616)				
C5H8O	ACETYLTRIMETHYLENE	(U,L)	84.114	-52.1	C(744)				
C5H8O	CYCLOPENTANONE	(L)	84.114	-56.62	A(1331)				
C5H8O	DIHYDROPYRAN	(L)	84.114	-37.6	B(202)				
C5H8O	3-PENTEN-2-ONE	(L)	84.114	-17.5	C(238)				
C5H8O	TIGLALDEHYDE	(L)	84.114	-54.5	C(238)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f° (kcal/mole)	Log Kp
C5H8O2	ALLYL ACETATE	(L)	100.114	-87.7	C(744)				
C5H8O2	ANGELIC ACID, CIS	(S)	100.114	-108.3	C(744)				
C5H8O2	CYCLOBUTANECARBOXYLIC ACID	(S)	100.114	-102.9	C(744)				
C5H8O2	ISOPROPENYL ACETATE	(L)	100.114	-85.0	A(1445)				
C5H8O2	METHYL CRYTONATE	(L)	100.114	-91.6	B(1286)				
C5H8O2	METHYL METHACRYLATE	(L)	100.114	-88.7	C(1575)				
C5H8O2	2,4-PENTANEDIONE	(L)	100.114	-127.6	C(744)				
C5H8O2	2-PENTENOIC ACID	(S)	100.114	-106.9	B(1287)				
C5H8O2	3-PENTENOIC ACID	(S)	100.114	-104.0	B(1287)				
C5H8O2	4-PENTENOIC ACID	(L)	100.114	-103.1	B(1287)				
C5H8O2	TIGLIC ACID, TRANS	(S)	100.114	-116.7	C(744)				
C5H8O2S	TETRAHYDRO-2-THIOPHENE-								
C5H8O2S	CARBOXYLIC ACID (S)	(S)	132.180	-132.6	C(744)				
C5H8O3	LEVULINIC ACID	(S)	116.114	-166.7	C(744)				
C5H8O3	METHYL ACETOACETATE	(L)	116.114	-149.6	C(744)				
C5H8O4	ETHYLMALONIC ACID	(S)	132.114	-224.9	B(1535)				
C5H8O4	DIMETHYLMALONIC ACID	(S)	132.114	-228.1	C(744)				
C5H8O4	DIMETHYL MALONATE	(S)	132.114	-188.9	C(744)				
C5H8O4	GLUTARIC ACID	(S)	132.114	-229.46	A(1612)				
C5H8O4	METHYLSUCCINIC ACID	(S)	132.114	-226.8	B(258)				
C5H8O7	2,3,4-TRIHYDROXYGLUTARIC ACID(S)	(S)	180.114	-355.3	C(744)				
C5H9ClO2	ETHYL 2-CHLOROPROPIONATE	(L)	136.579	-128.1	B(1384)				
C5H9ClO2	ETHYL 3-CHLOROPROPIONATE	(L)	136.579	-125.2	B(1384)				
C5H9ClO2	ISOPROPYL CHLOROACETATE	(L)	136.579	-129.3	B(1384)				
C5H9ClO2	METHYL 2-CHLOROBUTYRATE	(L)	136.579	-136.1	B(1384)				
C5H9ClO2	METHYL 3-CHLOROBUTYRATE	(L)	136.579	-128.6	B(1384)				
C5H9ClO2	METHYL 4-CHLOROBUTYRATE	(L)	136.579	-129.0	B(1384)				
C5H9ClO2	PROPYL CHLOROACETATE	(L)	136.579	-123.3	A(141)				
C5H9FO	ETHYL FLUOROALLYL ETHER	(U,L)	104.122	-89.5	C(744)				
C5H9N	ISOBUTYL ISOCYANIDE	(L)	83.130	19.0	C(744)				
C5H9N	ISOVALERONITRILE	(L)	83.130	-5.0	C(744)				
C5H9N	1,2,5,6-TETRAHYDROPYRIDINE	(L)	83.130	7.96	A(93)				
C5H9NO2	PROLINE, L	(S)	115.130			39.21	M(241)		
C5H9NO4	GLUTAMIC ACID, D	(S)	147.130	-240.19	A(650)	45.7	M(644)	-173.87	127.443
C5H9NO4	GLUTAMIC ACID, L	(S)	147.130	-241.32	A(664)	44.98	M(664)	-174.78	128.113
C5H9N3	CYCLOPENTYL AZIDE	(S)	111.146	42.79	A(402)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f° (kcal/mole)	Log Kp
C5H9N3O6	2-METHYL-2,3,3-TRINITROBUTANE(S)	(S)	207.146	-79.6	B(1001)				
C5H9N3O8	2-ETHYL-2-NITRO-1,3-PROPANEDIOL DINITRATE (S)	(S)	239.146	-86.2	B(983)				
C5H9N3O9	NITROPENTAGLYCERINE	(S)	255.146	-106.0	B(184)				
C5H9N3O10	TRINITRATE OF 3-(2-HYDROXY-ETHOXY)-1,2-PROPANEDIOL (S)	(S)	271.146	-128.2	B(985)				
C5H10	CYCLOPENTANE	(L)	70.130	-25.31	A(1196)	48.82	M(341)	8.69	-6.370
C5H10	CYCLOPENTANE	(G)	70.130	-18.46	T(340)	70.00	T(340)	9.23	-6.763
C5H10	2-METHYL-1-BUTENE	(L)	70.130	-14.93	A(1248)	60.70	M(1511)	15.53	-11.382
C5H10	2-METHYL-1-BUTENE	(G)	70.130	-8.68	T(270)	81.15	T(270)	15.68	-11.495
C5H10	2-METHYL-2-BUTENE	(L)	70.130	-16.71	A(1248)	60.00	M(1511)	13.96	-10.231
C5H10	2-METHYL-2-BUTENE	(G)	70.130	-10.17	T(272)	80.92	T(272)	14.26	-10.453
C5H10	3-METHYL-1-BUTENE	(L)	70.130	-12.6	A(1248)	60.54	M(1511)	17.91	-13.125
C5H10	3-METHYL-1-BUTENE	(G)	70.130	-6.92	T(271)	79.70	T(271)	17.87	-13.101
C5H10	METHYLCYCLOBUTANE	(L)	70.130	-11.70	A(662)				
C5H10	METHYLCYCLOBUTANE	(G)	70.130	-5.0	A(662)				
C5H10	1-PENTENE	(L)	70.130	-11.16	A(1248)	62.75	M(1511)	18.69	-13.698
C5H10	1-PENTENE	(G)	70.130	-5.00	T(267)	82.65	T(267)	18.91	-13.864
C5H10	2-PENTENE, CIS	(L)	70.130	-13.18	A(1248)	61.81	M(1511)	16.95	-12.423
C5H10	2-PENTENE, CIS	(G)	70.130	-6.71	T(268)	82.76	T(268)	17.17	-12.587
C5H10	2-PENTENE, TRANS	(L)	70.130	-14.04	A(1248)	61.31	M(1511)	16.24	-11.902
C5H10	2-PENTENE, TRANS	(G)	70.130	-7.59	T(269)	81.36	T(269)	16.71	-12.248
C5H10BR2	2,3-DIBROMO-2-METHYLBUTANE	(G)	229.962	-33.20	T(770)	98.60	T(770)	-3.19	2.340
C5H10CLNO4	GLUTAMIC ACID HYDROCHLORIDE (S)	(S)	183.595			59.3	M(649)		
C5H10N2O2	N,N'-DIMETHYLMALONAMIDE	(S)	130.146	-125.6	C(744)				
C5H10N2O3	ALANYLGLYCINE, D,L	(S)	146.146	-185.91	A(643)	51.0	M(642)	-117.00	85.758
C5H10N2O3	ALANYLGLYCINE, L	(S)	146.146	-197.52	A(664)	46.62	M(664)	-127.30	93.310
C5H10N2O4	2,2-DIMETHYL-1,3-DINITROPROPANE (S)	(S)	162.146	-66.4	B(1001)				
C5H10N2S2	CARBOTHIALDINE	(U,L)	162.278	13.1	C(744)				
C5H10N2S2	DIIHYDRO-5-(METHYLENEIMINO)-METHYL-4H-1,3,5-OITHIAZINE	(L)	162.278	-13.8	C(744)				
C5H10N2S2	DIMETHYL FORMOCARBOTHIALDINE (U,L)	(U,L)	162.278	-1.2	C(744)				
C5H10N6O2	DINILOSOPENTA-METHYLENETETRAMINE (S)	(S)	186.178	53.6	B(370)				

LIXXX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C5H10N6O2	DINITROSOPENTA-								
C5H10N6O2	METHYLENETETRAMINE	(S)	186.178	54.8	B(986)				
C5H10O	CYCLOBUTANEMETHANOL	(L)	86.130	-64.0	C(744)				
C5H10O	CYCLOPENTANOL	(L)	86.130	-71.74	A(1109)	49.2	M(1109)	-30.55	22.391
C5H10O	2,3-EPOXY-2-METHYLBUTANE	(L)	86.130	-61.4	C(744)				
C5H10O	ISOPROPYL VINYL ETHER	(L)	86.130	-53.7	C(843)				
C5H10O	3-METHYL-2-BUTANONE	(L)	86.130	-77.9	C(744)				
C5H10O	2-PENTANONE	(L)	86.130	-71.7	(CALC)	65.11	M(1084)	-35.25	25.838
C5H10O	2-PENTANONE	(G)	86.130	-61.82	T(556)	89.91	T(556)	-32.76	24.016
C5H10O	3-PENTANONE	(L)	86.130	-71.7	(CALC)				
C5H10O	3-PENTANONE	(G)	86.130	-61.82	A(180)	88.44	M(180)	-32.33	23.695
C5H10O	1-PENTEN-3-OL	(L)	86.130	-58.9	C(744)				
C5H10O	TETRAHYDROPIRYAN	(L)	86.130	-61.85	A(1133)				
C5H10O	TETRAHYDROPIRYAN	(G)	86.130	-53.50	A(1133)				
C5H10O	VALERALDEHYDE	(L)	86.130	-63.5	(CALC)				
C5H10O	VALERALDEHYDE	(G)	86.130	-54.45	T(548)	91.53	T(548)	-25.88	18.968
C5H10O5	ALLYL ETHYL SULFOXIDE	(L)	118.196	-41.8	B(907)				
C5H10O5	ALLYL ETHYL SULFOXIDE	(G)	118.196	-24.7	B(907)				
C5H10O5	ISOPROPYL THIOACETATE	(L)	118.196	-71.3	A(1554)				
C5H10O5	PROPYL THIOACETATE	(L)	118.196	-70.3	A(1554)				
C5H10O2	1,1-CYCLOPROPANEDIMETHANOL	(L)	102.130	-104.2	C(744)				
C5H10O2	1,2-CYCLOPENTANEDIOL, CIS	(S)	102.130	-116.8	A(706)				
C5H10O2	1,2-CYCLOPENTANEDIOL, TRANS	(S)	102.130	-118.1	A(706)				
C5H10O2	ETHYL PROPIONATE	(L)	102.130	-114.12	B(1253)				
C5H10O2	ISOPROPYL ACETATE	(L)	102.130	-124.0	A(1555)				
C5H10O2	ISOVALERIC ACID	(L)	102.130	-134.0	B(569)				
C5H10O2	METHYL BUTYRATE	(L)	102.130	-119.0	C(744)				
C5H10O2	2-METHYLBUTYRIC ACID	(L)	102.130	-133.0	B(569)				
C5H10O2	METHYL ISOBUTYRATE	(L)	102.130	-117.3	C(744)				
C5H10O2	VALERIC ACID	(L)	102.130	-133.60	A(3)	62.10	M(970)	-88.95	65.197
C5H10O2	VALERIC ACID	(L)	102.130	-133.9	A(853)	62.10	M(970)	-89.25	65.417
C5H10O2	VALERIC ACID	(G)	102.130	-117.20	(CALC)	105.12	M(970)	-85.37	62.578
C5H10O2	PIVALIC ACID	(S)	102.130	-135.0	B(569)				
C5H10O2	TETRAHYDROFURFURYL ALCOHOL	(L)	102.130	-102.3	C(1006)				
C5H10O2S	ALLYL ETHYL SULFONE	(L)	134.196	-97.5	B(905)				
C5H10O2S	ALLYL ETHYL SULFONE	(G)	134.196	-77.6	B(905)				

LXXX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C5H10O3	DIETHYL CARBONATE	(L)	118.130	-164.0	C(744)				
C5H10O3	ETHYL LACTATE	(L)	118.130	-158.6	C(744)				
C5H10O4	MONOACETIN	(L)	134.130	-216.3	B(1472)				
C5H10O5	ARABINOSE	(S)	150.130	-251.6	C(744)				
C5H10O5	RIBOSE, D	(S)	150.130	-253.9	B(1430)				
C5H10O5	XYLOSE, D	(S)	150.130	-250.8	C(1006)	34.30	M(1006)	-175.94	128.964
C5H10S	ALLYL ETHYL SULFIDE	(L)	102.196	-5.1	B(900)				
C5H10S	ALLYL ETHYL SULFIDE	(G)	102.196	4.3	B(900)				
C5H10S	CYCLOPENTANETHIOL	(L)	102.196	-21.35	A(111)	61.39	M(111)	11.18	-8.194
C5H10S	CYCLOPENTANETHIOL	(G)	102.196	-11.45	T(915)	86.38	T(915)	13.63	-9.989
C5H10S	2,3-EPIETHIO-2-METHYLBUTANE	(L)	102.196	-14.46	A(1447)				
C5H10S	2,3-EPIETHIO-2-METHYLBUTANE	(G)	102.196	-5.06	A(1447)				
C5H10S	THIACYCLOHEXANE	(L)	102.196	-25.32	A(951)	52.16	M(951)	9.96	-7.301
C5H10S	THIACYCLOHEXANE	(G)	102.196	-15.12	T(885)	77.26	T(885)	12.68	-9.292
C5H11BR	1-BROMOPENTANE	(L)	151.054	-40.72	A(138)				
C5H11BR	1-BROMOPENTANE	(G)	151.054	-30.87	T(771)	97.70	T(771)	-1.37	1.001
C5H11CL	1-CHLORO-3-METHYLBUTANE	(L)	106.595	-51.9	B(1384)				
C5H11CL	1-CHLORO-3-METHYLBUTANE	(G)	106.595	-43.10	T(744)	95.56	T(744)	-10.44	7.651
C5H11CL	2-CHLORO-2-METHYLBUTANE	(L)	106.595	-56.6	B(1384)				
C5H11CL	2-CHLORO-2-METHYLBUTANE	(G)	106.595	-48.40	T(745)	88.06	T(745)	-13.50	9.896
C5H11CL	1-CHLOROPENTANE	(L)	106.595	-50.9	T(743)				
C5H11CL	1-CHLOROPENTANE	(G)	106.595	-41.80	T(743)	94.89	T(743)	-8.94	6.551
C5H11N	1,1-AMINOCYCLOPROPYLETHANE	(U,L)	85.146	-22.6	C(744)				
C5H11N	PIPERIDINE	(L)	85.146	-21.10	A(93)				
C5H11N	PIPERIDINE	(G)	85.146	-11.71	A(93)				
C5H11NO	ISOVALERAMIDE	(S)	101.146	-94.0	C(744)				
C5H11NO	VALERAMIDE	(S)	101.146	-90.7	B(1640)				
C5H11NO2	VALINE, L	(S)	117.146	-147.7	A(666)	42.75	M(666)	-85.80	62.892
C5H11NO2S	METHIONINE, L	(S)	149.212	-181.3	B(667)	55.32	M(667)	-120.88	88.600
C5H11NO4	2-ETHYL-2-NITRO-								
C5H11NO4	1,3-PROPANEDIOL	(S)	149.146	-145.3	B(300)				
C5H11NO6	METHYLAMMONIUM BIRACEMATE	(S)	181.146	-340.0	C(744)				
C5H11NO6	METHYLAMMONIUM D-BITARTRATE	(S)	181.146	-338.0	C(744)				
C5H12	2,2-DIMETHYLPROPANE	(L)	72.146	-45.02	A(770)				
C5H12	2,2-DIMETHYLPROPANE	(G)	72.146	-39.67	T(108)	73.23	T(108)	-3.4	2.669
C5H12	2-METHYLBUTANE	(L)	72.146	-42.95	A(770)	62.24	M(550)	-3.4	2.671

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f° (kcal/mole)	Log Kp
C5H12	2-METHYLBUTANE	(G)	72.146	-36.92	T(107)	82.12	T(107)	-3.54	2.596
C5H12	PENTANE	(L)	72.146	-41.40	A(1248)	62.78	M(992)	-2.26	1.653
C5H12	PENTANE	(G)	72.146	-35.00	T(106)	83.40	T(106)	-2.00	1.468
C5H12N2O2	ORNITHINE, D,L	(S)	132.162			46.2	M(652)		
C5H12O	TERT-BUTYL METHYL ETHER	(G)	88.146	-70.00	T(506)	84.36	T(506)	-29.98	21.978
C5H12O	TERT-BUTYL METHYL ETHER	(L)	88.146	-77.2	A(1390)				
C5H12O	2-METHYL-1-BUTANOL	(L)	88.146	-85.24	A(215)				
C5H12O	2-METHYL-2-BUTANOL	(L)	88.146	-90.71	A(215)				
C5H12O	3-METHYL-1-BUTANOL	(L)	88.146	-85.18	A(215)				
C5H12O	3-METHYL-2-BUTANOL	(L)	88.146	-87.63	A(215)				
C5H12O	2-PENTANOL	(L)	88.146	-87.75	A(215)				
C5H12O	3-PENTANOL	(L)	88.146	-88.51	A(215)				
C5H12O	PENTYL ALCOHOL	(L)	88.146	-85.55	A(215)	60.9	M(1106)	-38.54	28.249
C5H12O	PENTYL ALCOHOL	(G)	88.146	-72.27	T(524)	96.21	T(524)	-35.79	26.232
C5H12O	TERT-PENTYL ALCOHOL	(L)	88.146	-90.71	A(215)	54.8	M(1106)	-41.88	30.698
C5H12O	TERT-PENTYL ALCOHOL	(G)	88.146	-78.65	T(525)	87.68	T(525)	-39.62	29.044
C5H12O2	ACETONE DIMETHYL ACETAL	(L)	104.146	-109.9	A(1416)				
C5H12O2	DIETHOXYMETHANE	(L)	104.146	-111.0	C(744)				
C5H12O2	1,5-PENTANEDIOL	(L)	104.146	-105.1	C(1006)	76.82	M(1006)	-55.53	40.704
C5H12O2S	BUTYL METHYL SULFONE	(L)	136.212	-128.0	B(904)				
C5H12O2S	BUTYL METHYL SULFONE	(G)	136.212	-109.2	B(904)				
C5H12O2S	TERT-BUTYL METHYL SULFONE	(L)	136.212	-132.8	H(186)				
C5H12O2S	TERT-BUTYL METHYL SULFONE	(G)	136.212	-111.5	B(186)				
C5H12O3	2-(2-METHOXYETHOXY)ETHANOL	(L)	120.146	-160.8	C(1351)				
C5H12O3	1,1,1-TRIS(HYDROXYMETHYL)- ETHANE (S)	(S)	120.146	-177.6	B(984)				
C5H12O4	3-(2-HYDROXYETHOXY)-1,2- PROPANEDIOL (L)	(L)	136.146	-206.7	B(985)				
C5H12O4	PENTAERYTHRITOL	(S)	136.146	-219.7	B(984)	47.34	M(1131)	-146.73	107.852
C5H12O5	ARABINITOL	(S)	152.146	-268.0	C(744)				
C5H12O5	XYLITOL	(S)	152.146	-267.3	B(1061)				
C5H12S	BUTYL METHYL SULFIDE	(L)	104.212	-34.15	A(952)	73.49	M(952)	4.08	-2.988
C5H12S	BUTYL METHYL SULFIDE	(G)	104.212	-24.42	T(805)	98.43	T(805)	6.37	-8.670
C5H12S	TERT-BUTYL METHYL SULFIDE	(L)	104.212	-37.49	A(1311)				
C5H12S	TERT-BUTYL METHYL SULFIDE	(G)	104.212	-28.93	A(1311)				
C5H12S	BUTYL PROPYL SULFIDE	(L)	104.212	-34.58	A(952)	73.98	M(952)	3.50	-2.566

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f° (kcal/mole)	Log Kp
C5H12S	ETHYL PROPYL SULFIDE	(G)	104.212	-25.00	T(806)	98.97	T(806)	5.63	-4.126
C5H12S	ETHYL ISOPROPYL SULFIDE	(L)	104.212	-37.3	B(899)				
C5H12S	ETHYL ISOPROPYL SULFIDE	(G)	104.212	-28.0	B(899)				
C5H12S	2-METHYL-2-BUTANETHIOL	(L)	104.212	-38.90	A(1299)	69.34	M(1299)	0.56	-0.413
C5H12S	2-METHYL-2-BUTANETHIOL	(G)	104.212	-30.36	T(898)	92.48	T(898)	2.20	-1.616
C5H12S	3-METHYL-1-BUTANETHIOL	(G)	104.212	-27.44	A(957)				
C5H12S	1-PENTANETHIOL	(L)	104.212	-36.02	A(1443)	74.18	M(425)	2.00	-1.466
C5H12S	1-PENTANETHIOL	(G)	104.212	-35.74	A(957)	74.18	M(425)	2.28	-1.672
C5H12	1-PENTANETHIOL	(G)	104.212	-25.91	T(899)	99.28	T(899)	4.63	-3.392
C5H12S2	1,5-PENTANEDITHIOL	(L)	136.278	-30.97	A(925)				
C5H12 S	1,5-PENTANEDITHIOL	(G)	136.278	-16.80	A(925)				
C5H13N	ISOPENTYLAMINE	(L)	87.162	-76.6	C(744)				
C5H14CLN	PENTYLAMINE HYDROCHLORIDE	(S)	123.627			63.74	M(1399)		
C5H14CL2N2O2	ORNITHINE DIHYDROCHLORIDE (S)	(S)	205.092			70.25	M(649)		
C6CL0	TETRACHLOROCCENZOQUINONE	(S)	245.868	-70.3	B(1384)				
C6CL	HEXACHLOROCCENZOQUINONE	(S)	284.802	-31.30	A(1359)	62.20	M(597)	0.25	-0.186
C6CL	HEXACHLOROCCENZOQUINONE	(G)	284.802	-8.10	T(757)	105.45	T(757)	10.56	-7.740
C6F6	HEXAFLUOROCCENZOQUINONE	(L)	186.060	-237.25	A(290)	66.90	M(279)	-211.43	154.973
C6F6	HEXAFLUOROCCENZOQUINONE	(G)	186.060	-228.64	T(719)	91.59	T(719)	-210.18	154.058
C6F10	DECAFLUROCCYCLOHEXENE	(L)	262.060	-470.6	A(290)				
C6F10	DECAFLUROCCYCLOHEXENE	(G)	262.060	-463.3	A(290)				
C6HCL3O2	TRICHLOROCCENZOQUINONE	(S)	211.439	-65.5	B(1384)				
C6HCL5O	PENTACHLOROCCENZOQUINONE	(S)	267.853	-70.6	A(1359)	60.21	M(597)	-34.44	25.243
C6H2CL2O2	2,3-DICHLOROCCENZOQUINONE	(S)	176.990	-59.9	B(1384)				
C6H2CL2O2	2,5-DICHLOROCCENZOQUINONE	(S)	176.990	-59.1	B(1384)				
C6H2CL2O2	2,6-DICHLOROCCENZOQUINONE	(S)	176.990	-59.0	B(1384)				
C6H2CL2O4	2,5-DICHLORO-3,6-DIHYDROXY- CCENZOQUINONE (S)	(S)	208.990	-157.6	C(744)				
C6H2CL4O2	TETRACHLOROCCENZOQUINONE	(S)	247.904	-109.6	B(1384)				
C6H3CLO2	TRICHLOROCCENZOQUINONE	(S)	142.541	-52.7	B(1384)				
C6H3CL3O2	TRICHLOROCCENZOQUINONE	(S)	212.453	-106.4	B(1384)				
C6H3FL2O4	1-FLUORO-2,4-DINITROBENZENE	(S)	176.100	-40.3	C(744)				
C6H3FL2O2	1-FLUORO-2-NITROBENZENE	(L)	156.092	-75.4	C(744)				
C6H3FL2O2	1-FLUORO-2-NITROBENZENE	(S)	156.100	-75.4	C(744)				
C6H3FL2O2	1-FLUORO-2-NITROBENZENE	(G)	156.100	-75.4	B(184)				

MXXX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C6H3N3O7	PICRIC ACID	(S)	229.108	-51.7	B(57)				
C6H3N3O8	2,4,6-TRINITRORESORCINOL	(S)	245.108	-103.9	B(981)				
C6H3N5O8	2,3,4,6-TETRA-NITROANILINE	(S)	273.124	-11.7	C(1231)				
C6H4BR2	P-DIBROMOBENZENE	(S)	235.924	13.0	C(1180)				
C6H4CL2	M-DICHLOROBENZENE	(L)	147.006	-5.12	A(635)				
C6H4CL2	M-DICHLOROBENZENE	(G)	147.006	6.32	T(754)	82.09	T(754)	18.78	-13.765
C6H4CL2	O-DICHLOROBENZENE	(L)	147.006	-4.40	T(755)				
C6H4CL2	O-DICHLOROBENZENE	(G)	147.006	7.16	T(755)				
C6H4CL2	P-DICHLOROBENZENE	(S)	147.006	-10.0	T(756)				
C6H4CL2	P-DICHLOROBENZENE	(G)	147.006	5.50	T(756)	80.47	T(756)	18.44	-13.518
C6H4CL2O2	2,3-DICHLOROXYDROQUINONE	(S)	179.006	-100.0	B(1384)				
C6H4CL2O2	2,6-DICHLOROXYDROQUINONE	(S)	179.006	-101.7	B(1384)				
C6H4FN02	1-FLUORO-2-NITROBENZENE	(L)	141.100	-18.3	C(744)				
C6H4FN02	1-FLUORO-3-NITROBENZENE	(L)	141.100	-19.4	C(744)				
C6H4FN02	1-FLUORO-4-NITROBENZENE	(S)	141.100	-22.8	C(744)				
C6H4FN03	4-FLUORO-3-NITROPHENOL	(S)	157.100	-73.0	C(744)				
C6H4F2	M-DIFLUOROBENZENE	(L)	114.092	-82.38	A(512)				
C6H4F2	M-DIFLUOROBENZENE	(G)	114.092	-74.09	T(716)	76.57	T(716)	-61.43	45.026
C6H4F2	O-DIFLUOROBENZENE	(L)	114.092	-79.04	A(512)	53.20	M(1322)	-59.41	43.547
C6H4F2	O-DIFLUOROBENZENE	(G)	114.092	-70.39	T(717)	76.94	T(717)	-57.84	42.395
C6H4F2	P-DIFLUOROBENZENE	(L)	114.092	-81.98	A(512)				
C6H4F2	P-DIFLUOROBENZENE	(G)	114.092	-73.43	T(718)	75.43	T(718)	-60.43	44.294
C6H4I2	M-DI IODOBENZENE	(S)	329.912	44.8	B(1382)				
C6H4I2	O-DI IODOBENZENE	(S)	329.912	41.3	B(1382)				
C6H4I2	O-DI IODOBENZENE	(L)	329.912	44.7	B(1382)				
C6H4I2	P-DI IODOBENZENE	(S)	329.912	38.5	B(1382)				
C6H4N2	NICOTINONITRILE	(S)	104.108	46.78	A(1275)				
C6H4N2	PICOLINONITRILE	(S)	104.108	62.0	E(680)	77.09	S(680)	73.71	-54.026
C6H4N2O4	M-DINITROBENZENE	(S)	168.108	-6.2	B(184)				
C6H4N2O4	O-DINITROBENZENE	(S)	168.108	2.7	C(744)				
C6H4N2O4	P-DINITROBENZENE	(S)	168.108	-9.05	C(744)				
C6H4N2O5	2,4-DINITROPHENOL	(S)	184.108	-55.5	B(57)				
C6H4N2O5	2,6-DINITROPHENOL	(S)	184.108	-49.4	B(57)				
C6H4N2O6	2,4-DINITRORESORCINOL	(S)	200.108	-104.9	B(984)				
C6H4N2O6	4,6-DINITRORESORCINOL	(S)	200.108	-110.7	B(984)				
C6H4N2S3	PTS(DIMETHYLTHIUCARBAMOYL)								

XIXXX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C6H4N2S3	SULFIDE	(S)	200.306	11.44	A(510)				
C6H4N2S4	BIS(DIMETHYLTHIUCARBAMOYL)								
C6H4N2S4	DISULFIDE	(S)	232.372	9.74	A(510)				
C6H4N4O6	2,4,6-TRINITROANILINE	(S)	228.124	-17.8	B(981)				
C6H4O2	P-BENZOQUINONE	(S)	108.092	-44.65	A(1147)	38.5	(CALC)	-20.47	15.006
C6H4O2	P-BENZOQUINONE	(G)	108.092	-28.3	C(913)	76.65	S(89)	-15.50	11.359
C6H5BR	BROMOBENZENE	(L)	157.016	14.5	T(774)	52.0	T(774)	30.12	-22.077
C6H5BR	BROMOBENZENE	(G)	157.016	25.10	T(774)	77.53	T(774)	33.11	-24.267
C6H5CL	CHLOROBENZENE	(L)	112.557	2.58	T(753)	50.0	T(753)	21.32	-15.624
C6H5CL	CHLOROBENZENE	(G)	112.557	12.39	T(753)	74.92	T(753)	23.70	-17.368
C6H5CLO	M-CHLOROPHENOL	(S)	128.557	-49.7	B(1384)				
C6H5CLO	O-CHLOROPHENOL	(L)	128.557	-44.3	B(1384)				
C6H5CLO	P-CHLOROPHENOL	(S)	128.557	-47.6	B(1384)				
C6H5CLO2	CHLOROXYDROQUINONE	(S)	144.557	-91.5	B(1384)				
C6H5F	FLUOROBENZENE	(L)	96.100	-36.13	A(514)	49.22	M(1318)	-17.88	13.109
C6H5F	FLUOROBENZENE	(G)	96.100	-27.86	T(715)	72.33	T(715)	-16.50	12.097
C6H5FN2O2	4-FLUORO-3-NITROANILINE	(S)	156.116	-41.0	C(744)				
C6H5FO	M-FLUOROPHENOL	(L)	112.100	-81.3	C(744)				
C6H5FO	O-FLUOROPHENOL	(L)	112.100	-72.1	C(744)				
C6H5FO	P-FLUOROPHENOL (M.P. 48.2 C)	(S)	112.100	-79.9	C(744)				
C6H5I	IODOBENZENE	(L)	204.010	27.0	T(786)	53.3	T(786)	40.95	-30.012
C6H5I	IODOBENZENE	(G)	204.010	38.85	T(786)	79.84	T(786)	44.88	-32.898
C6H5IO	M-IODOPHENOL	(S)	220.010	-22.5	B(1382)				
C6H5IO	O-IODOPHENOL	(S)	220.010	-22.8	B(1382)				
C6H5IO	P-IODOPHENOL	(S)	220.010	-22.7	B(1382)				
C6H5NO	NITROSOBENZENE	(S)	107.108	-7.0	C(843)				
C6H5NO2	P-BENZOQUINONE OXIME	(L)	123.108	-21.1	C(744)				
C6H5NO2	NITROBENZENE	(L)	123.108	3.8	C(1118)	53.6	M(1118)	34.95	-25.618
C6H5NO3	M-NITROPHENOL	(S)	139.108	-50.3	C(744)				
C6H5NO3	O-NITROPHENOL	(S)	139.108	-46.4	C(744)				
C6H5NO3	P-NITROPHENOL	(S)	139.108	-46.4	C(744)				
C6H5N3	BENZOTRIAZOLE	(S)	119.124	59.66	A(401)				
C6H5N3O3	BENZENEDIAZONIUM NITRATE	(S)	167.124	48.0	C(744)				
C6H5N3O4	2,3-DINITROANILINE	(S)	183.124	-2.8	C(896)				
C6H5N3O4	2,4-DINITROANILINE	(S)	183.124	-22.4	B(984)				
C6H5N3O4	2,5-DINITROANILINE	(S)	183.124	-10.6	C(896)				

IX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° (kcal/mole)	Source	S_{298} (cal/mole-K)	Source	ΔG_f° (kcal/mole)	Log K_p
C6H5N3O4	2,4-DINITROANILINE	(S)	183.124	-12.1	C(896)				
C6H5N3O4	3,4-DINITROANILINE	(S)	183.124	-7.8	C(896)				
C6H5N3O4	3,5-DINITROANILINE	(S)	183.124	-9.3	C(896)				
C6H5N3O5	2-AMINO-4,6-DINITROPHENOL	(S)	199.124	-59.4	B(981)				
C6H5N5O6	2,4,6-TRINITROPHENYLHYDRAZINE(L)	(L)	243.140	3.0	B(984)				
C6H6	BENZENE	(L)	78.108	11.72	A(1248)	41.41	M(1085)	29.72	-21.788
C6H6	BENZENE	(G)	78.108	19.82	T(396)	64.34	T(396)	30.99	-22.714
C6H6	1,5-HEXADIENE	(L)	78.108	91.9	A(1364)				
C6H6	2,4-HEXADIENE	(G)	78.108	79.0	C(744)				
C6H6CL6	ALPHA-HEXACHLOROCYCLOHEXANE	(S)	290.850	-41.23	B(1294)				
C6H6CL6	BETA-HEXACHLOROCYCLOHEXANE	(S)	290.850	-42.99	B(1294)				
C6H6CL6	GAMMA-HEXACHLOROCYCLOHEXANE	(S)	290.850	-37.92	B(1294)				
C6H6CL6	DELTA-HEXACHLOROCYCLOHEXANE	(S)	290.850	-41.00	B(1294)				
C6H6FN	M-FLUORODANILINE	(L)	111.116	-35.0	C(744)				
C6H6FN	O-FLUORODANILINE	(L)	111.116	-33.9	C(744)				
C6H6FN	P-FLUORODANILINE	(L)	111.116	-29.9	C(744)				
C6H6IN	IODOANILINE	(U/L)	219.026	41.8	C(744)				
C6H6N2O2	M-NITROANILINE	(S)	138.124	-4.1	C(744)				
C6H6N2O2	O-NITROANILINE	(S)	138.124	-3.0	C(744)				
C6H6N2O2	P-NITROANILINE	(S)	138.124	-9.92	A(244)				
C6H6N2O3	N-(O-NITROPHENYL)HYDROXYL-								
C6H6N2O3	AMINE	(L)	154.124	-3.2	C(744)				
C6H6N4	7-METHYLPURINE	(S)	134.140	52.3	C(744)				
C6H6N4	NITRILOTRIACETONITRILE	(L)	134.140	77.3	C(744)				
C6H6N4O	7-METHYLHYPOXANTHINE	(S)	150.140	-8.9	C(744)				
C6H6N4O4	2,4-DINITROPHENYLHYDRAZINE	(S)	198.140	6.4	B(984)				
C6H6N4O7	AMMONIUM PICRATE(RED)	(S)	246.140	-93.0	B(981)				
C6H6N4O7	AMMONIUM PICRATE(YELLOW)	(S)	246.140	-92.4	B(981)				
C6H6O	PHENOL	(S)	94.108	-39.44	A(285)	34.42	M(19)	-12.05	8.829
C6H6O	PHENOL	(G)	94.108	-23.03	T(565)	75.43	T(565)	-7.86	5.763
C6H6O	2-VINYLFURAN	(L)	94.108	-1.52	C(844)				
C6H6O2	HYDROQUINONE	(S)	110.108	-87.51	A(1147)				
C6H6O2	HYDROQUINONE	(G)	110.108	-66.0	A(1147)				
C6H6O2	PYROCATECHOL	(S)	110.108	-83.9	C(744)				
C6H6O2	RESORCINOL	(S)	110.108	-85.7	C(744)				
C6H6O3	DIMETHYL MALIC ACID ANHYDRIDE	(S)	126.108	-136.2	C(1414)				

ITX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° (kcal/mole)	Source	S_{298} (cal/mole-K)	Source	ΔG_f° (kcal/mole)	Log K_p
C6H6O3	PHLOROGLUCINOL	(S)	126.108	-151.5	C(744)				
C6H6O3	PYROGALLOL	(S)	126.108	-130.1	C(744)				
C6H6O3S	BENZENE SULFONIC ACID	(G)	158.174			87.88	E(69)		
C6H6O6	ACONITIC ACID, CIS	(S)	174.108	-292.7	B(1611)				
C6H6O6	ACONITIC ACID, TRANS	(S)	174.108	-294.65	A(1611)				
C6H6S	BENZENETHIOL	(L)	110.174	15.27	A(1319)	53.25	M(1319)	32.02	-23.470
C6H6S	BENZENETHIOL	(G)	110.174	26.66	T(916)	80.51	T(916)	35.28	-25.861
C6H7N	ANILINE	(L)	93.124	7.43	T(616)	45.72	M(579)	35.63	-26.113
C6H7N	ANILINE	(G)	93.124	20.76	T(616)	76.28	T(616)	39.84	-29.205
C6H7N	2-PICOLINE	(L)	93.124	13.50	A(1315)	52.07	M(1315)	39.80	-29.174
C6H7N	2-PICOLINE	(G)	93.124	23.65	T(614)	77.68	T(614)	42.32	-31.017
C6H7N	3-PICOLINE	(L)	93.124	14.75	A(1310)	51.70	M(1310)	41.16	-30.171
C6H7N	3-PICOLINE	(G)	93.124	25.37	T(615)	77.67	T(615)	44.04	-32.280
C6H7N	4-PICOLINE	(L)	93.124	13.57	A(288)				
C6H7N	4-PICOLINE	(G)	93.124	24.43	A(288)				
C6H7NO	P-AMINOPHENOL	(S)	109.124	-42.8	C(744)				
C6H7NO	N-PHENYLHYDROXYLAMINE	(L)	109.124	1.7	C(744)				
C6H7NO3	METHYL 2-CYANOACETOACETATE	(S)	141.124	-118.0	C(744)				
C6H8	1,3-CYCLOHEXADIENE	(G)	80.124	25.9	A(762)				
C6H8N2	P-PHENYLENEDIAMINE	(S)	108.140	0.8	B(747)				
C6H8N2	PHENYLHYDRAZINE	(L)	108.140	33.99	A(244)				
C6H8N2O3	ANILINE NITRATE	(S)	158.140	-42.5	C(277)				
C6H8N2S	3,3'-THIOBIS(PROPIONITRILE)	(G)	140.06	25.2	B(490)				
C6H8N6O2	3-(5-TETRAHYDYL(2H)-								
C6H8N6O2	2,1-PENTAZINE	(S)	196.172	3.7	C(1616)				
C6H8N6O18	MANNITOL HEXANITRATE	(S)	452.1	-151.0	C(843)				
C6H8O2	2,4-PENTANEDIOL	(L)	112.	-195.4	A(1664)				
C6H8O2	SORBITIC ACID	(S)	172.	-7.0	C(744)				
C6H8O3	1,2-DIMETHYL GLYCEROL	(S)	118.	-151.0	E(1533)				
C6H8O3	2,3-DIMETHYL GLYCEROL	(S)	118.	-151.0	E(1533)				
C6H8O3	2,3-DIMETHYL GLYCEROL	(S)	118.	-151.0	E(1533)				
C6H8O3	ANHYDRIDE, TRANS	(S)	118.	-151.0	E(1533)				
C6H8O3	2-ETHYLSUCINIC ANHYDRIDE	(S)	118.	-151.0	E(1533)				
C6H8O4	METHYLMALONIC ACID	(S)	118.	-151.0	E(1533)				

HTX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C6H8O4	1,1-CYCLOBUTANEDICARBOXYLIC ACID	(S)	144.124	-195.2	C(744)				
C6H8O4	1,2-CYCLOBUTANEDICARBOXYLIC ACID	(S)	144.124	-195.1	C(744)				
C6H8O4	1,3-CYCLOBUTANE-DICARBOXYLIC ACID	(S)	144.124	-198.2	C(744)				
C6H8O4	DIMETHYL FUMARATE	(S)	144.124	-172.8	C(744)				
C6H8O4	DIMETHYL MALATE	(S)	144.124	-168.4	C(744)				
C6H8O4	2-HEXENEDIOLIC ACID	(S)	144.124	-208.4	C(744)				
C6H8O4	3-HEXENEDIOLIC ACID	(S)	144.124	-208.1	C(744)				
C6H8O6	1,2,3-PROPANETRICARBOXYLIC ACID	(S)	176.124	-321.3	C(744)				
C6H8O7	CITRIC ACID	(S)	192.124	-369.0	A(1612)				
C6H8S	2,5-DIMETHYLTHIOPHENE	(L)	112.190			58.49	M(191)		
C6H9Cl3O2	BUTYL TRICHLOROACETATE	(L)	219.503	-131.8	B(1384)				
C6H9Cl3O2	ISOBUTYL TRICHLOROACETATE	(L)	219.503	-133.5	B(1384)				
C6H9NO	2-HEXYNAMIDE	(S)	111.140	-28.7	B(432)				
C6H9NO	3,4,5-TRIMETHYLISOXAZOLE	(L)	111.140	-16.7	C(1467)				
C6H9NO2	PROPYL CYANOACETATE	(L)	127.140	-82.2	C(744)				
C6H9NO4	N-ETHYL TARTRIMIDE, D	(S)	159.140	-200.2	C(744)				
C6H9NO4	N-ETHYL TARTRIMIDE, DL	(S)	159.140	-200.1	C(744)				
C6H9NO4	N-ETHYLMESOTARTHRIMIDE	(S)	159.140	-199.4	C(744)				
C6H9NO6	(2-(CARBAMOYL METHOXY)ETHOXY)-ACETIC ACID	(S)	191.140	-311.8	C(744)				
C6H9O4	PROPYL MALONIC ACID	(S)	145.132	-200.7	B(1535)				
C6H10	1-CYCLO(3.1.0)HEXANE	(L)	82.140	-4.82	A(821)	51.67	M(645)	24.28	-17.795
C6H10	CYCLOHEXENE	(L)	82.140	-9.28	A(821)	74.27	T(346)	25.54	-18.720
C6H10	CYCLOHEXENE	(G)	82.140	-1.28	T(346)				
C6H10	2-CYCLOPROPYLPROPENE	(L)	82.140	11.7	C(1374)				
C6H10	2,3-DIMETHYL-1,3-BUTADIENE	(L)	82.140	4.0	A(298)				
C6H10	2,3-DIMETHYL-1,3-BUTADIENE	(G)	82.140	11.4	A(335)				
C6H10	DIMETHYLMETHYLENECYCLOPROPANE (U,L)		82.140	-7.7	C(744)				
C6H10	1,5-HEXADIENE	(L)	82.140	12.54	A(268)				
C6H10	1,5-HEXADIENE	(G)	82.140	20.0	A(762)				
C6H10	1-HEXYNE	(G)	82.140	24.55	T(323)	88.13	T(323)	52.24	-38.288
C6H10	1-METHYLCYCLOPENTENE	(L)	82.140	-9.05	A(821)				

HTX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C6H10	1-METHYLCYCLOPENTENE	(G)	82.140	-1.30	T(368)	78.00	T(368)	24.41	-17.890
C6H10	3-METHYLCYCLOPENTENE	(L)	82.140	-5.68	A(821)				
C6H10	3-METHYLCYCLOPENTENE	(G)	82.140	2.07	T(369)	79.00	T(369)	27.48	-20.141
C6H10	4-METHYLCYCLOPENTENE	(L)	82.140	-4.22	A(821)				
C6H10	4-METHYLCYCLOPENTENE	(G)	82.140	3.53	T(370)	78.60	T(370)	29.06	-21.299
C6H10Br2	1,2-DIBROMOCYCLOHEXANE	(L)	241.972	-38.37	A(137)				
C6H10Br2	1,2-DIBROMOCYCLOHEXANE	(G)	241.972	-26.27	A(137)				
C6H10ClN3	HISTIDINE HYDROCHLORIDE, L	(S)	191.621			55.99	M(242)		
C6H10Cl2O2	BUTYL DICHLOROACETATE	(L)	185.054	-132.3	B(1384)				
C6H10Cl2O2	ISOBUTYL DICHLOROACETATE	(L)	185.054	-133.1	B(1384)				
C6H10N2O2	ALANINE ANHYDRIDE	(S)	142.156	-118.2	C(744)				
C6H10N2O2	ALANINE ANHYDRIDE, D	(S)	142.156	-118.6	C(744)				
C6H10N2O2	5-ETHYL-5-METHYLHYDANTOIN	(S)	142.156	-133.5	B(1471)				
C6H10N4S2	TETRAHYDRO-3,7-DIMETHYL-S-TRIAZOLO[4,1-b]S-TRIAZOLE	(S)	202.304	32.7	B(1446)				
C6H10N6O6	HEXAMETHYLENE-TETRAMINE DINITRATE	(S)	262.188	92.8	B(320)				
C6H10N10	5,5'-AZOBIS(2-ETHYL-TETRAZOLE)	(S)	222.220	156.6	B(1616)				
C6H10O	ALLYL ETHER	(G)	98.140	0.8	C(744)				
C6H10O	CYCLOBUTYL METHYL KETONE	(L)	98.140	-49.0	C(744)				
C6H10O	CYCLOHEXANONE	(L)	98.140	-65.1	T(558)				
C6H10O	CYCLOHEXANONE	(G)	98.140	-55.00	T(558)	77.00	T(558)	-21.69	15.898
C6H10O	1-HEXEN-4-ONE	(L)	98.140	-47.3	C(744)				
C6H10O	1-HEXEN-5-ONE	(L)	98.140	-47.7	C(744)				
C6H10O	3-METHYLCYCLOPENTANONE	(L)	98.140	-72.4	C(744)				
C6H10O	4-METHYL-3-PENTEN-2-ONE	(L)	98.140	-59.3	C(843)				
C6H10O	7-OXABICYCLO(2.2.1)HEPTANE	(L)	98.140	-53.59	A(94)				
C6H10O2	ACETYLACETONE-O-METHYL ETHER (U,L)		114.140	-87.5	C(744)				
C6H10O2	ETHYL CROTONATE	(L)	114.140	-100.7	B(1286)				
C6H10O2	3-HEXENOIC ACID	(L)	114.140	-109.1	C(744)				
C6H10O2	METHYLACETYLACETONE	(U,L)	114.140	-112.7	C(744)				
C6H10O2	METHYL CYCLOBUTANECARBOXYLATE	(L)	114.140	-96.8	C(744)				
C6H10O2	METHYL DIMETHYLACRYLATE	(L)	114.140	-100.1	C(744)				
C6H10O2	RIS(VINYLOXY)ETHANE	(L)	114.140	-66.2	C(843)				
C6H10O3	ETHYL ACETOACETATE	(L)	130.140	-152.3	C(744)				

ATIX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f° (kcal/mole)	Log Kp
C6H1003	PROPIONIC ANHYDRIDE	(S)	130.140	-162.4	H(258)				
C6H1004	ADIPIIC ACID	(S)	146.140	-236.5	C(744)				
C6H1004	DIETHYL OXALATE	(L)	146.140	-189.9	C(744)				
C6H1004	DIMETHYL SUCCINATE	(S)	146.140	-272.2	C(744)				
C6H1004	DIMETHYL SUCCINATE	(L)	146.140	-198.0	C(744)				
C6H1004	2,2-DIMETHYLSUCCINIC ACID	(S)	146.140	-235.4	H(1538)				
C6H1004	2,3-DIMETHYLSUCCINIC ACID, CIS(S)	(S)	146.140	-232.9	H(1538)				
C6H1004	2,3-DIMETHYLSUCCINIC ACID, TRANS(S)	(S)	146.140	-234.4	H(1538)				
C6H1004	2,3-DIMETHYLSUCCINIC ACID, L								
C6H1004	TRANS	(S)	146.140	-234.1	H(1538)				
C6H1004	ETHYTRITEMETHYLAL	(U,S)	146.140	-160.4	C(744)				
C6H1004	ETHYLMETHYLMALONIC ACID	(S)	146.140	-233.6	C(744)				
C6H1004	ETHYLSUCCINIC ACID	(S)	146.140	-235.7	H(1538)				
C6H1004	ISOPROPYLMALONIC ACID	(S)	146.140	-229.4	C(744)				
C6H1004	2-METHYLGUTARIC ACID	(S)	146.140	-234.9	C(744)				
C6H1004	PROPIONYL PEROXIDE	(L)	146.140	-148.2	H(679)				
C6H1004	PROPYLMALONIC ACID	(S)	146.140	-230.7	H(1535)				
C6H1004S2	2,2'-DITHIODIPROPIONIC ACID	(S)	210.272	-231.7	C(646)	65.50	M(647)	-160.50	123.504
C6H1005	LEVULOGLUCOSAN	(S)	162.140	-227.8	C(744)				
C6H1005	SACCHARINIC ACID LACTONE	(S)	162.140	-248.9	C(744)				
C6H1006	DIMETHYL TARTRATE, D	(S)	178.140	-286.1	B(358)				
C6H1006	DIMETHYL TARTRATE, RACEMIC	(S)	178.140	-287.5	B(358)				
C6H1006	DIMETHYL TARTRATE, MESO	(S)	178.140	-286.3	B(358)				
C6H1006	GLUCONOLACTONE, L	(S)	178.140	-291.3	C(744)				
C6H1006	MANNOLACTONE, D	(S)	178.140	-287.3	C(744)				
C6H1006	MANNOLACTONE, L	(S)	178.140	-289.7	C(744)				
C6H1008	ALLOLACTARIC ACID	(S)	210.140	-411.8	C(744)				
C6H1008	CITRIC ACID MONOHYDRATE	(S)	210.140	-398.63	C(843)	67.74	M(386)	-311.42	228.268
C6H1008	GALACTARIC ACID	(S)	210.140	-422.0	C(744)				
C6H11CLO2	PROPYL 2-CHLOROPROPIONATE	(L)	150.605	-128.7	A(141)				
C6H11CLO2	ETHYL 2-CHLOROBUTYRATE	(L)	150.605	-146.6	B(1384)				
C6H11CLO2	ETHYL 3-CHLOROBUTYRATE	(L)	150.605	-135.6	B(1384)				
C6H11CLO2	ETHYL 4-CHLOROBUTYRATE	(L)	150.605	-135.8	B(1384)				
C6H11CLO2	ISOPROPYL 2-CHLOROPROPIONATE	(L)	150.605	-132.1	B(1384)				
C6H11CLO2	ISOPROPYL 2-CHLOROPROPIONATE	(L)	150.605	-140.3	B(1334)				
C6H11CLO2	ISOPROPYL 2-CHLOROPROPIONATE	(L)	150.605	-132.9	C(. . .)				

ATIX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f° (kcal/mole)	Log Kp
C6H11CLO2	PROPYL 2-CHLOROPROPIONATE	(L)	150.605	-131.7	B(1384)				
C6H11CLO2	PROPYL 3-CHLOROPROPIONATE	(L)	150.605	-113.5	B(1384)				
C6H11I	IODOCYCLOHEXANE	(L)	210.058	-23.0	B(1382)				
C6H11N	ISOPENTYL ISOCYANIDE	(L)	97.156	10.3	C(744)				
C6H11NO	HEXAHYDRO-2H-AZEPIN-2-ONE	(L)	113.156	-131.92	H(1269)				
C6H11N3	AZIDOCYCLOHEXANE	(L)	125.172	25.90	A(402)				
C6H11N3O4	DIGLYCYLGLYCINE	(S)	189.172	-229.2	C(744)				
C6H11N3O6	2-METHYL-2,3,3-TRINITROPENTANE	(S)	221.172	-70.0	B(1001)				
C6H11N3O9	2-(HYDROXYMETHYL)-2-METHYL-1,3-PROPANEDIOL TRINITRATE	(S)	269.172	-111.1	B(983)				
C6H12	CYCLOHEXANE	(L)	84.156	-37.34	A(1196)	48.84	M(1264)	6.37	-4.666
C6H12	CYCLOHEXANE	(G)	84.156	-29.43	T(341)	71.28	T(341)	7.99	-5.560
C6H12	2-CYCLOPROPYLPROPANE	(L)	84.156	-11.1	C(1375)				
C6H12	2,3-DIMETHYL-1-BUTENE	(L)	84.156	-22.85	A(80)				
C6H12	2,3-DIMETHYL-1-BUTENE	(G)	84.156	-13.32	T(287)	87.39	T(287)	18.89	-13.848
C6H12	3,3-DIMETHYL-1-BUTENE	(L)	84.156	-21.10	A(80)	61.3	M(741)	18.89	-13.847
C6H12	3,3-DIMETHYL-1-BUTENE	(G)	84.156	-10.31	T(288)	82.16	T(288)	23.46	-17.197
C6H12	2,3-DIMETHYL-2-BUTENE	(L)	84.156	-24.48	A(80)	64.58	M(1306)	14.53	-10.653
C6H12	2,3-DIMETHYL-2-BUTENE	(G)	84.156	-14.15	T(289)	87.15	T(289)	18.13	-13.292
C6H12	2-ETHYL-1-BUTENE	(L)	84.156	-20.82	A(80)				
C6H12	2-ETHYL-1-BUTENE	(G)	84.156	-12.32	T(286)	90.01	T(286)	19.11	-14.008
C6H12	1-HEXENE	(L)	84.156	-17.30	A(80)	70.55	M(950)	19.93	-14.611
C6H12	1-HEXENE	(G)	84.156	-9.96	T(273)	91.93	T(273)	20.90	-15.319
C6H12	2-HEXENE, CIS	(L)	84.156	-20.05	A(80)				
C6H12	2-HEXENE, CIS	(G)	84.156	-12.51	T(274)	92.37	T(274)	18.22	-13.353
C6H12	2-HEXENE, TRANS	(L)	84.156	-20.44	A(80)				
C6H12	2-HEXENE, TRANS	(G)	84.156	-12.88	T(275)	90.97	T(275)	18.27	-13.388
C6H12	3-HEXENE, CIS	(L)	84.156	-18.87	A(80)				
C6H12	3-HEXENE, CIS	(G)	84.156	-11.38	T(276)	90.73	T(276)	19.84	-14.540
C6H12	3-HEXENE, TRANS	(L)	84.156	-20.57	A(80)				
C6H12	3-HEXENE, TRANS	(G)	84.156	-13.01	T(277)	89.59	T(277)	18.55	-13.594
C6H12	METHYLCYCLOPENTANE	(L)	84.156	-33.08	A(1196)	59.26	M(341)	7.52	-5.512
C6H12	METHYLCYCLOPENTANE	(G)	84.156	-25.50	T(347)	81.24	T(347)	8.95	-6.264
C6H12	2-METHYL-1-PENTENE	(L)	84.156	-21.50	A(80)				
C6H12	2-METHYL-1-PENTENE	(G)	84.156	-12.49	T(278)	91.34	T(278)	18.55	-13.593

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° (kcal/mole)	Source	ΔG_f° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f° (kcal/mole)	Log K_p
C6H12	3-METHYL-1-PENTENE	(L)	84.156	-18.68	A (80)				
C6H12	3-METHYL-1-PENTENE	(G)	84.156	-10.76	T (279)	90.06	T (279)	20.66	-15.141
C6H12	4-METHYL-1-PENTENE	(L)	84.156	-19.13	A (80)				
C6H12	4-METHYL-1-PENTENE	(G)	84.156	-10.54	T (280)	87.89	T (280)	21.52	-15.776
C6H12	2-METHYL-2-PENTENE	(L)	84.156	-23.55	A (80)				
C6H12	2-METHYL-2-PENTENE	(G)	84.156	-14.28	T (281)	90.45	T (281)	17.02	-12.476
C6H12	3-METHYL-2-PENTENE, CIS	(L)	84.156	-22.56	A (80)				
C6H12	3-METHYL-2-PENTENE, CIS	(G)	84.156	-13.80	T (282)	90.45	T (282)	17.50	-12.827
C6H12	3-METHYL-2-PENTENE, TRANS	(L)	84.156	-22.60	A (80)				
C6H12	3-METHYL-2-PENTENE, TRANS	(G)	84.156	-14.02	T (283)	91.26	T (283)	17.04	-12.489
C6H12	4-METHYL-2-PENTENE, CIS	(L)	84.156	-20.80	A (80)				
C6H12	4-METHYL-2-PENTENE, CIS	(G)	84.156	-12.03	T (284)	89.23	T (284)	19.63	-14.391
C6H12	4-METHYL-2-PENTENE, TRANS	(L)	84.156	-21.88	A (80)				
C6H12	4-METHYL-2-PENTENE, TRANS	(G)	84.156	-12.99	T (285)	88.02	T (285)	19.03	-13.952
C6H12F4N2	1,2-BIS(DIFLUOROAMINO)-								
C6H12F4N2	4-METHYLPENTANE	(L)	188.172	-62.8	A (422)				
C6H12F4N2	1,2-BIS(DIFLUOROAMINO)-								
C6H12F4N2	4-METHYLPENTANE	(G)	188.172	-52.3	A (422)				
C6H12N2	TRIFTHYLENEDIAMINE	(S)	112.172	-3.4	B (1122)	37.67	M (1593)	57.28	-41.987
C6H12N2O3	ETHYL GLYCYLGLYCINATE	(S)	160.172	-169.8	C (744)				
C6H12N2O4	2,3-DIMETHYL-2,3-								
C6H12N2O4	DINITROBUTANE	(S)	176.172	-83.6	B (1001)				
C6H12N2O4S2	CYSTINE, L	(S)	240.304	-251.4	C (646)	67.06	M (667)	-165.71	121.462
C6H12N2O4S2	CYSTINE, L	(S)	240.304	-249.6	C (667)	67.06	M (667)	-163.91	120.143
C6H12N2O5	SERINE ANHYDRIDE	(S)	192.172	-277.6	B (1177)				
C6H12N2O5	SERYLSERINE	(S)	192.172	-281.5	B (1176)				
C6H12N2S3	BIS(DIMETHYLTHIOCARBAMOYL)								
C6H12N2S3	SULFIDE	(S)	208.370	11.35	A (510)				
C6H12N2S4	BIS(DIMETHYLTHIOCARBAMOYL)								
C6H12N2S4	DISULFIDE	(S)	240.436	9.62	A (510)				
C6H12N4	HEXAMETHYLENETETRAMINE	(S)	140.188	30.0	B (320)	39.05	M (209)	103.92	-76.169
C6H12O	CYCLOHEXANOL	(L)	100.156	-83.22	A (1331)	47.7	M (735)	-31.87	23.359
C6H12O	CYCLOHEXANOL	(G)	100.156	-70.40	T (543)	78.32	T (543)	-28.18	20.654
C6H12O	3,3-DIMETHYL-2-BUTANONE	(L)	100.156	-82.3	C (744)				
C6H12O	1,2-EPOXY-2-ETHYLBUTANE	(L)	100.156	-61.7	C (843)				
C6H12O	3,4-EPOXYHEXANE	(L)	100.156	-59.6	C (744)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° (kcal/mole)	Source	ΔG_f° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f° (kcal/mole)	Log K_p
C6H12O	HEXANAL	(G)	100.156	-59.37	T (549)	101.07	T (549)	-23.93	17.541
C6H12O	2-HEXANONE	(L)	100.156	-78.9	C (744)				
C6H12O	ISOBUTYL VINYL ETHER	(L)	100.156	-64.1	C (843)				
C6H12O	2-METHYLCYCLOPENTANOL	(L)	100.156	-86.5	C (744)				
C6H12O	4-METHYL-2-PENTANONE	(L)	100.156	-92.9	B (1472)				
C6H12O	2-METHYL-4-PENTEN-2-OL	(L)	100.156	-87.6	C (744)				
C6H12O5	BUTYL THIOACETATE	(L)	132.222	-76.1	A (1554)				
C6H12O5	TERT-BUTYL THIOACETATE	(L)	132.222	-78.2	A (1554)				
C6H12O2	BUTYL ACETATE	(L)	116.156	-126.1	A (1555)				
C6H12O2	1,2-CYCLOHEXANEDIOL, CIS	(S)	116.156	-132.7	B (1536)				
C6H12O2	1,2-CYCLOHEXANEDIOL, TRANS	(S)	116.156	-131.7	B (1536)				
C6H12O2	CYCLOHEXYL HYDROPEROXIDE	(L)	116.156	-65.3	B (1190)				
C6H12O2	ETHYL BUTYRATE	(L)	116.156	-123.0	C (744)				
C6H12O2	2-ETHYLBUTYRIC ACID	(L)	116.156	-143.4	C (744)				
C6H12O2	ETHYL ISOBUTYRATE	(L)	116.156	-128.5	C (744)				
C6H12O2	HEXANOIC ACID	(L)	116.156	-139.51	A (3)				
C6H12O2	HEXANOIC ACID	(L)	116.156	-140.0	A (853)				
C6H12O2	4-HYDROXY-4-METHYL-2-PENTANONE (L)		116.156	-126.8	B (313)				
C6H12O2	1-METHYL-1,2-CYCLOPENTANEDIOL-								
C6H12O2	CIS	(S)	116.156	-126.6	B (1536)				
C6H12O2	1-METHYL-1,2-CYCLOPENTANEDIOL-								
C6H12O2	TRANS	(S)	116.156	-128.9	B (1536)				
C6H12O2	METHYL ISOVALERATE	(L)	116.156	-128.5	B (569)				
C6H12O2	METHYL 2-METHYLBUTYRATE	(L)	116.156	-127.4	B (569)				
C6H12O2	METHYL PIVALATE	(L)	116.156	-131.7	B (569)				
C6H12O2	PROPYL PROPIONATE	(L)	116.156	-127.4	B (1284)				
C6H12O2	METHYL VALERATE	(L)	116.156	-122.95	A (3)				
C6H12O2	4-METHYLVALERIC ACID	(L)	116.156	-136.2	C (744)				
C6H12O3	METALDEHYDE	(S)	132.156	-168.1	C (744)				
C6H12O3	PARALDEHYDE	(L)	132.156	-164.2	B (431)				
C6H12O5	1,2,3,4,5-CYCLOHEXANEPENTUL	(S)	164.156	-269.6	C (744)				
C6H12O5	FUCOSE	(S)	164.156	-261.9	C (744)				
C6H12O5	RHAMNOSE	(S)	164.156	-255.5	C (744)				
C6H12O6	ALPHA-GALACTOSE, D	(S)	180.156	-307.21	A (228)	49.1	M (676)	-219.75	161.073
C6H12O6	GLUCOSE, D (DEXTRIOSE)	(S)	180.156	-304.6	A (651)	50.7	M (651)	-217.82	159.510
C6H12O6	FRUCTOSE, L	(S)	180.156	-303.5	C (744)				

XLVI

XLVII

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C6H1206	INOSITOL (INOSITE)	(S)	180.156	-311.7	C(744)				
C6H1206	BETA-LEVULOSE, D	(S)	180.156	-303.5	A(228)				
C6H1206	MANNOSE, D	(S)	180.156	-301.9	B(1430)				
C6H1206	SORBOSE, D	(S)	180.156	-305.6	C(744)				
C6H1206	SORBOSE, L	(S)	180.156	-303.68	A(228)	52.8	M(676)	-217.32	159.294
C6H12S	CYCLOHEXANETHIOL	(G)	116.222	-22.93	A(957)				
C6H12S	2,3-EPIHIO-2,3-DIMETHYLBUTANE	(L)	116.222	-19.84	A(1447)				
C6H12S	THIACYCLOHEPTANE	(L)	116.222	-26.96	A(1442)				
C6H12S	THIACYCLOHEPTANE	(G)	116.222	-14.66	T(886)	86.50	T(886)	20.09	-14.728
C6H13BR	1-BROMOHXANE	(L)	165.080	-46.48	A(138)				
C6H13BR	1-BROMOHXANE	(G)	165.080	-35.88	A(138)				
C6H13NO	N-BUTYLACETAMIDE	(L)	115.172	-91.1	A(1558)				
C6H13NO	HEXANAMIDE	(S)	115.172	-101.6	B(1640)				
C6H13NO2	YSOLEUCINE, L	(S)	131.172	-152.5	A(666)	49.71	M(666)	-82.97	60.814
C6H13NO2	LEUCINE, D	(S)	131.172	-152.36	A(653)	49.5	E(648)	-82.76	60.665
C6H13NO2	LEUCINE, L	(S)	131.172	-154.6	A(666)	50.62	M(666)	-85.34	62.552
C6H13NO2	LEUCINE, D,L	(S)	131.172	-153.14	A(653)	49.5	M(648)	-83.54	61.237
C6H13NS2	DIETHYL METHYLDITHIO-								
C6H13NS2	IMIDDCARBONATE	(L)	163.304	-6.7	C(744)				
C6H13NS2	DIHYDRO-2,4,6-TRIMETHYL-								
C6H13NS2	4H-1,3,5-DITHIAZINE	(L)	163.304	-32.5	C(744)				
C6H13NS2	METHYL DIETHYLDITHIO-								
C6H13NS2	CARBAMATE	(L)	163.304	-24.4	C(744)				
C6H13NO4	2-NITRO-2-PROPYL-								
C6H13NO4	1,3-PROPANEDIOL	(S)	163.172	-149.5	B(300)				
C6H13NO4	2-ISOPROPYL-2-NITRO-								
C6H13NO4	1,3-PROPANEDIOL	(S)	163.172	-149.0	B(300)				
C6H13N3O3	N5-CARBAMOYLORNITHINE, D,L	(S)	175.188			60.8	M(652)		
C6H14	2,2-DIMETHYLBUTANE	(L)	86.172	-51.00	A(1248)	65.01	M(342)	-2.81	2.059
C6H14	2,2-DIMETHYLBUTANE	(G)	86.172	-44.35	T(112)	85.62	T(112)	-2.30	1.689
C6H14	2,3-DIMETHYLBUTANE	(L)	86.172	-49.48	A(1248)	66.33	M(342)	-1.68	1.233
C6H14	2,3-DIMETHYLBUTANE	(G)	86.172	-42.49	T(113)	87.42	T(113)	-0.98	0.719
C6H14	HEXANE	(L)	86.172	-47.52	A(1248)	70.76	M(342)	-1.04	0.765
C6H14	HEXANE	(G)	86.172	-39.96	T(109)	92.83	T(109)	-0.06	0.047
C6H14	2-METHYLPENTANE	(L)	86.172	-48.82	A(1248)	69.45	M(342)	-1.95	1.431
C6H14	2-METHYLPENTANE	(G)	86.172	-41.66	T(110)	90.95	T(110)	-1.20	0.842

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C6H14	3-METHYLPENTANE	(L)	86.172	-48.28	A(1248)	69.22	E(1248)	-1.34	0.985
C6H14	3-METHYLPENTANE	(G)	86.172	-41.02	T(111)	90.77	T(111)	-0.51	0.373
C6H14N2	1,1'-DIMETHYLAZDETHANE	(S)	114.188	10.9	B(239)				
C6H14N2O2	N-NITRODIPROPYLAMINE	(L)	146.188	-41.4	B(1039)				
C6H14N4O2	ARGININE, D	(S)	174.204	-149.05	A(653)	59.9	M(648)	-57.43	42.098
C6H14N6O6	HEXAMETHYLENE								
C6H14N6O6	TETRAMINEDINITRATE	(S)	266.220	-90.2	B(320)				
C6H14O	3,3-DIMETHYL-2-BUTANOL	(L)	102.172	-103.8	C(744)				
C6H14O	HEXYL ALCOHOL	(L)	102.172	-90.67	A(215)	68.6	M(733)	-36.24	26.567
C6H14O	HEXYL ALCOHOL	(G)	102.172	-76.39	T(526)	105.52	T(526)	-32.97	24.168
C6H14O	ISOPROPYL ETHER	(L)	102.172	-83.95	T(508)	70.4	M(1106)	-30.06	22.034
C6H14O	ISOPROPYL ETHER	(G)	102.172	-76.20	T(508)	93.27	T(508)	-29.13	21.352
C6H14O	3-METHYL-3-PENTANOL	(L)	102.172	-115.4	C(744)				
C6H14O	PROPYL ETHER	(L)	102.172	-78.59	A(252)				
C6H14O	PROPYL ETHER	(G)	102.172	-70.00	T(507)	100.98	T(507)	-25.23	18.492
C6H14O5	TERT-BUTYL ETHYL SULFOXIDE	(L)	134.238	-83.3	B(907)				
C6H14O5	TERT-BUTYL ETHYL SULFOXIDE	(G)	134.238	-65.5	B(907)				
C6H14O5	PROPYL SULFOXIDE	(L)	134.238	-78.7	B(907)				
C6H14O5	PROPYL SULFOXIDE	(G)	134.238	-60.9	B(907)				
C6H14O2	ACETALDEHYDE DIETHYL ACETAL	(L)	118.172	-117.3	C(744)				
C6H14O2	1,2-DIETHOXYETHANE	(L)	118.172	-117.2	C(744)				
C6H14O2	2,3-DIMETHYL-2,3-BUTANEDIOL	(S)	118.172	-144.9	C(744)				
C6H14O2S	TERT-BUTYL ETHYL SULFONE	(L)	150.238	-137.9	B(904)				
C6H14O2S	TERT-BUTYL ETHYL SULFONE	(G)	150.238	-116.8	B(904)				
C6H14O2S	PROPYL SULFONE	(L)	150.238	-131.0	B(904)				
C6H14O2S	PROPYL SULFONE	(G)	150.238	-113.3	B(904)				
C6H14O3	2-ETHYL-2-(HYDROXYMETHYL)-								
C6H14O3	1,3-PROPANEDIOL	(S)	134.172	-177.8	B(983)				
C6H14O4	TRIETHYLENE GLYCOL	(L)	150.172	-191.4	C(1032)				
C6H14O6	GALACTITOL	(S)	182.172	-321.90	A(1121)	56.0	M(1105)	-227.19	166.528
C6H14O6	MANNITOL, D	(S)	182.172	-319.61	A(1121)	57.0	M(1105)	-225.20	165.068
C6H14O6	RHAMNOSE MONOHYDRATE	(S)	182.172	-330.6	C(744)				
C6H14O7	GLUCOSE HYDRATE	(S)	198.172	-375.80	A(228)				
C6H14S	BUTYL ETHYL SULFIDE	(L)	118.238	-41.1	T(807)				
C6H14S	BUTYL ETHYL SULFIDE	(L)	118.238	-40.7	T(807)				
C6H14S	BUTYL ETHYL SULFIDE	(G)	118.238	-29.92	T(807)	108.27	T(807)	7.65	-5.606

T

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C6H14S	BUTYL ETHYL SULFIDE	(G)	118.238	-30.3	B(899)				
C6H14S	TERT-BUTYL ETHYL SULFIDE	(L)	118.238	-44.7	B(899)				
C6H14S	TERT-BUTYL ETHYL SULFIDE	(G)	118.238	-35.3	B(899)				
C6H14S	1-HEXANETHIOL	(L)	118.238	-41.97	A(507)				
C6H14S	1-HEXANETHIOL	(G)	118.238	-30.83	T(900)	108.58	T(900)	6.65	-4.871
C6H14S	ISOPROPYL SULFIDE	(G)	118.238	-33.76	T(808)	99.30	T(808)	6.48	-4.752
C6H14S	METHYL PENTYL SULFIDE	(L)	118.238	-39.9	B(899)				
C6H14S	METHYL PENTYL SULFIDE	(L)	118.238	-40.14	T(809)				
C6H14S	METHYL PENTYL SULFIDE	(G)	118.238	-29.34	T(809)	107.73	T(809)	8.39	-6.149
C6H14S	METHYL PENTYL SULFIDE	(G)	118.238	-29.1	B(899)				
C6H14S	PROPYL SULFIDE	(L)	118.238	-40.62	A(952)	80.85	M(952)	5.12	-3.755
C6H14S	PROPYL SULFIDE	(G)	118.238	-29.96	T(810)	107.16	T(810)	7.94	-5.819
C6H14S2	PROPYL DISULFIDE	(L)	150.304	-40.95	A(627)	89.28	M(627)	4.56	-3.339
C6H14S2	PROPYL DISULFIDE	(G)	150.304	-28.01	T(874)	118.30	T(874)	8.84	-6.482
C6H15CLN2	LYSINE, L HYDROCHLORIDE	(S)	182.653			63.21	M(242)		
C6H15CLN4	ARGININE, L HYDROCHLORIDE	(S)	210.669			68.43	M(242)		
C6H15N	HEXYLAMINE	(L)	101.188	-53.7	C(744)				
C6H15N	TRIETHYLAMINE	(L)	101.188	-32.07	A(678)				
C6H15N	TRIETHYLAMINE	(G)	101.188	-23.80	T(610)	96.90	T(610)	26.36	-19.320
C6H15N03	2,2',2''-NITRILOTRIETHANOL	(L)	149.188	-159.5	B(1354)				
C6H16N2O3	TRIETHYLAMINE NITRATE	(S)	164.204	-97.3	C(277)				
C6H16N4O6	1,6-HEXANEDIAMINE DINITHATE	(S)	242.236	-181.4	B(983)				
C6N4	ETHENETETRACARBONITRILE	(S)	128.092	149.1	A(154)				
C6N4	ETHENETETRACARBONITRILE	(G)	128.092	168.5	A(154)				
C7F14	UNDECAFLUORO(TRIFLUOROMETHYL)- CYCLOHEXANE	(L)	350.070	-700.3	A(508)				
C7F14	UNDECAFLUORO(TRIFLUOROMETHYL)- CYCLOHEXANE	(G)	350.070	-692.2	A(508)				
C7F16	HEXADECAFLUOROHUPTANE	(L)	388.070	-817.6	A(508)	134.28	M(1086)	-739.24	541.850
C7F16	HEXADECAFLUOROHUPTANE	(G)	388.070	-808.9	A(508)	158.88	M(1086)	-737.87	540.849
C7H5O2	PENTAFLUOROBENZOIC ACID	(S)	212.078	-289.66	A(290)				
C7H3N3O7	2,4,6-TRINITROBENZALDEHYDE	(S)	241.118	-31.5	C(1231)				
C7H3N3O8	TRINITROBENZOIC ACID	(S)	257.118	-96.3	B(981)				
C7H4CL2O	O-CHLOROBENZOYL CHLORIDE	(S)	175.016	-65.0	C(744)				
C7H4F3NO2	ALPHA, ALPHA, ALPHA-TRIFLUORO-								

II

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C7H4F3NO2	M-NITROTOLUENE	(L)	191.110	-152.3	C(744)				
C7H4F4	M, ALPHA, ALPHA, ALPHA- TETRAFLUOROTOLUENE	(L)	164.102	-198.7	A(508)				
C7H4F4	M, ALPHA, ALPHA, ALPHA- TETRAFLUOROTOLUENE	(G)	164.102	-189.7	A(508)				
C7H4I2O3	DIIODOSALICYLIC ACID	(U,S)	389.922	-94.9	C(744)				
C7H5BR0	BENZOYL BROMIDE	(L)	185.026	-25.5	A(197)				
C7H5CL0	BENZOYL CHLORIDE	(L)	140.567	-39.3	A(197)				
C7H5CL0	M-CHLOROBENZALDEHYDE	(L)	140.567	-30.5	B(1384)				
C7H5CL0	O-CHLOROBENZALDEHYDE	(L)	140.567	-28.7	B(1384)				
C7H5CL0	P-CHLOROBENZALDEHYDE	(S)	140.567	-35.4	B(1384)				
C7H5CL02	CHLOROSALICYLALDEHYDE	(U,L)	156.567	-88.6	C(744)				
C7H5CL02	M-CHLOROBENZOIC ACID	(S)	156.567	-101.5	B(1384)				
C7H5CL02	O-CHLOROBENZOIC ACID	(S)	156.567	-95.6	B(1384)				
C7H5CL02	P-CHLOROBENZOIC ACID	(S)	156.567	-102.1	A(141)				
C7H5F02	M-FLUOROBENZOIC ACID	(S)	140.110	-139.21	A(514)				
C7H5F02	O-FLUOROBENZOIC ACID	(S)	140.110	-135.75	A(514)				
C7H5F02	P-FLUOROBENZOIC ACID	(S)	140.110	-140.32	A(514)				
C7H5F02	P-FLUOROBENZOIC ACID	(S)	140.110	-138.47	A(290)				
C7H5F3	ALPHA, ALPHA, ALPHA- TRIFLUOROTOLUENE	(L)	146.110	-152.40	A(514)	64.89	M(1301)	-123.98	90.872
C7H5F3	ALPHA, ALPHA, ALPHA- TRIFLUOROTOLUENE	(G)	146.110	-143.42	T(720)	89.05	T(720)	-122.20	89.570
C7H5F30	ALPHA, ALPHA, ALPHA- TRIFLUORO-O-CRESOL	(L)	162.110	-194.6	C(744)				
C7H5I0	BENZOYL IODIDE	(L)	232.020	-12.55	A(197)				
C7H5I02	M-IODOBENZOIC ACID	(S)	248.020	-75.6	B(1382)				
C7H5I02	O-IODOBENZOIC ACID	(S)	248.020	-72.2	B(1382)				
C7H5I02	P-IODOBENZOIC ACID	(S)	248.020	-75.5	B(1382)				
C7H5I03	IODOSALICYLIC ACID	(U,S)	264.020	-122.5	C(744)				
C7H5N	BENZONITRILE	(L)	103.118	39.0	A(388)				
C7H5N	BENZONITRILE	(G)	103.118	52.30	T(622)	76.73	T(622)	62.35	-45.702
C7H5NO3	M-NITROBENZALDEHYDE	(S)	151.118	-28.2	C(744)				
C7H5NO3	P-NITROBENZALDEHYDE	(S)	151.118	-36.1	C(1231)				
C7H5NO4	M-NITROBENZOIC ACID	(S)	167.118	-101.2	C(744)				
C7H5NO4	O-NITROBENZOIC ACID	(S)	167.118	-98.9	C(744)				

117

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_{298}° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_{298}° (kcal/mole)	Log Kp
C7H5N04	P-NITROBENZOIDIC ACID	(S)	167.118	-100.6	C(744)				
C7H5N5	PHENYL ISOTHIOCYANATE	(L)	135.184	51.3	C(744)				
C7H5N306	2,3,4-TRINITROTOLUENE	(S)	227.134	3.6	C(744)				
C7H5N306	2,3,5-TRINITROTOLUENE	(S)	227.134	-5.5	C(744)				
C7H5N306	2,3,6-TRINITROTOLUENE	(S)	227.134	-4.0	C(744)				
C7H5N306	2,4,5-TRINITROTOLUENE	(S)	227.134	-3.7	C(744)				
C7H5N306	2,4,6-TRINITROTOLUENE	(S)	227.134	-15.0	B(55)				
C7H5N306	2,4,6-TRINITROTOLUENE	(S)	227.134	-14.2	B(1640)				
C7H5N306	3,4,5-TRINITROTOLUENE	(S)	227.134	-1.2	C(744)				
C7H5N307	2,4,6-TRINITRO-M-CRESOL	(S)	243.134	-60.3	B(57)				
C7H5N307	2,4,6-TRINITROANISOLE	(S)	243.134	-36.3	B(57)				
C7H5N508	N-METHYL-N,2,4,6-TETRANITRO-								
C7H5N508	ANILINE	(S)	287.150	4.2	B(1640)				
C7H5N508	N-METHYL-N,2,4,6-TETRANITRO-								
C7H5N508	ANILINE (S)	(S)	287.150	7.6	B(184)				
C7H6F2	ALPHA, ALPHA-DIFLUOROTOLUENE	(L)	128.118	-A2.3	C(744)				
C7H6N204	2,3-DINITROTOLUENE	(S)	182.134	-3.8	C(744)				
C7H6N204	2,4-DINITROTOLUENE	(S)	182.134	-16.3	B(55)				
C7H6N204	2,5-DINITROTOLUENE	(S)	182.134	-8.2	C(744)				
C7H6N204	2,6-DINITROTOLUENE	(S)	182.134	-10.5	B(981)				
C7H6N204	3,4-DINITROTOLUENE	(S)	182.134	-3.5	C(744)				
C7H6N204	3,5-DINITROTOLUENE	(S)	182.134	-10.4	C(744)				
C7H6N205	2,4-DINITROANISOLE	(S)	198.134	-44.4	B(57)				
C7H6N205	4,6-DINITRO-O-CRESOL	(S)	198.134	-67.2	B(981)				
C7H6N205	2,6-DINITRO-P-CRESOL	(S)	198.134	-57.6	B(981)				
C7H6N4	1-PHENYLTETRAZOLE	(S)	146.150	86.5	B(974)				
C7H6N4	5-PHENYLTETRAZOLE	(S)	146.150	69.9	B(974)				
C7H6N40	1-PHENYL-1H-TETRAZOL-5-OL	(S)	162.150	26.7	B(974)				
C7H6N406	METHYL-2,4,6-TRINITRO-								
C7H6N406	N-ANILINE (S)	(S)	242.150	3.9	B(986)				
C7H6N406	METHYL-2,4,6-TRINITRO-								
C7H6N406	N-ANILINE (S)	(S)	242.150	-12.0	B(985)				
C7H60	BENZALDEHYDE	(L)	106.118	-21.3	C(744)				
C7H60	BENZALDEHYDE	(L)	106.118	-18.5	C(844)				
C7H602	PHENOLIC ACID	(S)	122.118	-92.05	A(688)	40.05	M(454)	-58.62	42.970
			122.118	-69.26	T(569)	88.19	T(569)	-50.29	36.859

118

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_{298}° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_{298}° (kcal/mole)	Log Kp
C7H602	1,3-BENZODIOXOLE	(L)	122.118	-44.0	A(201)				
C7H602	2-HYDROXY-2,4,6-CYCLOHEPTA-								
C7H602	TRIEEN-1-ONE	(S)	122.118	-57.23	A(632)				
C7H602	2-HYDROXY-2,4,6-CYCLOHEPTA-								
C7H602	TRIEEN-1-ONE	(G)	122.118	-37.23	A(632)				
C7H602	M-HYDROXYBENZALDEHYDE	(S)	122.118	-73.2	C(744)				
C7H602	P-HYDROXYBENZALDEHYDE	(S)	122.118	-70.6	C(744)				
C7H602	METHYL-X-BENZOQUINONE	(U,S)	122.118	-59.5	C(744)				
C7H602	SALICYLALDEHYDE	(L)	122.118	-67.2	C(744)				
C7H603	FURANACRYLIC ACID	(S)	138.118	-107.7	B(844)				
C7H603	M-HYDROXYBENZOIC ACID	(S)	138.118	-139.8	B(1110)	42.3	M(1110)	-99.74	73.107
C7H603	P-HYDROXYBENZOIC ACID	(S)	138.118	-139.7	B(1110)	42.0	M(1110)	-99.55	72.968
C7H603	SALICYLIC ACID	(S)	138.118	-139.9	B(1534)	42.6	M(1110)	-99.93	73.246
C7H604	2,4-DIHYDROXYBENZOIC ACID	(S)	154.118	-186.3	C(744)				
C7H605	GALLIC ACID	(S)	170.118	-229.2	C(744)				
C7H605	TRIHYDROXYBENZOIC ACID	(U,S)	170.118	-229.5	C(744)				
C7H608	1,1,2,2-CYCLOPROPANE-								
C7H608	TETRACARBOKYLIC ACID (S)	(S)	218.118	-380.4	C(744)				
C7H7BR	ALPHA-BROMOTOLUENE	(G)	171.042	20.0	F(107)	90.8	E(107)	33.76	-24.747
C7H7CL	ALPHA-CHLOROTOLUENE	(L)	126.583	-16.8	C(744)				
C7H7CL	M-CHLOROTOLUENE	(L)	126.583	-6.0	B(1384)				
C7H7CL	O-CHLOROTOLUENE	(L)	126.583	-6.5	B(1384)				
C7H7CL	P-CHLOROTOLUENE	(L)	126.583	-4.9	B(1384)				
C7H7F	O-FLUOROTOLUENE	(L)	110.126	-37.1	C(744)				
C7H7F	P-FLUOROTOLUENE	(L)	110.126	-44.80	A(512)	56.67	M(1321)	-19.06	13.974
C7H7F	P-FLUOROTOLUENE	(G)	110.126	-35.38	T(721)	81.15	T(721)	-16.94	12.419
C7H7I	ALPHA-IODOTOLUENE	(G)	218.036	30.4	A(1570)				
C7H7I	M-IODOTOLUENE	(L)	218.036	19.1	B(1382)				
C7H7I	O-IODOTOLUENE	(L)	218.036	18.9	B(1382)				
C7H7I	P-IODOTOLUENE	(L)	218.036	16.3	B(1382)				
C7H7N	2-VINYLPYRIDINE	(L)	105.134	75.1	A(67)				
C7H7NO	BENZALDEHYDE OXIME	(S)	121.134	9.8	C(744)				
C7H7NO	BENZAMIDE	(S)	121.134	-48.47	A(244)				
C7H7NO	FORMANILIDE	(S)	121.134	-35.8	C(744)				
C7H7NO2	P-AMINOBENZOIC ACID	(S)	137.134	-78.4	C(1207)				
C7H7NO2	M-NITROTOLUENE	(L)	137.134	-6.0	C(744)				

AT

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C7H7N02	O-NITROTOLUENE	(L)	137.134	-0.4	C(744)				
C7H7N02	P-NITROTOLUENE	(S)	137.134	-8.9	C(744)				
C7H7N02	SALICYLALDEHYDE OXIME	(S)	137.134	-43.9	B(1640)				
C7H7N304	N-METHYL-2,4-DINITROANILINE	(S)	197.150	-22.6	B(984)				
C7H7N5	5-PHENYLAMINOTETRAZOLE	(S)	161.166	72.9	B(1616)				
C7H7N5	1-PHENYL-5-AMINOTETRAZOLF	(S)	161.166	74.3	B(1616)				
C7H8	1,3,5-CYCLOHEPTATRIENE	(L)	92.134	34.22	A(424)	51.30	M(424)	58.99	-43.237
C7H8	1,3,5-CYCLOHEPTATRIENE	(G)	92.134	43.47	T(470)	75.44	T(470)	61.04	-44.741
C7H8	2,5-NORBORNADIENE	(L)	92.134	-48.0	B(94)				
C7H8	TOLUENE	(L)	92.134	2.87	A(1248)	52.81	M(1314)	27.19	-19.928
C7H8	TOLUENE	(G)	92.134	11.95	T(397)	76.64	T(397)	29.16	-21.376
C7H8N20	PHENYLUREA	(S)	136.150	-51.4	C(744)				
C7H8N202	N-METHYL-P-NITROANILINE	(S)	152.150	-7.4	C(744)				
C7H8N202	3-NITRO-P-TOLUIDINE	(S)	152.150	-17.2	B(1440)				
C7H8N202	5-NITRO-O-TOLUIDINE	(S)	152.150	-21.8	B(1440)				
C7H8N402	THEOBROMINE	(S)	180.166	-85.8	C(744)				
C7H8O	ANISOLE	(L)	108.134	-28.6	B(56)				
C7H8O	BENZYL ALCOHOL	(L)	108.134	-38.49	A(1112)	51.8	M(1118)	-6.57	4.813
C7H8O	M-CRESOL	(L)	108.134	-46.19	A(285)				
C7H8O	M-CRESOL	(G)	108.134	-31.63	T(566)	85.27	T(566)	-9.69	7.099
C7H8O	O-CRESOL	(S)	108.134	-48.84	A(285)				
C7H8O	O-CRESOL	(G)	108.134	-30.74	T(567)	85.47	T(567)	-8.86	6.491
C7H8O	P-CRESOL	(S)	108.134	-47.61	A(285)				
C7H8O	P-CRESOL	(G)	108.134	-29.97	T(568)	83.09	T(568)	-7.38	5.406
C7H8O2	O-HYDROXYBENZYL ALCOHOL	(S)	124.134	-86.2	C(744)				
C7H8O2	METHYLHYDROQUINONE	(S)	124.134	-95.9	C(744)				
C7H8O2	5-METHYLBENSOICACID	(S)	124.134	-106.7	C(744)				
C7H8O2S	METHYL PHENYL SULFONE	(L)	156.200	-82.5	B(905)				
C7H8O2S	METHYL PHENYL SULFONE	(G)	156.200	-62.6	B(905)				
C7H8O3S	P-TOLUENESULFONIC ACID	(S)	172.200	-298.4	C(1125)				
C7H8O3S	P-TOLUENESULFONIC ACID	(G)	172.200			94.87	E(69)		
C7H8S	METHYL PHENYL SULFIDE	(L)	124.200	11.5	B(898)				
C7H8S	METHYL PHENYL SULFIDE	(G)	124.200	73.6	B(898)				
C7H8S	ALPHA-TOLUENETHIOL	(L)	124.200	10.5	B(901)				
C7H8S	ALPHA-TOLUENETHIOL	(G)	124.200	22.8	R(901)				
C7H9N	BENZYLAMINE	(L)	121.158	2.0	C(744)				

AT

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C7H9N	2-ETHYLPYRIDINE	(L)	107.150	0.69	A(67)				
C7H9N	2,3-LUTIDINE	(L)	107.150	4.61	A(289)				
C7H9N	2,3-LUTIDINE	(G)	107.150	16.31	A(284)				
C7H9N	2,4-LUTIDINE	(L)	107.150	3.84	A(289)				
C7H9N	2,4-LUTIDINE	(G)	107.150	15.26	A(284)				
C7H9N	2,5-LUTIDINE	(L)	107.150	4.44	A(289)				
C7H9N	2,5-LUTIDINE	(G)	107.150	15.87	A(284)				
C7H9N	2,6-LUTIDINE	(L)	107.150	3.01	A(289)				
C7H9N	2,6-LUTIDINE	(G)	107.150	14.02	A(284)				
C7H9N	3,4-LUTIDINE	(L)	107.150	4.35	A(289)				
C7H9N	3,4-LUTIDINE	(G)	107.150	16.73	A(284)				
C7H9N	3,5-LUTIDINE	(L)	107.150	5.35	A(289)				
C7H9N	3,5-LUTIDINE	(G)	107.150	17.39	A(284)				
C7H9N	N-METHYLANILINE	(L)	107.150	7.7	C(744)	53.6	E(1547)	43.26	-31.707
C7H9N	N-METHYLANILINE	(G)	107.150	20.4	C(1547)	81.6	E(1547)	47.61	-34.897
C7H9N	M-TOLUIDINE	(L)	107.150	-0.3	C(744)				
C7H9N	O-TOLUIDINE	(L)	107.150	-1.3	C(744)				
C7H9N	P-TOLUIDINE	(S)	107.150	-7.2	C(744)				
C7H9N0	P-ANISIDINE	(S)	123.150	-41.1	C(744)				
C7H9N02	ETHYLMETHYLMALIMIDE	(S)	139.150	-110.5	C(1414)				
C7H9N03	ETHYL 2-CYANOACETOACETATE	(S)	155.150	-128.6	C(744)				
C7H10	1,3-CYCLOHEPTADIENE	(G)	94.150	22.3	A(261)				
C7H10N2	1-METHYL-1-PHENYLHYDRAZINE	(S)	122.166	-39.0	C(744)				
C7H10N203	BENZYLAMINE NITRATE	(S)	170.166	-57.2	C(277)				
C7H10O	3-METHYL-2-CYCLOHEXEN-1-ONE	(L)	110.150	-57.0	C(744)				
C7H10O	2-NORBORNANONE	(S)	110.150	-53.8	B(90)				
C7H10O2	1-CYCLOHEXENE-1-CARBOXYLIC								
C7H10O2	ACID	(S)	126.150	-142.4	C(744)				
C7H10O2	2-CYCLOHEXENE-1-CARBOXYLIC								
C7H10O2	ACID	(S)	126.150	-112.7	C(744)				
C7H10O2	ETHYL-2,4-PENTADIENEGATE	(L)	126.150	-80.1	B(1288)				
C7H10O3	TRIMETHYLSUCCINIC ANHYDRIDE	(S)	142.150	-163.8	B(1538)				
C7H10O4	1,2-CYCLOPENTANEDICARBOXYLIC								
C7H10O4	ACID, TRANS	(S)	158.150	-218.4	C(744)				
C7H10O4	DIMETHYLMETHYLENESUCCINIC								
C7H10O4	ACID	(S)	158.150	-203.3	C(744)				

IV

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_f^{\circ}_{298}$ (kcal/mole)	Source	S°_{298} (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_f^{\circ}_{298}$ (kcal/mole)	Log Kp
C7H10O4	DIMETHYL TRIMETHYLENE- α , ALPHA-DICARBOXYLATE, (U,L)	(L)	158.150	-171.7	C(744)				
C7H1004	(1-HYDROXY-1-METHYLETHYL) SUCCHINIC ACID GAMMA LACTONE (L)	(L)	158.150	-221.7	C(744)				
C7H1005	DIMETHYL ACETONYLMALONATE . (L)	(L)	174.150	-247.2	C(744)				
C7H10010	3-HYDROXY-4-OXO-4H-PYKAN- DICARBOXYLIC ACID TRIHYDRATE(S)	(S)	254.150	-304.3	C(744)				
C7H11CL302	ISOPENTYL TRICHLOROACETATE (L)	(L)	233.529	-139.2	B(1384)				
C7H11N5	1-ALLYL-5-(ALLYLAMINO)TETRAZOLE(S)	(S)	165.198	83.7	B(1616)				
C7H11N5	5-(DIALLYLAMINO)TETRAZOLE . (S)	(S)	165.198	83.9	B(1616)				
C7H12	CYCLOHEPTENE (L)	(L)	96.166	-11.0	(CALC)				
C7H12	CYCLOHEPTENE (G)	(G)	96.166	-2.23	A(261)				
C7H12	2-CYCLOPROPYL-1-RUTENE . . (L)	(L)	96.166	19.9	C(1374)				
C7H12	2-CYCLOPROPYL-2-RUTENE . . (L)	(L)	96.166	14.9	C(1374)				
C7H12	1,2-DIMETHYLCYCLOPENTENE . . (G)	(G)	96.166			84.0	E(622)		
C7H12	1,3-DIMETHYLCYCLOPENTENE . . (G)	(G)	96.166			86.4	E(622)		
C7H12	1,4-DIMETHYLCYCLOPENTENE . . (G)	(G)	96.166			87.4	E(622)		
C7H12	1,5-DIMETHYLCYCLOPENTENE . . (G)	(G)	96.166			86.4	E(622)		
C7H12	3,3-DIMETHYLCYCLOPENTENE . . (G)	(G)	96.166			83.2	E(622)		
C7H12	3,4-DIMETHYLCYCLOPENTENE, CIS(G)	(G)	96.166			86.4	E(622)		
C7H12	3,4-DIMETHYLCYCLOPENTENE, TRANS(G)	(G)	96.166			86.8	E(622)		
C7H12	3,5-DIMETHYLCYCLOPENTENE, CIS(G)	(G)	96.166			84.6	E(622)		
C7H12	3,5-DIMETHYLCYCLOPENTENE, TRANS(G)	(G)	96.166			84.6	E(622)		
C7H12	1-ETHYLCYCLOPENTENE (L)	(L)	96.166	-13.95	A(821)				
C7H12	FTHYLIDENE CYCLOPENTANE . . (L)	(L)	96.166	-13.58	A(821)				
C7H12	1-HEPTYNE (L)	(L)	96.166	16.0	(CALC)				
C7H12	1-HEPTYNE (G)	(G)	96.166	24.62	T(324)	97.44	T(324)	54.24	-39.759
C7H12	1-METHYLCYCLOHEXENE (L)	(L)	96.166	-19.42	A(821)				
C7H12	4-METHYLCYCLOHEXENE (L)	(L)	96.166	-24.4	C(744)				
C7H12	METHYLENECYCLOHEXANE (L)	(L)	96.166	-17.63	A(1522)				
C7H12	NORBORNANE (S)	(S)	96.166	-22.11	A(94)				
C7H12	VINYLCYCLOPENTANE (L)	(L)	96.166	-8.00	A(821)				
C7H12CL202	ISOPENTYL DICHLOROACETATE . (L)	(L)	199.080	-138.1	B(1384)				
C7H12O	CYCLOHEPTANONE (L)	(L)	112.166	-71.5	A(1371)				
C7H12O	2,5-DIMETHYLCYCLOPENTANONE . (L)	(L)	112.166	-78.3	C(744)				
-C7H12O	ENDO-2-METHYL-								

IV

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_f^{\circ}_{298}$ (kcal/mole)	Source	S°_{298} (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_f^{\circ}_{298}$ (kcal/mole)	Log Kp
C7H12O	7-OXABICYCLO(2.2.1)HEPTANE (L)	(L)	112.166	-59.90	A(94)				
C7H12O	2-ETHYLCYCLOPENTANONE . . . (L)	(L)	112.166	-77.7	C(744)				
C7H12O	EXO-2-METHYL- 7-OXABICYCLO(2.2.1)HEPTANE (L)	(L)	112.166	-60.75	A(94)				
C7H12O	1,6-HEPTADIEN-4-OL (L)	(L)	112.166	-39.9	C(744)				
C7H12O	3-METHYLCYCLOHEXANONE . . . (L)	(L)	112.166	-73.3	C(744)				
C7H12O2	ACETYLACETONE-D-ETHYL ETHER(U,L)	(L)	128.166	-99.5	C(744)				
C7H12O2	CYCLOHEXANECARBOXYLIC ACID, (S)	(S)	128.166	-134.2	C(744)				
C7H12O2	ETHYL ANGELATE (L)	(L)	128.166	-103.3	C(744)				
C7H12O2	ETHYL 2-PENTENOATE (L)	(L)	128.166	-106.3	B(1287)				
C7H12O2	ETHYL 3-PENTENOATE (L)	(L)	128.166	-104.1	B(1287)				
C7H12O2	ETHYL 4-PENTENOATE (L)	(L)	128.166	-102.8	B(1287)				
C7H12O2	ETHYL TIGLATE (S)	(S)	128.166	-113.1	C(744)				
C7H12O2	ETHYL TETRAMETHYLENE- CARBOXYLATE (U,L)	(L)	128.166	-103.2	C(744)				
C7H12O2	ISOPROPYL CROTONATE (L)	(L)	128.166	-108.75	B(1286)				
C7H12O2	PROPYL CROTONATE (L)	(L)	128.166	-105.55	B(1286)				
C7H12O3	ETHYL 2-ETHOXYACRYLATE . . . (S)	(S)	144.166	-141.5	C(744)				
C7H12O3	ETHYL 3-ETHOXYACRYLATE . . . (L)	(L)	144.166	-144.2	C(744)				
C7H12O4	BUTYLMALONIC ACID (S)	(S)	160.166	-238.1	B(1535)				
C7H12O4	DIETHYL MALONATE (L)	(L)	160.166	-207.9	C(744)				
C7H12O4	DIETHYLMALONIC ACID (S)	(S)	160.166	-235.1	C(744)				
C7H12O4	DIMETHYL GLUTARATE (L)	(L)	160.166	-204.5	C(744)				
C7H12O4	PIMELIC ACID (S)	(S)	160.166	-242.8	A(1354)				
C7H12O4	2,4,8,10-TETRAOXASPIRO- (5,5-UNDECANE) (S)	(S)	160.166	-99.5	A(431)				
C7H12O4	TRIMETHYLSUCCINIC ACID . . . (S)	(S)	160.166	-238.4	B(1538)				
C7H12O5	DIACETIN (S)	(S)	176.166	-266.5	B(1472)				
C7H12O7	GLUCOHEPTONIC ACID LACTONE . (S)	(S)	208.166	-342.1	C(744)				
C7H13CLO2	BUTYL 2-CHLOROPROPIONATE . . (L)	(L)	164.631	-136.9	B(1384)				
C7H13CLO2	BUTYL 3-CHLOROPROPIONATE . . (L)	(L)	164.631	-133.5	B(1384)				
C7H13CLO2	ISOBUTYL 2-CHLOROPROPIONATE (L)	(L)	164.631	-144.3	B(1384)				
C7H13CLO2	ISOBUTYL 3-CHLOROPROPIONATE (L)	(L)	164.631	-137.1	B(1384)				
C7H13CLO2	ISOPENTYL CHLOROACETATE . . (L)	(L)	164.631	-136.8	B(1384)				
C7H13CLO2	ISOPROPYL 2-CHLOROBUTYRATE . (L)	(L)	164.631	-154.8	B(1384)				
C7H13CLO2	ISOPROPYL 3-CHLOROBUTYRATE . (L)	(L)	164.631	-145.4	B(1384)				

VIII

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log K_p
C7H13ClO2	ISOPROPYL 4-CHLOROBUTYRATE	(L)	164.631	-145.3	B(1384)				
C7H13ClO2	PROPYL 2-CHLOROBUTYRATE	(L)	164.631	-151.0	B(1384)				
C7H13ClO2	PROPYL 3-CHLOROBUTYRATE	(L)	164.631	-141.3	B(1384)				
C7H13ClO2	PROPYL 4-CHLOROBUTYRATE	(L)	164.631	-141.6	B(1384)				
C7H13N	1-AZABICYCLO(2,2,2)OCTANE	(S)	111.182			49.47	M(1624)		
C7H13NO	KSI-ENANTOLACTAM	(S)	127.182			45.4	M(794)		
C7H13NO3	FORMYL LEUCINE, DL	(S)	159.182	-183.6	C(744)				
C7H14	CYCLOHEPTANE	(L)	98.182	-37.78	A(707)	57.97	M(424)	12.92	-9.467
C7H14	CYCLOHEPTANE	(G)	98.182	-28.52	T(342)	81.82	T(342)	15.06	-11.042
C7H14	2-CYCLOPROPYLBUTANE	(L)	98.182	-17.9	C(1375)				
C7H14	1,1-DIMETHYLCYCLOPENTANE	(L)	98.182	-41.14	A(694)	63.34	M(544)	7.95	-5.831
C7H14	1,1-DIMETHYLCYCLOPENTANE	(G)	98.182	-33.05	T(349)	85.87	T(349)	9.33	-6.837
C7H14	1,1-DIMETHYL-2-ETHYLCYCLOPROPANE	(L)	98.182	-21.6	A(710)				
C7H14	1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE, CIS	(L)	98.182	-39.52	A(694)	64.33	M(544)	9.28	-6.802
C7H14	1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE, CIS	(G)	98.182	-30.96	T(350)	87.51	T(350)	10.93	-8.010
C7H14	1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE, TRANS	(L)	98.182	-40.94	A(694)	64.86	M(655)	7.70	-5.645
C7H14	1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE, TRANS	(G)	98.182	-32.67	T(351)	87.67	T(351)	9.17	-6.722
C7H14	1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE, CIS	(L)	98.182	-40.68	A(694)	64.97	E(1248)	7.93	-5.812
C7H14	1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE, CIS	(G)	98.182	-32.47	T(352)	87.67	T(352)	9.37	-6.868
C7H14	1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE, TRANS	(L)	98.182	-40.19	A(694)	66.90	M(544)	7.84	-5.749
C7H14	1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE, TRANS	(G)	98.182	-31.93	T(353)	87.67	T(353)	9.91	-7.264
C7H14	2,3-DIMETHYL-1-PENTENE	(G)	98.182	-19.5	E(1248)				
C7H14	2,3-DIMETHYL-2-PENTENE	(G)	98.182	-21.1	E(1248)				
C7H14	2,4-DIMETHYL-1-PENTENE	(L)	98.182	-28.18	A(1236)				
C7H14	2,4-DIMETHYL-1-PENTENE	(G)	98.182	-20.27	A(1236)				
C7H14	2,4-DIMETHYL-2-PENTENE	(L)	98.182	-29.64	A(1236)				
C7H14	2,4-DIMETHYL-2-PENTENE	(G)	98.182	-21.44	A(1236)				
C7H14	3,3-DIMETHYL-1-PENTENE	(G)	98.182	-18.2	E(1248)				
C7H14	3,4-DIMETHYL-1-PENTENE	(G)	98.182	-17.6	E(1248)				
C7H14	3,4-DIMETHYL-2-PENTENE, CIS	(G)	98.182	-20.9	E(1248)				
C7H14	3,4-DIMETHYL-2-PENTENE, TRANS	(G)	98.182	-20.9	E(1248)				
C7H14	4,4-DIMETHYL-1-PENTENE	(L)	98.182	-26.65	A(1236)				
C7H14	4,4-DIMETHYL-1-PENTENE	(G)	98.182	-19.20	A(1236)				
C7H14	4,4-DIMETHYL-2-PENTENE, CIS	(L)	98.182	-25.39	A(1236)				
C7H14	4,4-DIMETHYL-2-PENTENE, CIS	(G)	98.182	-17.60	A(1236)				
C7H14	4,4-DIMETHYL-2-PENTENE, TRANS	(L)	98.182	-29.31	A(1236)				

XII

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log K_p
C7H14	4,4-DIMETHYL-2-PENTENE, TRANS	(G)	98.182	-21.46	A(1236)				
C7H14	ETHYLCYCLOPENTANE	(L)	98.182	-39.08	A(1196)	67.00	M(544)	8.92	-6.541
C7H14	ETHYLCYCLOPENTANE	(G)	98.182	-30.37	T(348)	90.42	T(348)	10.65	-7.807
C7H14	2-ETHYL-1-PENTENE	(G)	98.182	-17.9	E(1248)				
C7H14	3-ETHYL-1-PENTENE	(G)	98.182	-15.3	E(1248)				
C7H14	3-ETHYL-2-PENTENE	(G)	98.182	-18.6	E(1248)				
C7H14	1-HEPTENE	(L)	98.182	-23.41	A(1236)	78.31	M(950)	21.22	-15.555
C7H14	1-HEPTENE	(G)	98.182	-14.89	T(290)	101.24	T(290)	22.90	-16.789
C7H14	2-HEPTENE, CIS	(G)	98.182	-16.5	E(1248)				
C7H14	2-HEPTENE, TRANS	(G)	98.182	-17.5	E(1248)				
C7H14	3-HEPTENE, CIS	(G)	98.182	-16.5	E(1248)				
C7H14	3-HEPTENE, TRANS	(G)	98.182	-17.5	E(1248)				
C7H14	METHYLCYCLOHEXANE	(L)	98.182	-45.45	A(1196)	59.26	M(341)	4.86	-3.563
C7H14	METHYLCYCLOHEXANE	(G)	98.182	-36.99	T(371)	82.06	T(371)	6.52	-4.781
C7H14	3-METHYL-2-ETHYL-1-BUTENE	(L)	98.182	-27.48	A(1236)				
C7H14	3-METHYL-2-ETHYL-1-BUTENE	(G)	98.182	-19.25	A(1236)				
C7H14	2-METHYL-1-HEXENE	(G)	98.182	-18.5	E(1248)				
C7H14	2-METHYL-2-HEXENE	(G)	98.182	-19.9	E(1248)				
C7H14	2-METHYL-3-HEXENE, CIS	(G)	98.182	-18.2	E(1248)				
C7H14	2-METHYL-3-HEXENE, TRANS	(G)	98.182	-19.2	E(1248)				
C7H14	3-METHYL-1-HEXENE	(G)	98.182	-16.0	E(1248)				
C7H14	3-METHYL-2-HEXENE, CIS	(G)	98.182	-19.3	E(1248)				
C7H14	3-METHYL-2-HEXENE, TRANS	(G)	98.182	-19.3	E(1248)				
C7H14	3-METHYL-3-HEXENE, CIS	(L)	98.182	-27.94	A(1236)				
C7H14	3-METHYL-3-HEXENE, CIS	(G)	98.182	-19.22	A(1236)				
C7H14	3-METHYL-3-HEXENE, TRANS	(L)	98.182	-27.16	A(1236)				
C7H14	3-METHYL-3-HEXENE, TRANS	(G)	98.182	-18.60	A(1236)				
C7H14	4-METHYL-1-HEXENE	(G)	98.182	-16.0	E(1248)				
C7H14	4-METHYL-2-HEXENE, CIS	(G)	98.182	-17.5	E(1248)				
C7H14	4-METHYL-2-HEXENE, TRANS	(G)	98.182	-18.5	E(1248)				
C7H14	5-METHYL-1-HEXENE	(L)	98.182	-24.36	B(268)				
C7H14	5-METHYL-1-HEXENE	(G)	98.182	-16.6	C(843)				
C7H14	5-METHYL-2-HEXENE, CIS	(G)	98.182	-18.2	E(1248)				
C7H14	5-METHYL-2-HEXENE, TRANS	(G)	98.182	-19.2	E(1248)				
C7H14	2,3,3-TRIMETHYL-1-BUTENE	(L)	98.182	-28.35	A(1236)				
C7H14	2,3,3-TRIMETHYL-1-BUTENE	(G)	98.182	-20.67	A(1236)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C7H14BR2	1,2-DIBROMOHEPTANE	(L)	258.014	-37.6	B(878)				
C7H14BR2	1,2-DIBROMOHEPTANE	(G)	258.014	-25.2	B(878)				
C7H14N2	DIISOPROPYL CARBODIIMIDE	(S)	126.198	-4.37	A(1275)				
C7H14N2	DIISOPROPYL CYANAMIDE	(S)	126.198	-11.70	A(1275)				
C7H14N2O2	DIETHYLMALONAMIDE	(U,S)	158.198	-141.1	C(744)				
C7H14N2O3	GLYCYLVALINE	(S)	174.198	-199.6	B(1176)				
C7H14N2O3	VALINE GLYCINE ANHYDRIDE	(S)	174.198	-188.5	B(1178)				
C7H14O	CYCLOHEPTANOL	(L)	114.182	-86.3	C(744)				
C7H14O	CYCLOHEXANEMETHANOL	(L)	114.182	-88.2	B(844)				
C7H14O	1,3-DIMETHYLCYCLOHEPTANOL	(L)	114.182	-102.5	C(744)				
C7H14O	2,5-DIMETHYLCYCLOPENTANOL	(L)	114.182	-105.9	C(744)				
C7H14O	2,4-DIMETHYL-3-PENTANONE	(L)	114.182	-90.9	C(744)				
C7H14O	1,3-EPOXY-3-ETHYLPENTANE	(L)	114.182	-76.6	C(843)				
C7H14O	2,3-EPOXY-3-ETHYLPENTANE	(L)	114.182	-71.1	C(843)				
C7H14O	2-ETHYLCYCLOPENTANOL	(L)	114.182	-97.5	C(744)				
C7H14O	HEPTANAL	(L)	114.182	-74.5	A(1065)	83.3	M(1109)	-24.05	17.629
C7H14O	HEPTANAL	(G)	114.182	-63.10	T(550)	110.34	T(550)	-20.71	15.183
C7H14O	4-HEPTANONE	(L)	114.182	-85.9	C(744)				
C7H14O	ISOPENTYL METHYL ETHER	(L)	114.182	-66.1	C(843)				
C7H14O	2-METHYLCYCLOHEXANOL, CIS	(L)	114.182	-93.3	C(1366)				
C7H14O	2-METHYLCYCLOHEXANOL, TRANS	(L)	114.182	-99.6	C(1366)				
C7H14O	3-METHYLCYCLOHEXANOL, CIS	(L)	114.182	-94.5	C(1366)				
C7H14O	3-METHYLCYCLOHEXANOL, TRANS	(L)	114.182	-99.6	C(1366)				
C7H14O	3-METHYL-5-HYDROXY-3-HYDROXY	(L)	114.182	-86.4	C(744)				
C7H14O	4-METHYLCYCLOHEXANOL, CIS	(L)	114.182	-100.7	C(1366)				
C7H14O	4-METHYLCYCLOHEXANOL, TRANS	(L)	114.182	-103.9	C(1366)				
C7H14O2	ETHYL ISOVALERATE	(L)	130.182	-135.6	B(569)				
C7H14O2	ETHYL 2-METHYLBUTYRATE	(L)	130.182	-135.5	B(569)				
C7H14O2	ETHYL PIVALATE	(L)	130.182	-138.0	B(569)				
C7H14O2	ETHYL VALERATE	(L)	130.182	-132.0	B(569)				
C7H14O2	2-ETHYLVALERIC ACID	(L)	130.182	-141.3	C(744)				
C7H14O2	HEPTANOIC ACID	(L)	130.182	-145.5	A(3)				
C7H14O2	HEPTANOIC ACID	(L)	130.182	-146.2	A(853)				
C7H14O2	HEPTANOIC ACID, CYCLOHEXANEDIOL, CIS	(S)	114.182	-144.2	B(1536)				

[X]

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C7H14O2	METHYL HEXANOATE	TRANS (S)	130.182	-141.8	B(1536)				
C7H14O2	METHYL HEXANOATE	(L)	130.182	-129.2	A(3)				
C7H14O6	ALPHA-METHYLGLUCOSIDE	(U,S)	194.182	-292.8	C(744)				
C7H14O7	GLUCOHEPTOSE	(S)	210.182	-353.2	C(744)				
C7H14S	ALLYL TERT-BUTYL SULFIDE	(L)	130.248	-21.7	B(900)				
C7H14S	ALLYL TERT-BUTYL SULFIDE	(G)	130.248	-11.1	B(900)				
C7H15BR	1-BROMOHEPTANE	(L)	179.106	-52.24	A(138)				
C7H15BR	1-BROMOHEPTANE	(G)	179.106	-40.69	A(138)				
C7H15F	1-FLUOROHEPTANE	(L)	118.190	-92.1	C(744)				
C7H15N	3-METHYLCYCLOHEXYLAMINE	(L)	113.198	-51.9	C(744)				
C7H16	2,2-DIMETHYLPENTANE	(L)	100.198	-57.05	A(1203)	71.77	M(654)	-1.16	0.853
C7H16	2,2-DIMETHYLPENTANE	(G)	100.198	-49.27	T(118)	93.90	T(118)	0.02	-0.014
C7H16	2,3-DIMETHYLPENTANE	(L)	100.198	-55.81	A(1203)	76.27	E(1248)	-1.26	0.927
C7H16	2,3-DIMETHYLPENTANE	(G)	100.198	-47.62	T(119)	98.96	T(119)	0.16	-0.117
C7H16	2,4-DIMETHYLPENTANE	(L)	100.198	-56.17	A(1203)	72.46	M(654)	-0.49	0.358
C7H16	2,4-DIMETHYLPENTANE	(G)	100.198	-48.28	T(120)	94.80	T(120)	0.74	-0.543
C7H16	3,3-DIMETHYLPENTANE	(L)	100.198	-56.07	A(1203)	73.44	E(1248)	-0.68	0.499
C7H16	3,3-DIMETHYLPENTANE	(G)	100.198	-48.17	T(121)	95.53	T(121)	0.63	-0.464
C7H16	3-ETHYLPENTANE	(L)	100.198	-53.77	A(1203)	75.18	M(654)	1.10	-0.806
C7H16	3-ETHYLPENTANE	(G)	100.198	-45.33	T(117)	98.35	T(117)	2.63	-1.929
C7H16	HEPTANE	(L)	100.198	-53.63	A(1203)	78.53	M(654)	0.24	-0.177
C7H16	HEPTANE	(G)	100.198	-44.88	T(114)	102.27	T(114)	1.91	-1.402
C7H16	2-METHYLHEXANE	(L)	100.198	-54.93	A(1203)	77.28	M(654)	-0.69	0.503
C7H16	2-METHYLHEXANE	(G)	100.198	-46.59	T(115)	100.38	T(115)	0.77	-0.562
C7H16	3-METHYLHEXANE	(L)	100.198	-54.35	A(1203)	78.23	E(1248)	-0.39	0.285
C7H16	3-METHYLHEXANE	(G)	100.198	-45.96	T(116)	101.37	T(116)	1.10	-0.807
C7H16	2,2,3-TRIMETHYLBUTANE	(L)	100.198	-56.63	A(1203)	69.85	M(654)	-0.17	0.125
C7H16	2,2,3-TRIMETHYLBUTANE	(G)	100.198	-48.95	T(122)	91.61	T(122)	1.02	-0.749
C7H16O	TERT-BUTYL ISOPROPYL ETHER	(L)	116.198	-94.0	B(1390)				
C7H16O	TERT-BUTYL ISOPROPYL ETHER	(G)	116.198	-85.60	T(509)	99.89	T(509)	-30.79	22.570
C7H16O	3-ETHYL-3-PENTANOL	(L)	116.198	-124.8	B(744)				
C7H16O	HEPTYL ALCOHOL	(L)	116.198	-95.31	A(215)	77.9	M(1109)	-33.95	24.882
C7H16O	HEPTYL ALCOHOL	(G)	116.198	-80.03	T(527)	114.83	T(527)	-29.68	21.752
C7H16O2	ACETONE DIETHYL ACETAL	(L)	132.198	-128.2	A(1416)				
C7H16O2	ACETONE DIETHYL ACETAL	(G)	132.198	-120.6	A(1416)				
C7H16O2	DIPROPYLMETHANE	(L)	118.198	-118.2	C(744)				

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_f^{\circ 298}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_f^{\circ 298}$ (kcal/mole)	Log K_p
C7H16O4S2	2,2-BIS(ETHYLSULFONYL)PROPANE(S)	(S)	228.330	-341.6	C(1441)				
C7H16O7	D-GLYCERO-D-GALACTOHEPTITOL (S)	(S)	212.198	-368.6	C(744)				
C7H16S	BUTYL PROPYL SULFIDE (G)	(G)	132.264	-34.88	T(811)	117.90	T(811)	9.53	-6.984
C7H16S	ETHYL PENTYL SULFIDE (G)	(G)	132.264	-34.85	T(812)	117.58	T(812)	9.65	-7.076
C7H16S	1-HEPTANETHIOL (L)	(L)	132.264	-47.85	A(507)				
C7H16S	1-HEPTANETHIOL (G)	(G)	132.264	-35.76	T(901)	117.89	T(901)	8.65	-6.341
C7H16S	HEXYL METHYL SULFIDE (G)	(G)	132.264	-34.27	T(813)	117.04	T(813)	10.39	-7.619
C7H17N	HEPTYLAMINE (L)	(L)	115.214	-59.2	C(744)				
C8F16	UNDECAFLUORO(PENTAFLUORO-ETHYL)CYCLOHEXANE (L)	(L)	400.080	-798.2	A(508)				
C8F16	UNDECAFLUORO(PENTAFLUORO-ETHYL)CYCLOHEXANE (G)	(G)	400.080	-789.0	A(508)				
C8H4CL2O2	PHTHALOYL CHLORIDE (S)	(S)	203.026	-97.4	C(744)				
C8H4N2	PHTHALONITRILE (S)	(S)	128.128	66.35	A(1275)				
C8H4N6	AMMONIUM SALT OF 1,1,2,3,3-PENTACYANOPROPENE(S)	(S)	184.160	120.7	A(154)				
C8H4O3	PHTHALIC ANHYDRIDE (S)	(S)	148.112	-110.1	A(1116)	42.9	M(1118)	-79.12	57.992
C8H5F3O2	ALPHA, ALPHA, ALPHA-TRIFLUORO-M-TOLUIC ACID (S)	(S)	190.120	-254.5	A(512)				
C8H5NO	PHENYLGLYOXALONITRILE (S)	(S)	131.128	17.8	C(744)				
C8H5NO2	INDOLE-2,3-DIONE (S)	(S)	147.128	-54.7	C(744)				
C8H5NO2	ISATIN (S)	(S)	147.128	-61.6	C(1414)				
C8H5NO2	PHTHALIMIDE (S)	(S)	147.128	-73.0	C(744)				
C8H6	ETHYNYLBENZENE (L)	(L)	102.128	67.72	A(432)				
C8H6	ETHYNYLBENZENE (G)	(G)	102.128	78.22	T(471)	76.88	T(471)	86.46	-63.275
C8H6BR4	TETRABROMO-M-XYLENE (S)	(S)	421.792	7.9	C(1180)				
C8H6BR4	TETRABROMO-O-XYLENE (S)	(S)	421.792	4.4	C(1180)				
C8H6BR4	TETRABROMO-P-XYLENE (S)	(S)	421.792	1.3	C(1180)				
C8H6CL2	2,5-DICHLOROSTYRENE (L)	(L)	173.042	8.3	A(1359)				
C8H6CL4	2,3,5,6-TETRACHLORO-P-XYLENE (S)	(S)	243.956	-42.05	A(1387)				
C8H6N2O	PHENYL FURAZAN (S)	(S)	146.144	58.5	C(1012)				
C8H6N2O2	3-PHENYLOXADIAZOL-5-OL (S)	(S)	162.144	-24.5	C(1012)				
C8H6N2O2	5-PHENYLOXADIAZOL-3-OL (S)	(S)	162.144	0.6	C(1012)				
C8H6N2O4	M, BETA-DINITROSTYRENE (S)	(S)	194.144	0.7	C(744)				
C8H6N2O4	P, BETA-DINITROSTYRENE (S)	(S)	194.144	5.0	C(744)				

II XI

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_f^{\circ 298}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_f^{\circ 298}$ (kcal/mole)	Log K_p
C8H6N4O2	2-PHENYL-5-TETRAZOLE-CARBOXYLIC ACID (S)	(S)	190.160	-9.9	B(974)				
C8H6N4O10	2,4,6-TRINITROPHENOXY-ETHYL NITRATE (S)	(S)	318.160	-66.3	B(983)				
C8H6O2	PHTHALIDE (S)	(S)	134.128	-72.6	C(744)				
C8H6O3	METHYLENEPROTocatechualdehyde(S)	(S)	150.128	-85.9	C(744)				
C8H6O4	ISOPHTHALIC ACID (S)	(S)	166.128	-191.96	A(1295)				
C8H6O4	PHTHALIC ACID (S)	(S)	166.128	-186.96	A(1295)	49.7	M(1118)	-141.39	103.640
C8H6O4	PIPERONYLIC ACID (S)	(S)	166.128	-153.3	C(744)				
C8H6O4	TEREPHTHALIC ACID (S)	(S)	166.128	-195.10	A(1295)				
C8H6S	BENZOTHIOPHENE (S)	(S)	134.194			42.33	M(419)		
C8H7ClO	TOLUOYL CHLORIDE (S)	(S)	154.593	-52.4	C(744)				
C8H7FN2O3	4'-FLUORO-3'-NITROACETANILIDE(L)	(L)	198.152	-98.1	C(744)				
C8H7F2NO	DIFLUOROACETANILIDE (U,S)	(U,S)	171.144	-131.1	C(744)				
C8H7IO2	METHYL M-iodobenzoate (S)	(S)	262.046	-66.3	B(1382)				
C8H7IO2	METHYL O-iodobenzoate (L)	(L)	262.046	-58.1	B(1382)				
C8H7IO2	METHYL P-iodobenzoate (S)	(S)	262.046	-68.4	B(1382)				
C8H7N	BENZYL ISOCYANIDE (L)	(L)	117.144	55.9	C(744)				
C8H7N	INDOLE (S)	(S)	117.144	30.3	C(1413)				
C8H7N	PHENYLACETONITRILE (L)	(L)	117.144	32.9	C(744)				
C8H7N	O-TOLUNITRILE (L)	(L)	117.144	39.7	C(744)				
C8H7NO2	INDOLEHYDROXY-2-INDOLINE (S)	(S)	149.144	-75.1	C(744)				
C8H7NO2	OMEGA-NITROSTYRENE (S)	(S)	149.144	6.1	B(1640)				
C8H7N3O	PHENYLAMINO FURAZAN (S)	(S)	161.160	54.2	C(1012)				
C8H7N3O6	1-ETHYL-2,4,6-TRINITROBENZENE(S)	(S)	241.160	-25.1	B(984)				
C8H7N3O6	2,4,6-TRINITRO-M-XYLENE (S)	(S)	241.160	-24.0	B(55)				
C8H7N3O7	2,4,6-TRINITROPHENETOLE (S)	(S)	257.160	-48.0	B(57)				
C8H7N3O8	2,4-DINITROPHENOXYETHYL NITRATE (S)	(S)	273.160	-66.4	B(983)				
C8H7N5O8	METHYL TETRYL (U,S)	(U,S)	301.176	17.6	C(744)				
C8H7N5O8	AR,N-TETRANITROPHENETHYLAMINE(S)	(S)	301.176	-4.8	B(981)				
C8H8	1,3,5,7-CYCLOOCTATETRAENE (L)	(L)	104.144	60.93	A(1197)	52.65	M(1312)	85.70	-62.817
C8H8	1,3,5,7-CYCLOOCTATETRAENE (G)	(G)	104.144	71.23	T(472)	78.10	T(472)	88.41	-64.805
C8H8	STYRENE (L)	(L)	104.144	24.83	A(1248)	56.78	M(1160)	48.27	-35.454
C8H8	STYRENE (G)	(G)	104.144	35.22	T(439)	82.48	T(439)	51.10	-37.453
C8H8FN0	3'-FLUOROACETANILIDE (S)	(S)	153.152	-90.4	C(744)				

II XI

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C8H8FN0	4'-FLUOROACETANILIDE	(S)	153.152	-89.6	C(744)				
C8H8FN03	4-FLUORO-3-NITROPHENETOL	(S)	185.152	-87.2	C(744)				
C8H8N2O2	PHENYLGLYOXIME (ALPHA)	(S)	164.160	-3.2	B(1013)				
C8H8N2O2	PHENYLGLYOXIME (BETA)	(S)	164.160	11.8	B(1013)				
C8H8N2O3	2'-NITROACETANILIDE	(S)	180.160	-51.1	C(744)				
C8H8N2O3	3'-NITROACETANILIDE	(S)	180.160	-56.2	C(744)				
C8H8N2O3	4'-NITROACETANILIDE	(S)	180.160	-56.8	C(744)				
C8H8N2O4	8ISUCCINIMIDE	(S)	196.160	-169.55	A(247)				
C8H8N2O4	2,4-DINITRO-M-XYLENE	(S)	196.160	-19.7	H(55)				
C8H8N2O4	4,6-DINITRO-M-XYLENE	(S)	196.160	-23.7	B(55)				
C8H8N2O4	1-ETHYL-2,4-DINITROBENZENE	(L)	196.160	-19.6	B(1471)				
C8H8N2O5	2,4-DINITROPHENETOLE	(S)	212.160	-53.4	B(57)				
C8H8N4	1-METHYL-5-PHENYL-TETRAZOLE	(S)	160.176	69.8	B(1616)				
C8H8N4	1-PHENYL-5-METHYL-TETRAZOLE	(S)	160.176	69.2	B(1616)				
C8H8N4	2-PHENYL-5-METHYL-TETRAZOLE	(S)	160.176	65.6	B(974)				
C8H8N6	BENZAL-5-HYDRAZINOTETRAZOLE	(S)	188.192	105.4	B(1616)				
C8H8N6O6	AMMONIUM 5,5-NITRILIO- DIBARBITURIC ACID	(S)	284.192	-289.4	C(744)				
C8H8O	ACETOPHENONE	(L)	120.144	-34.06	A(251)	59.62	M(1354)	-4.06	2.977
C8H8O	ACETOPHENONE	(G)	120.144	-20.76	A(1434)	89.12	M(1434)	0.44	-0.324
C8H8O5	PHENYL THIOACETATE	(L)	152.210	-32.4	A(1556)				
C8H8O2	M-ANISALDEHYDE	(L)	136.144	-64.9	C(928)				
C8H8O2	O-ANISALDEHYDE	(S)	136.144	-62.6	C(928)				
C8H8O2	P-ANISALDEHYDE	(L)	136.144	-63.8	C(928)				
C8H8O2	1,4-BENZODIOXAN- TETRAHYDRONAPHTHALENE	(L)	136.144	-61.0	A(201)				
C8H8O2	2-HYDROXYACETOPHENONE	(L)	136.144	-84.4	C(145)				
C8H8O2	3-HYDROXYACETOPHENONE	(S)	136.144	-87.1	C(145)				
C8H8O2	4-HYDROXYACETOPHENONE	(S)	136.144	-86.2	C(145)				
C8H8O2	METHYL BENZOATE	(L)	136.144	-81.4	C(744)				
C8H8O2	PHENYLACETIC ACID	(S)	136.144	-94.7	C(744)				
C8H8O2	M-TOLUIC ACID	(S)	136.144	-101.84	A(250)				
C8H8O2	O-TOLUIC ACID	(S)	136.144	-99.55	A(250)				
C8H8O2	P-TOLUIC ACID	(S)	136.144	-102.58	A(250)				
C8H8O3	P-ANISIC ACID	(S)	152.144	-130.4	C(744)				
C8H8O3	2,3-CRESOTIC ACID	(S)	152.144	-146.3	C(744)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C8H8O3	2,4-CRESOTIC ACID	(S)	152.144	-147.2	C(744)				
C8H8O3	2,5-CRESOTIC ACID	(S)	152.144	-145.5	C(744)				
C8H8O3	2,6-CRESOTIC ACID	(S)	152.144	-142.2	C(744)				
C8H8O3	3-HYDROXY-P-ANISALDEHYDE	(S)	152.144	-107.3	C(928)				
C8H8O3	4-HYDROXY-M-ANISALDEHYDE	(S)	152.144	-110.9	C(744)				
C8H8O3	MANDELIC ACID, D,L	(S)	152.144	-138.5	B(1651)				
C8H8O3	MANDELIC ACID, L	(S)	152.144	-138.7	B(1651)				
C8H8O3	METHYL P-HYDROXYBENZOATE	(S)	152.144	-129.6	C(744)				
C8H8O3	METHYL SALICYLATE	(L)	152.144	-127.1	A(1354)				
C8H8O3	O-OXYMETHYLBENZOIC ACID	(U,S)	152.144	-137.7	C(744)				
C8H8O3	PHENOXYACETIC ACID	(S)	152.144	-122.2	C(744)				
C8H8O4	CYCLOHEXADIENE- 1,4-DICARBOXYLIC ACID	(S)	168.144	-182.5	C(744)				
C8H8O4	1,4-CYCLOHEXADIENE- 1,4-DICARBOXYLIC ACID	(S)	168.144	-189.5	C(744)				
C8H8O4	2,4-CYCLOHEXADIENE- 1,4-DICARBOXYLIC ACID	(S)	168.144	-183.0	C(744)				
C8H8O4	2,5-CYCLOHEXADIENE- 1,4-DICARBOXYLIC ACID	(S)	168.144	-180.2	C(744)				
C8H8O5	METHYL GALLATE	(S)	184.144	-223.6	C(744)				
C8H9CL	1-CHLORO-2-ETHYLBENZENE	(L)	140.609	-12.88	A(635)				
C8H9CL	1-CHLORO-4-ETHYLBENZENE	(L)	140.609	-12.33	A(635)				
C8H9FO	M-FLUOROPHENETOLE	(L)	140.152	-79.5	C(744)				
C8H9FO	P-FLUOROPHENETOLE	(L)	140.152	-82.7	C(744)				
C8H9NO	ACETANILIDE	(S)	135.160	-50.3	A(1558)				
C8H9NO	ACETOPHENONE OXIME	(S)	135.160	-5.3	C(744)				
C8H9NO2	2-OXYACETOPHENONE OXIME	(S)	151.160	-52.9	C(843)				
C8H9NO2	4-OXYACETOPHENONE OXIME	(S)	151.160	-50.9	C(843)				
C8H9NO2	PHENYLGLYCINE	(U,S)	151.160	-103.1	C(744)				
C8H9NO2	N-PHENYLGLYCINE	(S)	151.160	-93.0	C(744)				
C8H9NO3	M-NITROPHENETOLE	(L)	167.160	-49.9	C(744)				
C8H9NO3	O-NITROPHENETOLE	(L)	167.160	-38.6	C(744)				
C8H9NO3	P-NITROPHENETOLE	(L)	167.160	-53.1	C(744)				
C8H9N3O4	DIMETHYL-2,4-DINITRO- N,N-ANILINE	(S)	211.176	-6.9	B(204)				
C8H10	ETHYLBENZENE	(L)	106.160	-2.98	A(1248)	60.99	M(1325)	28.61	-20.971

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log K_p
C8H10	ETHYLBENZENE	(G)	106.160	7.12	T(398)	86.15	T(398)	31.21	-22.875
C8H10	1,7-OCTADIENE	(L)	106.160	80.0	A(433)				
C8H10	M-XYLENE	(L)	106.160	-6.07	A(1248)	60.27	M(1248)	25.73	-18.863
C8H10	M-XYLENE	(G)	106.160	4.12	T(399)	85.49	T(399)	28.41	-20.821
C8H10	O-XYLENE	(L)	106.160	-5.84	A(1248)	58.80	M(1166)	26.40	-19.353
C8H10	O-XYLENE	(G)	106.160	4.54	T(400)	84.31	T(400)	29.18	-21.386
C8H10	P-XYLENE	(L)	106.160	-5.84	A(1248)	59.20	M(1166)	26.28	-19.265
C8H10	P-XYLENE	(G)	106.160	4.29	T(401)	84.23	T(401)	28.95	-21.221
C8H10N2O	N,N-DIMETHYL-P-NITROANILINE(S)	(S)	150.176	31.6	C(744)				
C8H10N2O	N-ETHYL-N-NITROANILINE	(S)	150.176	25.3	C(744)				
C8H10N4O2	CAFFEINE	(S)	194.192	-79.2	C(744)				
C8H10N4O10	ALLOXANTHINE DIHYDRATE	(U,S)	322.192	-475.9	C(744)				
C8H10O	M-ETHYLPHENOL	(L)	122.160	-51.29	A(128)				
C8H10O	M-ETHYLPHENOL	(G)	122.160	-35.01	A(128)				
C8H10O	O-ETHYLPHENOL	(L)	122.160	-49.99	A(128)				
C8H10O	O-ETHYLPHENOL	(G)	122.160	-34.82	A(128)				
C8H10O	P-ETHYLPHENOL	(S)	122.160	-53.71	A(128)				
C8H10O	P-ETHYLPHENOL	(G)	122.160	-34.55	A(128)				
C8H10O	M-METHYLANISOLE	(L)	122.160	-37.6	B(56)				
C8H10O	PHENETOLE	(L)	122.160	-38.6	B(56)				
C8H10O	M-XYLENOL	(U,S)	122.160	-55.7	C(744)				
C8H10O	O-XYLENOL	(U,S)	122.160	-58.0	C(744)				
C8H10O	P-XYLENOL	(U,S)	122.160	-57.8	C(744)				
C8H10O2	O-DIMETHOXYBENZENE	(L)	138.160	-70.1	A(201)				
C8H10O2	P-DIMETHOXYBENZENE	(S)	138.160	-78.5	C(744)				
C8H10O2	P-DIMETHOXYBENZENE	(L)	138.160	-70.6	C(744)				
C8H10O2	P-XYLENE-ALPHA,ALPHA'-DIOL	(S)	138.160	-94.23	A(1114)				
C8H10O2S	BENZYL METHYL SULFONE	(L)	170.226	-88.7	B(905)				
C8H10O2S	BENZYL METHYL SULFONE	(G)	170.226	-67.2	B(905)				
C8H10O2S	METHYL P-TOLYL SULFONE	(L)	170.226	-92.4	B(905)				
C8H10O2S	METHYL P-TOLYL SULFONE	(G)	170.226	-70.8	B(905)				
C8H10O3	1,2-CYCLOHEXANEDICARBOXYLIC ANHYDRIDE, CIS	(S)	154.160	-161.3	C(744)				
C8H10O3	1,2-CYCLOHEXANEDICARBOXYLIC ANHYDRIDE, TRANS	(S)	154.160	-162.0	C(744)				
C8H10O3S	P-ETHYLBENZENESULFONIC ACID	(G)	186.226			104.04	E(69)		

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log K_p
C8H10O4	1-CYCLOHEXENE-								
C8H10O4	1,4-DICARBOXYLIC ACID	(S)	170.160	-211.1	C(744)				
C8H10O4	2-CYCLOHEXENE-								
C8H10O4	1,4-DICARBOXYLIC ACID	(S)	170.160	-212.3	C(744)				
C8H10O4	DIETHYL ACETYLENEDICARBOXYLATE	(L)	170.160	-136.4	C(744)				
C8H10S	BENZYL METHYL SULFIDE	(L)	138.226	6.2	B(898)				
C8H10S	BENZYL METHYL SULFIDE	(G)	138.226	19.0	B(898)				
C8H10S	ETHYL PHENYL SULFIDE	(L)	138.226	5.2	B(898)				
C8H10S	ETHYL PHENYL SULFIDE	(G)	138.226	18.4	B(898)				
C8H11N	N,N-DIMETHYLANILINE	(L)	121.176	8.2	C(1547)	61.2	E(1547)	51.20	-37.531
C8H11N	N,N-DIMETHYLANILINE	(G)	121.176	20.10	C(1547)	87.5	E(1547)	55.26	-40.506
C8H11N	N-ETHYLANILINE	(L)	121.176	0.9	A(1547)	57.2	E(1547)	45.10	-33.054
C8H11N	N-ETHYLANILINE	(G)	121.176	13.40	B(1547)	84.1	E(1547)	49.58	-36.338
C8H11N	2-NORBORNANECARBONITRILE, ENDO	(L)	121.176			53.29	M(1334)		
C8H11N	2-NORBORNANECARBONITRILE, EXO	(L)	121.176			55.11	M(1334)		
C8H11N	2-OCTYNE-3-NITRILE	(L)	121.176	36.3	C(744)				
C8H11N	2,4-DIETHYLIMINE	(L)	121.176	-19.2	C(744)				
C8H11NO2	ETHYL 2-METHYL-								
C8H11NO2	3-PYRROLECARBOXYLATE	(S)	153.176	-95.6	C(1414)				
C8H11NO2	METHYL 2,4-DIMETHYL-								
C8H11NO2	3-PYRROLECARBOXYLATE	(S)	153.176	-98.3	C(1413)				
C8H11NO2	METHYL 3,5-DIMETHYL-2-								
C8H11NO2	PYRROLECARBOXYLATE	(S)	153.176	-98.3	C(1413)				
C8H11NO3	ETHYL 4-HYDROXY-5-METHYL-								
C8H11NO3	3-PYRROLECARBOXYLATE	(S)	169.176	-143.5	C(1414)				
C8H12	BICYCLO(2,2,2)OCT-2-ENE	(S)	108.176			50.30	M(1624)		
C8H12	1,3-DIMETHYLDIHYDROBENZENE (U,L)		108.176	-13.8	G(744)				
C8H12	1,4-DIMETHYL-1,3-CYCLOHEXADIENE(L)		108.176	-7.9	C(744)				
C8H12	1-METHYL-3-METHYLENE-								
C8H12	CYCLOHEXENE-1	(L)	108.176	-10.9	C(744)				
C8H12	VINYLCYCLOHEXENE	(G)	108.176	16.8	E(356)	96.4	E(356)	47.14	-34.551
C8H12N2O3	5,5-DIETHYLBARBITURIC ACID	(S)	184.192	-178.8	C(744)				
C8H12N2O6	1,2-BIS(3-CARBOXYPROPYONYL)-								
C8H12N2O6	HYDRAZINE	(S)	232.192	-317.8	B(1640)				
C8H12N4	2,2'-AZOBIS-2-METHYL-								
C8H12N4	PROPIONITRILE	(S)	164.208	54.6	B(974)				

IIIXVII

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298} (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C8H120	BETA-DICYCLOOCTANONE, CIS (U,L)	(L)	124.176	-67.8	A(74)				
C8H120	BETA-DICYCLOOCTANONE, TRANS(U,L)	(L)	124.176	-61.0	A(74)				
C8H120	3,5-DIMETHYL-2-CYCLOHEXEN-								
C8H120	1-ONE (L)	(L)	124.176	-59.9	C(744)				
C8H120	ETHYLENECYCLOHEXANONE, ENDO(U,S)	(S)	124.176	-55.5	A(90)				
C8H120	3-OXABICYCLO(3,2,2)NONANE . (S)	(S)	124.176			56.47	M(1624)		
C8H1202	1-CYCLOHEXENE-1-ACETIC ACID (S)	(S)	140.176	-115.7	C(744)				
C8H1202	DELTA-1-ALPHA-CYCLOHEXANE-								
C8H1202	ACETIC ACID (S)	(S)	140.176	-118.5	C(744)				
C8H1202	ETHYL SORBATE (L)	(L)	140.176	-148.5	C(744)				
C8H1202	2-OCTYNOIC ACID (L)	(L)	140.176	-79.2	C(744)				
C8H1203	2,2-DIETHYLSUCCINIC ANHYDRIDE(L)	(L)	156.176	-164.0	B(1538)				
C8H1203	DIETHYLSUCCINIC ANHYDRIDE, CIS(L)	(L)	156.176	-165.1	B(1538)				
C8H1203	DIETHYLSUCCINIC ANHYDRIDE, TRANS(L)	(L)	156.176	-166.7	B(1538)				
C8H1203	TETRAMETHYLSUCCINIC ANHYDRIDE(S)	(S)	156.176	-169.8	B(1538)				
C8H1204	CYCLOHEXANE-1,2-								
C8H1204	DICARBOXYLIC ACID, CIS . (S)	(S)	172.176	-229.8	B(1579)				
C8H1204	CYCLOHEXANE-1,2-								
C8H1204	DICARBOXYLIC ACID, TRANS (S)	(S)	172.176	-232.2	B(1579)				
C8H1204	CYCLOHEXANE-1,4-DICARBOXYLIC								
C8H1204	ACID, CIS (S)	(S)	172.176	-233.5	C(744)				
C8H1204	CYCLOHEXANE-1,4-DICARBOXYLIC								
C8H1204	ACID, TRANS (S)	(S)	172.176	-232.6	C(744)				
C8H1204	DIMETHYL TETRAMETHYLENE-								
C8H1204	ALPHA, BETA-DICARBOXYLATE (U,L)	(L)	172.176	-177.2	C(744)				
C8H1204	ETHYL 2-ACETYLACETOACETATE . (L)	(L)	172.176	-190.2	C(744)				
C8H1256	1,3,5,7-TETRAMETHYL-2,4,6,8,9,								
C8H1256	10-HEXATHIAADAMANTANE (S)	(S)	300.572			76.75	M(213)		
C8H13N0	N-PENTYLPROPIOLAMIDE . . . (S)	(S)	139.192	-46.0	C(744)				
C8H14	RICYCLO(2,2,2)OCTANE . . . (S)	(S)	110.192			50.18	M(1624)		
C8H14	CYCLOOCTENE (L)	(L)	110.192	-16.7	B(878)				
C8H14	CYCLOOCTENE (G)	(G)	110.192	-6.76	A(261)				
C8H14	3-CYCLOPENTYL-1-PROPENE . . (L)	(L)	110.192	-15.77	A(821)				
C8H14	2-CYCLOPROPYL-3-METHYL-1-BUTENE(L)	(L)	110.192	3.0	C(1373)				
C8H14	2-CYCLOPROPYL-1-PENTENE . . (L)	(L)	110.192	-7.0	C(1374)				
C8H14	2-CYCLOPROPYL-2-PENTENE . . (L)	(L)	110.192	-2.0	C(1374)				

XIXI

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298} (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C8H14	2,4-DIMETHYLCYCLOHEXENE . . (L)	(L)	110.192	-35.8	C(744)				
C8H14	1-ETHYLCYCLOHEXENE (L)	(L)	110.192	-25.53	A(821)				
C8H14	ETHYLENECYCLOHEXANE . . . (L)	(L)	110.192	-24.76	A(821)				
C8H14	2-METHYLNORBORNANE, ENDO . . (L)	(L)	110.192			56.93	M(1333)		
C8H14	2-METHYLNORBORNANE, EXO . . (L)	(L)	110.192			58.85	M(1333)		
C8H14	OCTAHYDROPENTALENE, CIS . . (L)	(L)	110.192	-30.9	B(75)				
C8H14	OCTAHYDROPENTALENE, TRANS . (L)	(L)	110.192	-24.9	B(75)				
C8H14	1-OCTYNE (G)	(G)	110.192	19.70	T(325)	106.75	T(325)	56.26	-41.236
C8H14	1,2,3-TRIMETHYLCYCLOPENTENE (L)	(L)	110.192	-37.9	C(744)				
C8H14	2,3,3-TRIMETHYLCYCLOPENTENE (L)	(L)	110.192	-37.6	C(744)				
C8H14	VINYLCYCLOHEXANE (L)	(L)	110.192	-21.22	A(821)				
C8H14BR2	1,2-DIBROMOCYCLOOCTANE . . . (L)	(L)	270.024	-31.7	B(878)				
C8H14BR2	1,2-DIBROMOCYCLOOCTANE . . . (G)	(G)	270.024	-18.7	B(878)				
C8H14N4	2,2'-HYDRAZOBIS-								
C8H14N4	2-METHYLPROPIONITRILE (S)	(S)	166.224	28.5	B(974)				
C8H14N4O5	TRIGLYCYLGLYCINE (U,S)	(S)	246.224	-282.6	C(744)				
C8H14O	CYCLOOCTANONE (L)	(L)	126.192	-76.8	C(1272)				
C8H14O	2,2-DIMETHYLCYCLOHEXANONE . (L)	(L)	126.192	-76.4	C(744)				
C8H14O	2-ETHYL-2-HEXENAL (L)	(L)	126.192	-62.46	A(1506)				
C8H14O	4-METHYL-1,6-HEPTADIEN-4-OL (L)	(L)	126.192	-49.8	C(744)				
C8H14O	2-OCTYNE-1-OL (L)	(L)	126.192	-38.6	C(744)				
C8H14O2	BUTYL CROTONATE (L)	(L)	142.192	-112.9	B(1286)				
C8H14O2	SEC-BUTYL CRUTONATE (L)	(L)	142.192	-114.4	B(1286)				
C8H14O2	CYCLOHEPTANECARBOXYLIC ACID (S)	(S)	142.192	-141.4	C(744)				
C8H14O2	CYCLOOCTANECARBOXYLIC ACID								
C8H14O2	(ACTIVE) (S)	(S)	142.192	-142.1	C(744)				
C8H14O2	2,5-DIMETHYL-3-HEXYNE-2,5-DIOL(L)	(L)	142.192	-87.4	C(744)				
C8H14O2	ISOBUTYL CROTONATE (L)	(L)	142.192	-115.6	B(1286)				
C8H14O2	ISOPROPYL 2-PENTENOATE . . . (L)	(L)	142.192	-116.6	B(1287)				
C8H14O2	ISOPROPYL 3-PENTENOATE . . . (L)	(L)	142.192	-114.2	B(1287)				
C8H14O2	ISOPROPYL 4-PENTENOATE . . . (L)	(L)	142.192	-111.9	B(1287)				
C8H14O2	3-METHYLCYCLOHEXANECARBOXYLIC								
C8H14O2	ACID (S)	(S)	142.192	-144.4	C(744)				
C8H14O2	PROPYL 2-PENTENOATE (L)	(L)	142.192	-112.2	B(1287)				
C8H14O2	PROPYL 3-PENTENOATE (L)	(L)	142.192	-109.8	B(1287)				
C8H14O2	PROPYL 4-PENTENOATE (L)	(L)	142.192	-108.3	B(1287)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C8H16N2O4	ETHYLENEDIAMINE	(S)	204.224	-233.1	B(982)				
C8H16N2O4	TARTARICDIETHYLAMIDE, D	(U,L)	204.224	-234.2	C(744)				
C8H16N2O4	TARTARICDIETHYLAMIDE, D,L	(U,L)	204.224	-234.0	C(744)				
C8H16N2O4	TARTARICDIETHYLAMIDE, MESO	(U,L)	204.224	-233.0	C(744)				
C8H16O	1,2-DIMETHYLCYCLOHEXANOL	(L)	128.208	-100.3	C(744)				
C8H16O	1,3-DIMETHYLCYCLOHEXANOL	(L)	128.208	-106.3	C(744)				
C8H16O	2,6-DIMETHYLCYCLOHEXANOL	(L)	128.208	-102.8	C(744)				
C8H16O	3,5-DIMETHYLCYCLOHEXANOL								
C8H16O	CIS, CIS, CIS	(S)	128.208	-102.4	C(1367)				
C8H16O	3,5-DIMETHYLCYCLOHEXANOL								
C8H16O	CIS, CIS, TRANS	(L)	128.208	-116.9	C(1367)				
C8H16O	3,5-DIMETHYLCYCLOHEXANOL								
C8H16O	CIS, TRANS, CIS	(L)	128.208	-126.2	C(1367)				
C8H16O	3-ETHYL-5-HEXEN-3-OL	(L)	128.208	-91.7	C(744)				
C8H16O	4-METHYL-1-HEPTEN-4-OL	(L)	128.208	-96.9	C(744)				
C8H16O	OCTANAL	(L)	128.208	-80.0	B(463)				
C8H16O	OCTANAL	(G)	128.208	-69.23	T(551)	119.66	T(551)	-19.91	14.594
C8H16O	2-OCTANONE	(L)	128.208	-91.9	B(463)	89.35	M(1084)	-33.54	24.587
C8H16O	3-OCTANONE	(L)	128.208	-91.5	B(463)				
C8H16O	4-OCTANONE	(L)	128.208	-92.3	B(463)				
C8H16O2	SEC-BUTYL BUTYRATE	(L)	144.208	-141.5	B(1287)				
C8H16O2	METHYL HEPTANOATE	(L)	144.208	-135.62	A(3)				
C8H16O2	OCTANOIC ACID	(L)	144.208	-151.75	A(3)				
C8H16O2	OCTANOIC ACID	(L)	144.208	-152.2	A(853)				
C8H16O2	PROPYL VALERATE	(L)	144.208	-141.4	B(1287)				
C8H16O2	2-PROPYLVALERIC ACID	(L)	144.208	-146.5	C(744)				
C8H16O2	TETRAMETHYLBUTENEDIOL								
C8H16O2	FUMAROID	(U,S)	144.208	-122.3	C(744)				
C8H16O2	TETRAMETHYLBUTENEDIOL								
C8H16O2	MALEINOID	(U,S)	144.208	-125.7	C(744)				
C8H17BR	1-BROMOOCTANE	(L)	193.132	-58.61	A(138)				
C8H17BR	1-BROMOOCTANE	(G)	193.132	-46.26	A(138)				
C8H17F	1-FLUOROCTANE	(L)	132.216	-105.0	C(744)				
C8H17N	CONIINE	(L)	127.224	-57.4	C(744)				
C8H17N	N-ISOBUTYLIDENEHUTYLAMINE	(L)	127.224	-31.76	A(96)				
C8H17N	N-ISOBUTYLIDENEHUTYLAMINE	(G)	127.224	-21.8	A(96)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C8H17NO	OCTANAMIDE	(S)	143.224	-113.1	B(1640)				
C8H18	2,2-DIMETHYLHEXANE	(L)	114.224	-62.63	A(1248)	79.33	E(1248)	0.71	-0.523
C8H18	2,2-DIMETHYLHEXANE	(G)	114.224	-53.71	T(128)	103.06	T(128)	2.56	-1.876
C8H18	2,3-DIMETHYLHEXANE	(L)	114.224	-60.40	A(1248)	81.91	E(1248)	2.17	-1.594
C8H18	2,3-DIMETHYLHEXANE	(G)	114.224	-51.13	T(129)	106.11	T(129)	4.23	-3.100
C8H18	2,4-DIMETHYLHEXANE	(L)	114.224	-61.47	A(1248)	82.62	E(1248)	0.89	-0.655
C8H18	2,4-DIMETHYLHEXANE	(G)	114.224	-52.44	T(130)	106.51	T(130)	2.80	-2.053
C8H18	2,5-DIMETHYLHEXANE	(L)	114.224	-62.26	A(1248)	80.96	E(1248)	0.60	-0.438
C8H18	2,5-DIMETHYLHEXANE	(G)	114.224	-53.21	T(131)	104.93	T(131)	2.50	-1.833
C8H18	3,3-DIMETHYLHEXANE	(L)	114.224	-61.58	A(1248)	81.12	E(1248)	1.23	-0.902
C8H18	3,3-DIMETHYLHEXANE	(G)	114.224	-52.61	T(132)	104.70	T(132)	3.17	-2.324
C8H18	3,4-DIMETHYLHEXANE	(L)	114.224	-60.23	A(1248)	82.97	E(1248)	2.03	-1.487
C8H18	3,4-DIMETHYLHEXANE	(G)	114.224	-50.91	T(133)	107.15	T(133)	4.14	-3.034
C8H18	3-ETHYLHEXANE	(L)	114.224	-59.88	A(1248)	84.95	E(1248)	1.79	-1.311
C8H18	3-ETHYLHEXANE	(G)	114.224	-50.40	T(127)	109.51	T(127)	3.95	-2.892
C8H18	3-ETHYL-2-METHYLPENTANE	(L)	114.224	-59.69	A(1248)	81.41	E(1248)	3.03	-2.224
C8H18	3-ETHYL-2-METHYLPENTANE	(G)	114.224	-50.48	T(134)	105.43	T(134)	5.08	-3.725
C8H18	3-ETHYL-3-METHYLPENTANE	(L)	114.224	-60.46	A(1248)	79.97	E(1248)	2.49	-1.974
C8H18	3-ETHYL-3-METHYLPENTANE	(G)	114.224	-51.38	T(135)	103.48	T(135)	4.76	-3.492
C8H18	2-METHYLHEPTANE	(L)	114.224	-60.98	A(1248)	84.16	E(1248)	0.92	-0.677
C8H18	2-METHYLHEPTANE	(G)	114.224	-51.50	T(124)	108.81	T(124)	3.05	-2.239
C8H18	3-METHYLHEPTANE	(L)	114.224	-60.34	A(1248)	85.66	E(1248)	1.12	-0.819
C8H18	3-METHYLHEPTANE	(G)	114.224	-50.82	T(125)	110.32	T(125)	3.28	-2.407
C8H18	4-METHYLHEPTANE	(L)	114.224	-60.17	A(1248)	83.72	E(1248)	1.87	-1.367
C8H18	4-METHYLHEPTANE	(G)	114.224	-50.69	T(126)	108.35	T(126)	4.00	-2.933
C8H18	OCTANE	(L)	114.224	-59.74	A(1248)	86.23	M(420)	1.55	-1.134
C8H18	OCTANE	(G)	114.224	-49.82	T(123)	111.55	T(123)	3.92	-2.872
C8H18	2,2,3-TRIMETHYLPENTANE	(L)	114.224	-61.44	A(1248)	78.30	E(1248)	2.21	-1.621
C8H18	2,2,3-TRIMETHYLPENTANE	(G)	114.224	-52.61	T(136)	101.62	T(136)	4.09	-2.997
C8H18	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(L)	114.224	-61.97	A(1248)	78.40	M(1152)	1.65	-1.210
C8H18	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(G)	114.224	-53.57	T(137)	101.15	T(137)	3.27	-2.396
C8H18	2,3,3-TRIMETHYLPENTANE	(L)	114.224	-60.63	A(1248)	79.93	E(1248)	2.54	-1.858
C8H18	2,3,3-TRIMETHYLPENTANE	(G)	114.224	-51.73	T(138)	103.14	T(138)	4.52	-3.309
C8H18	2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	(L)	114.224	-60.98	A(1248)	78.71	M(1165)	2.55	-1.868
C8H18	2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	(G)	114.224	-51.97	T(139)	102.31	T(139)	4.52	-3.315
C8H18	2,2,3,3-TETRAMETHYLBUTANE	(S)	114.224	-64.23	A(1248)	65.43	M(1300)	3.86	-2.388

LXXIV

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° ₂₉₈ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f° ₂₉₈ (kcal/mole)	Log Kp
C8H18	2,2,3,3-TETRAMETHYLBUTANE	(G)	114.224	-53.99	T(140)	93.06	T(140)	5.26	-3.856
C8H18N2O2	N-NITRODIBUTYLAMINE	(L)	174.240	-50.2	B(1039)				
C8H18N2O2	2-METHYL-1-NITROSOPROPANE								
C8H18N2O2	DIMER, CIS	(L)	174.240	-46.2	A(387)				
C8H18N2O2	2-METHYL-1-NITROSOPROPANE								
C8H18N2O2	DIMER, TRANS	(L)	174.240	-57.7	C(387)				
C8H18O	BUTYL ETHER	(L)	130.224	-90.3	T(510)				
C8H18O	BUTYL ETHER	(G)	130.224	-79.80	T(510)	119.60	T(510)	-21.16	15.508
C8H18O	SEC-BUTYL ETHER	(L)	130.224	-96.0	A(252)				
C8H18O	SEC-BUTYL ETHER	(G)	130.224	-86.20	T(511)	110.57	T(511)	-24.87	16.226
C8H18O	TERT-BUTYL ETHER	(L)	130.224	-96.1	B(1390)				
C8H18O	TERT-BUTYL ETHER	(G)	130.224	-87.20	T(512)	102.12	T(512)	-23.35	17.112
C8H18O	2-ETHYL-1-HEXANOL	(L)	130.224	-103.46	A(1506)				
C8H18O	4-METHYL-4-HEPTANOL	(L)	130.224	-134.4	C(744)				
C8H18O	OCTYL ALCOHOL	(L)	130.224	-101.62	A(215)				
C8H18O	OCTYL ALCOHOL	(G)	130.224	-85.34	T(528)	124.14	T(528)	-28.05	20.561
C8H18O2	TERT-BUTYL PEROXIDE	(L)	146.224	-91.1	B(64)				
C8H18O2	TERT-BUTYL PEROXIDE	(G)	146.224	-81.5	B(64)				
C8H18O2S	BUTYL SULFONE	(L)	178.290	-145.8	B(904)				
C8H18O2S	BUTYL SULFONE	(G)	178.290	-121.4	B(904)				
C8H18O2S	TERT-BUTYL SULFONE	(L)	178.290	-153.1	B(904)				
C8H18O2S	TERT-BUTYL SULFONE	(G)	178.290	-128.9	B(904)				
C8H18O2S	ISOBUTYL SULFONE	(L)	178.290	-149.4	B(904)				
C8H18O2S	ISOBUTYL SULFONE	(G)	178.290	-125.5	B(904)				
C8H18O5	TETRAETHYLENE GLYCOL	(L)	194.224	-233.6	B(1032)				
C8H18O9	PARA-FORMALDEHYDE MONOHYDRATE	(S)	258.224	-406.6	C(320)				
C8H18S	BUTYL SULFIDE	(L)	146.290	-52.74	A(952)	96.82	M(952)	7.66	-5.618
C8H18S	BUTYL SULFIDE	(G)	146.290	-39.99	T(814)	125.84	T(814)	11.76	-8.622
C8H18S	TERT-BUTYL SULFIDE	(L)	146.290	-60.3	B(899)				
C8H18S	TERT-BUTYL SULFIDE	(G)	146.290	-49.5	B(899)				
C8H18S	ETHYL HEXYL SULFIDE	(G)	146.290	-39.77	T(815)	126.89	T(815)	11.67	-8.553
C8H18S	HEPTYL METHYL SULFIDE	(G)	144.274	-39.19	T(816)	126.35	T(816)	3.10	-2.276
C8H18S	ISOBUTYL SULFIDE	(L)	146.290	-54.8	B(899)				
C8H18S	ISOBUTYL SULFIDE	(G)	146.290	-42.9	B(899)				
C8H18S	1-OCTANETHIOL	(G)	146.290	-40.68	T(902)	127.20	T(902)	10.67	-7.819
C8H18S	PENTYL PROPYL SULFIDE	(G)	146.290	-39.81	T(817)	127.21	T(817)	11.53	-8.454

LXXVI

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° ₂₉₈ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f° ₂₉₈ (kcal/mole)	Log Kp
C8H18S2	BUTYL DISULFIDE	(L)	178.356	-53.1	B(902)				
C8H18S2	BUTYL DISULFIDE	(G)	178.356	-37.86	T(875)	136.91	T(875)	12.87	-9.431
C8H18S2	TERT-BUTYL DISULFIDE	(L)	178.356	-59.8	B(902)				
C8H18S2	TERT-BUTYL DISULFIDE	(G)	178.356	-47.1	B(902)				
C8H18S2	ISOBUTYL DISULFIDE	(L)	178.356	-55.5	B(902)				
C8H18S2	ISOBUTYL DISULFIDE	(G)	178.356	-40.7	B(902)				
C8H19N	N-ISOBUTYLBUTYLAMINE	(L)	129.240	-51.59	A(96)				
C8H19N	N-ISOBUTYLBUTYLAMINE	(G)	129.240	-41.8	A(96)				
C8H19N	O-ISOBUTYLAMINE	(L)	129.240	-51.9	C(744)				
C8H20N2O5	N,N'-SULFINYL-								
C8H20N2O5	BIS(DIETHYLAMINE)	(L)	192.322	-75.5	B(232)				
C8H20N2O2S	TETRAETHYLSULFAMIDE	(L)	208.322	-149.8	B(232)				
C8H20N2S2	N,N'-DITHIO-								
C8H20N2S2	BIS(DIETHYLAMINE)	(L)	208.388	-29.4	B(232)				
C9H6N2O3	3-BENZOYLOXADIAZOL-5-OL	(S)	190.154	-62.8	C(1012)				
C9H6N2O3	5-BENZOYLOXADIAZOL-3-OL	(S)	190.154	-8.4	C(1012)				
C9H6O	PHENYLPROPIOL ALDEHYDE	(L)	130.138	29.8	C(744)				
C9H6O2	PHENYLPROPIOL ACID	(S)	146.138	-30.2	C(744)				
C9H6O6	TRIMESIC ACID	(S)	210.138	-283.9	C(744)				
C9H7FO2	ALPHA-FLUOROCINNAMIC ACID	(S)	166.146	-114.8	C(744)				
C9H7N	QUINOLINE	(L)	129.154	35.7	C(1118)	51.9	M(1118)	63.27	-46.376
C9H7NO	BENZOYLACETONITRILE	(S)	145.154	0.9	C(744)				
C9H7NO	8-HYDROXYQUINOLINE	(S)	145.154	-21.0	B(1440)				
C9H7NO	ALPHA-PHENYLISOXAZOLE	(S)	145.154	21.1	C(1467)				
C9H7NO	GAMMA-PHENYLISOXAZOLE	(L)	145.154	19.9	C(1467)				
C9H7NO	3-PHENYLPROPIOLAMIDE	(S)	145.154	10.2	C(744)				
C9H7NO4	M-NITROCINNAMIC ACID	(S)	193.154	-89.3	C(744)				
C9H7NO4	O-NITROCINNAMIC ACID	(S)	193.154	-85.9	C(744)				
C9H7NO4	P-NITROCINNAMIC ACID	(S)	193.154	-88.4	C(744)				
C9H7N3O2	BENZOYLAMINDIFURAZAN	(S)	189.170	20.8	C(1012)				
C9H8	INDENE	(L)	116.154	26.39	A(1438)	51.19	M(1438)	52.00	-38.117
C9H8F3NO	ALPHA,ALPHA,ALPHA-TRIFLUORO-								
C9H8F3NO	M-ACETOTOLUIDIDE	(S)	203.162	-202.8	C(744)				
C9H8N2O	METHYLPHENYL-1,3,4-OXADIAZOLE	(S)	160.170	10.5	C(1012)				
C9H8N2O	3-METHYL-5-PHENYLOXADIAZOLE	(S)	160.170	26.4	C(1012)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C9H8N2O	5-METHYL-3-PHENYLOXADIAZOLE	(S)	160.170	24.9	C(1012)				
C9H8N2O	PYRROL KETONE	(S)	160.170	-3.4	C(1413)				
C9H8N2O	P-TOLYL FURAZAN	(S)	160.170	40.6	C(1012)				
C9H8N2O2	METHYLPHENYL FURAZAN	(S)	176.170	31.8	C(1011)				
C9H8N2O2	5-METHYL-4-PHENYL- 1,2,3,6-DIOXADIAZOLE	(S)	176.170	40.7	C(1011)				
C9H8O	CINNAMALDEHYDE	(L)	132.154	-6.4	C(744)				
C9H8O	6,6A-DIHYDRO-1A-OXIRENE-								
C9H8O	(A)INDENE	(L)	132.154	-1.9	C(744)				
C9H8O	1-INDANONE	(L)	132.154	-31.8	C(744)				
C9H8O	2-INDANONE	(L)	132.154	-30.5	C(744)				
C9H8O	3-PHENYL-2-PROPYN-1-OL	(L)	132.154	18.1	C(744)				
C9H8O2	ATROPIC ACID	(S)	148.154	-74.5	C(744)				
C9H8O2	CINNAMIC ACID, CIS(M.P.42 C)	(S)	148.154	-75.9	B(376)				
C9H8O2	CINNAMIC ACID, CIS(M.P.58 C)	(S)	148.154	-74.5	B(376)				
C9H8O2	CINNAMIC ACID, CIS(M.P.68 C)	(S)	148.154	-72.1	B(376)				
C9H8O2	CINNAMIC ACID, TRANS	(S)	148.154	-80.60	A(1114)				
C9H8O3	P-HYDROXYCINNAMIC ACID,								
C9H8O3	CIS (M.P. 126 TO 127 C)	(S)	164.154	-121.5	C(744)				
C9H8O3	P-HYDROXYCINNAMIC ACID,								
C9H8O3	TRANS (M.P. 206 C)	(S)	164.154	-126.6	C(744)				
C9H8O4	UVITIC ACID	(U,S)	180.154	-190.8	C(744)				
C9H9ClO2	ETHYL O-CHLOROBENZOATE	(L)	184.619	-93.1	C(744)				
C9H9FO2	ETHYL P-FLUOROBENZOATE	(S)	168.162	-136.6	C(744)				
C9H9N	2-METHYLINDOLE	(L)	131.170	15.9	C(744)				
C9H9N	3-METHYLINDOLE	(L)	131.170	17.7	C(744)				
C9H9NO2	1-PHENYL-2-NITROPROPENE	(S)	163.170	-5.5	B(1640)				
C9H9NO3	HIPPURIC ACID	(S)	179.170	-145.54	A(630)	57.2	M(642)	-88.33	64.744
C9H9N3O6	TRINITROMESITYLENE	(S)	255.186	-30.5	B(981)				
C9H9N9O12	N,N',N''-TRIMETHYL-N,N',N''-								
C9H9N9O12	2,4,6-HEXANITRO-								
C9H9N9O12	1,3,5-BENZENETRIAMINE	(S)	435.234	32.0	B(983)				
C9H10	INDANE	(L)	118.170	2.56	A(1438)	56.01	M(1438)	36.04	-26.417
C9H10	ALPHA-METHYLSTYRENE	(G)	118.170	27.00	T(440)	91.7	T(440)	49.84	-36.531
C9H10	M-METHYLSTYRENE	(G)	118.170	27.60	T(443)	93.1	T(443)	50.02	-36.665
C9H10	O-METHYLSTYRENE	(G)	118.170	28.30	T(444)	91.7	T(444)	51.14	-37.484

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C9H10	P-METHYLSTYRENE	(G)	118.170	27.40	T(445)	91.7	T(445)	50.24	-36.825
C9H10	PHENYL CYCLOPROPANE	(L)	118.170	19.0	A(804)				
C9H10	PROPENYLBENZENE, CIS	(G)	118.170	29.00	T(441)	91.7	T(441)	51.84	-37.997
C9H10	PROPENYLBENZENE, TRANS	(G)	118.170	28.00	T(442)	90.9	T(442)	51.08	-37.439
C9H10N2	METHYLENEBISPYRROLE	(S)	146.186	32.9	C(1413)				
C9H10N2O2	P-TOLYLGLYOXIME(ALPHA)	(S)	178.186	-10.0	B(1013)				
C9H10N2O2	P-TOLYLGLYOXIME(BETA)	(S)	178.186	6.0	B(1013)				
C9H10N2O4	OINITROMESITYLENE	(U,S)	210.186	-12.4	C(744)				
C9H10N2O4	O-OMEGA-DINITROMESITYLENE	(U,S)	210.186	-33.0	C(744)				
C9H10O	2H-1,5-BENZODIOPINE	(L)	134.170	-57.75	A(201)				
C9H10O	PHENYL-2-PROPANONE	(L)	134.170	-39.0	B(1112)				
C9H10O	PHENYL-2-PROPANONE	(L)	134.170	-36.5	B(1403)				
C9H10O	PROPIOPHENONE	(L)	134.170	-39.95	A(251)				
C9H10O2	2,3-DIMETHYLBENZOIC ACID	(S)	150.170	-107.65	A(253)				
C9H10O2	2,4-DIMETHYLBENZOIC ACID	(S)	150.170	-109.58	A(253)				
C9H10O2	2,5-DIMETHYLBENZOIC ACID	(S)	150.170	-109.02	A(253)				
C9H10O2	2,6-DIMETHYLBENZOIC ACID	(S)	150.170	-105.33	A(253)				
C9H10O2	3,4-DIMETHYLBENZOIC ACID	(S)	150.170	-112.04	A(253)				
C9H10O2	3,5-DIMETHYLBENZOIC ACID	(S)	150.170	-111.48	A(253)				
C9H10O2	ETHYL BENZOATE	(L)	150.170	-88.4	C(744)				
C9H10O2	HYDROCINNAMIC ACID	(S)	150.170	-102.2	C(744)				
C9H10O2	2-HYDROXY-3-METHYLACETOPHENONE	(L)	150.170	-95.3	C(843)				
C9H10O2	1,2-INDANOLID, CIS	(S)	150.170	-89.2	B(1536)				
C9H10O2	1,2-INDANOLID, TRANS	(S)	150.170	-91.0	B(1536)				
C9H10O2	M-TOLYL ACETATE	(L)	150.170	-89.2	A(1445)				
C9H10O3	ETHYL P-HYDROXYBENZOATE	(S)	166.170	-144.5	C(744)				
C9H10O3	ETHYL SALICYLATE	(L)	166.170	-136.0	C(744)				
C9H10O3	2-HYDROXY-4-METHOXYACETOPHENONE	(S)	166.170	-127.6	C(843)				
C9H10O3	METHYL ANISATE	(U,S)	166.170	-118.5	C(744)				
C9H11F	FLUOROPSEUDOCUMENE	(U,S)	138.178	-56.4	C(744)				
C9H11N	1,2,3,4-TETRAHYDROQUINOLINE	(L)	133.186	7.6	C(744)				
C9H11NO	P-DIMETHYLAMINOBENZALDEHYDE	(S)	149.186	-32.8	B(1640)				
C9H11NO	2'-METHYLACETOPHENONE OXIME	(S)	149.186	-57.3	C(843)				
C9H11NO	3'-METHYLACETOPHENONE OXIME	(S)	149.186	-60.7	C(843)				
C9H11NO	4'-METHYLACETOPHENONE OXIME	(S)	149.186	-59.2	C(843)				
C9H11NO	PROPIONANILIDE	(S)	149.186	-53.6	C(744)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log K_p
C9H11N02	ETHYL P-AMINO BENZOATE . . .	(S)	165.186	-100.1	B(1440)				
C9H11N02	2-HYDROXY-3-METHYL- ACETOPHENONE OXIME (S)	(S)	165.186	-115.4	C(843)				
C9H11N02	2-HYDROXY-2-METHYL- ACETOPHENONE OXIME (S)	(S)	165.186	-108.7	C(843)				
C9H11N02	2-METHOXYACETOPHENONE OXIME (S)	(S)	165.186	-87.2	C(843)				
C9H11N02	NITROMESITYLENE (U,S)	(U,S)	165.186	-17.4	G(744)				
C9H11N02	ALPHA-NITROMESITYLENE . . . (S)	(S)	165.186	-27.8	C(744)				
C9H11N02	PHENYLALANINE, L (S)	(S)	165.186	-111.6	A(241)	51.06	M(241)	-50.56	37.058
C9H11N02	PHENYLALANINE, D,L (S)	(S)	165.186	-109.9	C(164)				
C9H11N03	2-HYDROXY-4-METHOXY- ACETOPHENONE OXIME (S)	(S)	181.186	-141.9	C(843)				
C9H11N03	2-HYDROXY-5-METHOXY- ACETOPHENONE OXIME (S)	(S)	181.186	-139.5	C(843)				
C9H11N03	TYROSINE, L (S)	(S)	181.186	-160.5	B(241)	51.15	M(241)	-92.18	67.566
C9H11N04	METHYL 3,5-DIMETHYL- 2,4-PYRROLEDICARBOXYLATE (S)	(S)	197.186	-198.2	C(1413)				
C9H11N32	DIMETHYL PHENYLDITHIO- IMIDOCARBONATE . . . (L)	(L)	197.318	34.5	C(744)				
C9H12	CUMENE (L)	(L)	120.186	-9.85	A(692)	66.87	E(1248)	29.70	-21.768
C9H12	CUMENE (G)	(G)	120.186	0.94	T(403)	92.87	T(403)	32.74	-23.995
C9H12	M-ETHYLTOLUENE (L)	(L)	120.186	-11.67	A(692)	69.90	E(1248)	26.97	-19.772
C9H12	M-ETHYLTOLUENE (G)	(G)	120.186	-0.46	T(404)	96.60	T(404)	30.22	-22.154
C9H12	O-ETHYLTOLUENE (L)	(L)	120.186	-11.11	A(692)	68.42	E(1248)	27.98	-20.506
C9H12	O-ETHYLTOLUENE (G)	(G)	120.186	0.29	T(405)	95.42	T(405)	31.33	-22.961
C9H12	P-ETHYLTOLUENE (L)	(L)	120.186	-11.92	A(692)	68.84	E(1248)	27.04	-19.820
C9H12	P-ETHYLTOLUENE (G)	(G)	120.186	-0.78	T(406)	95.34	T(406)	30.28	-22.195
C9H12	MESITYLENE (L)	(L)	120.186	-15.18	A(692)	65.38	M(1476)	24.81	-18.187
C9H12	MESITYLENE (G)	(G)	120.186	-3.84	T(409)	92.09	T(409)	28.19	-20.662
C9H12	PROPYLBENZENE (L)	(L)	120.186	-9.18	A(692)	68.78	M(994)	29.80	-21.842
C9H12	PROPYLBENZENE (G)	(G)	120.186	1.87	T(402)	95.76	T(402)	32.80	-24.045
C9H12	1,2,3-TRIMETHYLBENZENE . . . (L)	(L)	120.186	-14.01	A(692)	64.04	M(1475)	26.38	-19.337
C9H12	1,2,3-TRIMETHYLBENZENE . . . (G)	(G)	120.186	-2.29	T(407)	91.98	T(407)	29.77	-21.822
C9H12	1,2,4-TRIMETHYLBENZENE . . . (L)	(L)	120.186	-14.78	A(692)	67.73	M(1208)	24.51	-17.967
C9H12	1,2,4-TRIMETHYLBENZENE . . . (G)	(G)	120.186	-3.33	T(408)	94.59	T(408)	27.95	-20.489
C9H12N20	1-METHYL-1-TOLYLUREA . . . (S)	(S)	164.202	-49.9	B(1472)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log K_p
C9H120	P-METHYLPHENETOLE (L)	(L)	136.186	-42.5	C(744)				
C9H120	PHENYL PROPYL ETHER (L)	(L)	136.186	-42.2	C(744)				
C9H120	3,5,5-TRIMETHYLHEXANOL . . . (L)	(L)	136.186	-109.2	B(1066)				
C9H120	2,4,5-TRIMETHYLPHENOL . . . (S)	(S)	136.186	-64.1	C(744)				
C9H120	M-XYLENOL METHYL ETHER (U,L)	(U,L)	136.186	-41.9	C(744)				
C9H1202	CUMENE HYDROPEROXIDE (L)	(L)	152.186	-35.5	C(807)				
C9H1203	METACROLEIN (U,S)	(U,S)	188.186	-86.7	C(744)				
C9H1203S	P-PROPYLBENZENESULFONIC ACID (G)	(G)	200.252			113.21	E(69)		
C9H12S	BENZYL ETHYL SULFIDE (L)	(L)	152.252	-1.2	B(898)				
C9H12S	BENZYL ETHYL SULFIDE (G)	(G)	152.252	12.4	B(898)				
C9H13N	N-ETHYLBENZYLAMINE (L)	(L)	135.202	0.3	C(744)				
C9H13N	PSEUDOCUMIDINE (U,S)	(U,S)	135.202	-23.5	C(744)				
C9H13N0	5-ALDEHYDO-2,4-DIMETHYL- 3-ETHYLPYRROLE (S)	(S)	151.202	-58.7	C(1255)				
C9H13N02	ETHYL 2,3-DIMETHYLPYRROLE- 4-CARBOXYLATE (S)	(S)	167.202	-108.4	C(1255)				
C9H13N02	ETHYL 2,3-DIMETHYLPYRROLE- 5-CARBOXYLATE (S)	(S)	167.202	-105.0	C(1255)				
C9H13N02	ETHYL 2,4-DIMETHYLPYRROLE- 3-CARBOXYLATE (S)	(S)	167.202	-111.1	C(1255)				
C9H13N02	ETHYL 2,4-DIMETHYLPYRROLE- 5-CARBOXYLATE (S)	(S)	167.202	-110.1	C(1255)				
C9H13N02	ETHYL 2,5-DIMETHYLPYRROLE- 3-CARBOXYLATE (S)	(S)	167.202	-112.1	C(1255)				
C9H13N03	ETHYL 5-HYDROXY-2,4-DIMETHYL- 3-PYRROLECARBOXYLATE (S)	(S)	183.202	-160.9	C(1413)				
C9H13N5016	2,2,4,4-TETRAKIS(HYDROXY- METHYL)NITRATE)- PYRANOL NITRATE (S)	(S)	447.234	-189.6	B(984)				
C9H14	1-ETHYL-4-METHYL- 1,3-CYCLOHEXADIENE (L)	(L)	122.202	-11.4	C(744)				
C9H140	1,6-HEPTADIEN-4-ONE (L)	(L)	138.202	-41.6	C(744)				
C9H140	HEXAHYDRO-2-INDANONE, CIS . . (L)	(L)	138.202	-75.5	C(744)				
C9H140	HEXAHYDRO-2-INDANONE, TRANS (L)	(L)	138.202	-80.6	C(744)				
C9H140	3,5,5-TRIMETHYL-3- CYCLOHEXEN-1-ONE (L)	(L)	138.202	-76.1	C(744)				

XXXI

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f° (kcal/mole)	Log K_p
C9H14O2	1-CYCLOHEXENE-1-PROPIONIC ACID(S)		154.202	-123.0	C(744)				
C9H14O2	METHYL 2-CYCLOHEXENE-1-ACETATE(L)		154.202	-112.4	C(744)				
C9H14O2	METHYL DELTA-1-ALPHA- CYCLOHEXANEACETATE (L)		154.202	-106.0	C(744)				
C9H14O2	2-NONYNOIC ACID (L)		154.202	-92.8	C(744)				
C9H14O4	1,2-CYCLOPENTYLENE DIACETATE, CIS (L)		186.202	-210.2	B(1537)				
C9H14O4	1,2-CYCLOPENTYLENE DIACETATE, TRANS (L)		186.202	-210.95	B(1537)				
C9H14O4	DIMETHYL PENTAMETHYLENE- ALPHA,BETA-DICARBOXYLATE (U,L)		186.202	-206.2	C(744)				
C9H14O6	MANNITETTRIMETHYLAL . . . (U,S)		218.202	-239.9	C(744)				
C9H14O6	TRIACETIN (L)		218.202	-316.1	B(1472)				
C9H14O7	TRIMETHYL CITRATE (S)		234.202	-341.0	C(744)				
C9H14S	2-THIAADAMANTANE (S)		154.268	34.33	A(835)				
C9H15N	3-ETHYL-2,4,5-TRIMETHYLPYRROLE (S)		137.218	-18.5	C(1414)				
C9H15NO	N-HEXYLPROPIOLAMIDE (S)		153.218	-50.7	C(744)				
C9H15O4	HEXYLMALONIC ACID (S)		187.210	-216.7	B(1535)				
C9H16	2-CYCLOPROPYL-1-HEXENE . . . (L)		124.218	11.2	C(1374)				
C9H16	2-CYCLOPROPYL-2-HEXENE . (HB,L)		124.218	-3.8	C(1374)				
C9H16	HEXAHYDROINDAN, CIS (L)		124.218	-41.41	A(176)				
C9H16	HEXAHYDROINDAN, TRANS . . . (L)		124.218	-42.15	A(176)				
C9H16	1-ISOPROPYLCYCLOHEXENE . . . (L)		124.218	-50.9	C(744)				
C9H16	1-NONYNE (G)		124.218	14.77	T(326)	116.06	T(326)	58.26	-42.706
C9H16	SPIRO(4.4)NONANE (L)		124.218	-34.5	A(805)				
C9H16N2O5	ETHYL-ALPHA-CARBOETHOXY- GLYCYLGLYCINATE (U,S)		232.234	-270.8	C(744)				
C9H16N2O5	ETHYL-BETA-CARBOETHOXY- GLYCYLGLYCINATE (U,S)		232.234	-299.4	C(744)				
C9H16O	CYCLOHEXYL ETHYL KETONE . . (L)		140.218	-103.3	C(744)				
C9H16O	CYCLOHEPTYL METHYL KETONE . (L)		140.218	-114.5	C(744)				
C9H16O	METHYL 4-METHYLCYCLOHEXYL KETONE (L)		140.218	-125.0	C(744)				
C9H16O	2-NONYN-1-OL (L)		140.218	-52.4	C(744)				
C9H16O	2,4,6-TRIMETHYL- 1-CYCLOHEXEN-1-OL (L)		140.218	-98.1	C(744)				

LXXXI

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f° (kcal/mole)	Log K_p
C9H16O2	BUTYL 3-PENTENOATE (L)		156.218	-160.0	B(1287)				
C9H16O2	BUTYL 4-PENTENOATE (L)		156.218	-162.6	B(1287)				
C9H16O2	ISOBUTYL 3-PENTENOATE . . . (L)		156.218	-164.8	B(1287)				
C9H16O2	ISOBUTYL 4-PENTENOATE . . . (L)		156.218	-167.5	B(1287)				
C9H16O2	ISOPENTYL CRONATE (L)		156.218	-120.2	B(1286)				
C9H16O4	AZELAIC ACID (S)		188.218	-250.5	C(744)				
C9H16O4	HEXYLMALONIC ACID (S)		188.218	-250.9	B(1535)				
C9H16O4	DIMETHYL PIMELATE (L)		188.218	-216.2	C(744)				
C9H16O4	DIPROPYLMALONIC ACID (S)		188.218	-246.4	C(744)				
C9H17ClO2	ISOPENTYL 2-CHLOROBUTYRATE . (L)		192.683	-163.6	B(1384)				
C9H17ClO2	ISOPENTYL 3-CHLOROBUTYRATE . (L)		192.683	-154.1	B(1384)				
C9H17ClO2	ISOPENTYL 4-CHLOROBUTYRATE . (S)		192.683	-157.1	B(1384)				
C9H17NO	CYCLOHEPTYL METHYL KETONE OXIME (S)		155.234	-63.5	C(744)				
C9H17O6	TETRAHYDRO-3,3,5,5-TETRAKIS- (HYDROXYMETHYL)-4-HYDROXYPIRAN(S)		221.226	-274.37	B(986)				
C9H18	BUTYLCYCLOPENTANE (L)		126.234	-51.22	A(1196)	82.18	M(993)	11.68	-8.561
C9H18	BUTYLCYCLOPENTANE (G)		126.234	-40.22	T(355)	109.04	T(355)	14.67	-10.754
C9H18	CYCLONONANE (L)		126.234	-43.7	A(707)				
C9H18	CYCLONONANE (G)		126.234	-31.8	A(707)				
C9H18	CYCLOPROPYLHEXANE (L)		126.234	-16.6	C(1375)				
C9H18	ETHYLCYCLOHEPTANE (L)		126.234	-54.2	C(744)				
C9H18	METHYL-1-PROPYLCYCLOPENTANE(U,L)		126.234	-59.6	C(744)				
C9H18	1-NONENE (G)		126.234	-24.74	T(292)	119.86	T(292)	26.93	-19.736
C9H18	PROPYLCYCLOHEXANE (L)		126.234	-56.98	A(1196)	74.54	M(423)	8.20	-6.009
C9H18	PROPYLCYCLOHEXANE (G)		126.234	-46.20	T(380)	100.27	T(380)	11.31	-8.288
C9H18	1,1,3-TRIMETHYLCYCLOHEXANE . (L)		126.234	-66.3	C(744)				
C9H18	1,2,3-TRIMETHYLCYCLOHEXANE . (L)		126.234	-65.1	C(744)				
C9H18	1,3,5-TRIMETHYLCYCLOHEXANE, CIS(G)		126.234	-51.48	T(381)	93.30	T(381)	8.10	-5.941
C9H18	1,3,5-TRIMETHYLCYCLOHEXANE, TRANS(G)		126.234	-49.37	T(382)	95.60	T(382)	9.53	-6.985
C9H18O	CYCLOHEPTYLMETHYLCARBINOL (U,L)		142.234	-118.9	C(744)				
C9H18O	1-ETHYL-3-METHYLCYCLOHEXANOL (L)		142.234	-138.7	C(744)				
C9H18O	4-METHYL-1-OCTEN-4-OL . . . (L)		142.234	-96.2	C(744)				
C9H18O	NONANAL (G)		142.234	-74.16	T(552)	128.97	T(552)	-17.91	13.124
C9H18O	2,2,3-TRIMETHYL-5-HEXEN-3-OL (L)		142.234	-98.1	C(744)				
C9H18O2	BUTYL VALERATE (L)		158.234	-147.9	B(1287)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C9H18O2	ISOBUTYL ALACRATE	(L)	158.234	-151.1	B(1287)				
C9H18O2	METHYL OCTANOATE	(L)	158.234	-150.0	B(1287)				
C9H18O2	METHYL OCTANOATE	(L)	158.234	-141.2	AC (3)				
C9H18O2	NONANOIC ACID	(L)	158.234	-157.3	AC (3)				
C9H18O2	NONANOIC ACID	(L)	158.234	-158.2	AC (853)				
C9H20	3,3-DIETHYLPENTANE	(L)	128.250	-65.85	AC (693)				
C9H20	3,3-DIETHYLPENTANE	(G)	128.250	-55.44	T(168)	110.31	T(168)	8.38	-6.141
C9H20	1,2-DIMETHYLHEPTANE	(L)	128.250	-69.11	E(820)				
C9H20	2,2-DIMETHYLHEPTANE	(G)	128.250	-59.00	T(147)	113.07	T(147)	4.00	-2.929
C9H20	2,3-DIMETHYLHEPTANE	(L)	128.250	-66.74	E(820)				
C9H20	2,3-DIMETHYLHEPTANE	(G)	128.250	-56.32	T(148)	116.79	T(148)	5.57	-4.080
C9H20	2,4-DIMETHYLHEPTANE	(L)	128.250	-67.74	E(820)				
C9H20	2,4-DIMETHYLHEPTANE	(G)	128.250	-57.48	T(149)	116.79	T(149)	4.41	-3.230
C9H20	2,5-DIMETHYLHEPTANE	(L)	128.250	-67.82	E(820)				
C9H20	2,5-DIMETHYLHEPTANE	(G)	128.250	-57.48	T(150)	116.79	T(150)	4.41	-3.230
C9H20	2,6-DIMETHYLHEPTANE	(L)	128.250	-68.52	E(820)				
C9H20	2,6-DIMETHYLHEPTANE	(G)	128.250	-58.17	T(151)	114.03	T(151)	4.54	-3.327
C9H20	3,3-DIMETHYLHEPTANE	(L)	128.250	-67.92	E(820)				
C9H20	3,3-DIMETHYLHEPTANE	(G)	128.250	-57.74	T(152)	115.25	T(152)	4.61	-3.376
C9H20	3,4-DIMETHYLHEPTANE	(L)	128.250	-66.05	E(820)				
C9H20	3,4-DIMETHYLHEPTANE	(G)	128.250	-55.63	T(153)	117.48	T(153)	6.05	-4.435
C9H20	3,5-DIMETHYLHEPTANE	(L)	128.250	-67.13	E(820)				
C9H20	1,5-DIMETHYLHEPTANE	(G)	128.250	-56.79	T(154)	116.10	T(154)	5.30	-3.887
C9H20	1,4-DIMETHYLHEPTANE	(L)	128.250	-67.83	E(820)				
C9H20	1,4-DIMETHYLHEPTANE	(G)	128.250	-57.74	T(155)	113.87	T(155)	5.02	-3.678
C9H20	3-ETHYLHEPTANE	(L)	128.250	-65.71	E(820)				
C9H20	3-ETHYLHEPTANE	(G)	128.250	-55.08	T(145)	118.52	T(145)	6.29	-4.611
C9H20	4-ETHYLHEPTANE	(L)	128.250	-65.62	E(820)				
C9H20	4-ETHYLHEPTANE	(G)	128.250	-55.08	T(146)	118.52	T(146)	6.29	-4.611
C9H20	3-ETHYL-2,2-DIMETHYLPENTANE	(L)	128.250	-66.92	E(820)				
C9H20	3-ETHYL-2,2-DIMETHYLPENTANE	(G)	128.250	-56.96	T(169)	109.96	T(169)	6.96	-5.104
C9H20	3-ETHYL-2,3-DIMETHYLPENTANE	(L)	128.250	-66.02	E(820)				
C9H20	3-ETHYL-2,3-DIMETHYLPENTANE	(G)	128.250	-55.82	T(170)	112.14	T(170)	7.45	-5.463
C9H20	3-ETHYL-2,4-DIMETHYLPENTANE	(L)	128.250	-66.30	E(820)				
C9H20	3-ETHYL-2,4-DIMETHYLPENTANE	(G)	128.250	-56.18	T(171)	112.30	T(171)	7.05	-5.164
C9H20	3-ETHYL-2-METHYLHEXANE	(L)	128.250	-65.96	E(820)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C9H20	3-ETHYL-2-METHYLHEXANE	(G)	128.250	-55.63	T(156)	116.79	T(156)	6.26	-4.586
C9H20	3-ETHYL-3-METHYLHEXANE	(L)	128.250	-66.73	E(820)				
C9H20	3-ETHYL-3-METHYLHEXANE	(G)	128.250	-56.48	T(158)	115.25	T(158)	5.87	-4.300
C9H20	3-ETHYL-4-METHYLHEXANE	(L)	128.250	-65.35	E(820)				
C9H20	3-ETHYL-4-METHYLHEXANE	(G)	128.250	-54.94	T(159)	116.79	T(159)	6.95	-5.092
C9H20	4-ETHYL-2-METHYLHEXANE	(L)	128.250	-67.04	E(820)				
C9H20	4-ETHYL-2-METHYLHEXANE	(G)	128.250	-56.79	T(157)	115.41	T(157)	5.51	-4.037
C9H20	2-METHYLOCTANE	(L)	128.250	-67.18	E(820)				
C9H20	2-METHYLOCTANE	(G)	128.250	-56.45	T(142)	118.52	T(142)	4.92	-3.607
C9H20	3-METHYLOCTANE	(L)	128.250	-66.49	E(820)				
C9H20	3-METHYLOCTANE	(G)	128.250	-55.77	T(143)	119.90	T(143)	5.19	-3.804
C9H20	4-METHYLOCTANE	(L)	128.250	-66.40	E(820)				
C9H20	4-METHYLOCTANE	(G)	128.250	-55.77	T(144)	119.90	T(144)	5.19	-3.804
C9H20	NONANE	(L)	128.250	-65.84	AC (693)	94.09	M(420)	2.81	-2.063
C9H20	NONANE	(G)	128.250	-54.74	T(141)	120.86	T(141)	5.93	-4.349
C9H20	2,2,3-TRIMETHYLHEXANE	(L)	128.250	-67.62	E(820)				
C9H20	2,2,3-TRIMETHYLHEXANE	(G)	128.250	-57.65	T(160)	111.34	T(160)	5.86	-4.296
C9H20	2,2,4-TRIMETHYLHEXANE	(L)	128.250	-67.86	E(820)				
C9H20	2,2,4-TRIMETHYLHEXANE	(G)	128.250	-58.13	T(161)	111.34	T(161)	5.38	-3.945
C9H20	2,2,5-TRIMETHYLHEXANE	(L)	128.250	-70.44	E(820)				
C9H20	2,2,5-TRIMETHYLHEXANE	(G)	128.250	-60.71	T(162)	109.96	T(162)	3.21	-2.355
C9H20	2,3,3-TRIMETHYLHEXANE	(L)	128.250	-67.13	E(820)				
C9H20	2,3,3-TRIMETHYLHEXANE	(G)	128.250	-57.08	T(163)	112.14	T(163)	6.19	-4.539
C9H20	2,3,4-TRIMETHYLHEXANE	(L)	128.250	-66.39	E(820)				
C9H20	2,3,4-TRIMETHYLHEXANE	(G)	128.250	-56.18	T(164)	114.37	T(164)	6.43	-4.712
C9H20	2,3,5-TRIMETHYLHEXANE	(L)	128.250	-68.08	E(820)				
C9H20	2,3,5-TRIMETHYLHEXANE	(G)	128.250	-58.03	T(165)	112.30	T(165)	5.20	-3.808
C9H20	2,4,4-TRIMETHYLHEXANE	(L)	128.250	-67.37	E(820)				
C9H20	2,4,4-TRIMETHYLHEXANE	(G)	128.250	-57.56	T(166)	112.14	T(166)	5.71	-4.188
C9H20	3,3,4-TRIMETHYLHEXANE	(L)	128.250	-66.52	E(820)				
C9H20	3,3,4-TRIMETHYLHEXANE	(G)	128.250	-56.39	T(167)	113.52	T(167)	6.47	-4.744
C9H20	2,2,3,3-TETRAMETHYLPENTANE	(L)	128.250	-66.54	AC (693)				
C9H20	2,2,3,3-TETRAMETHYLPENTANE	(G)	128.250	-56.70	T(172)	106.69	T(172)	8.20	-6.009
C9H20	2,2,3,4-TETRAMETHYLPENTANE	(L)	128.250	-66.40	AC (693)				
C9H20	2,2,3,4-TETRAMETHYLPENTANE	(G)	128.250	-56.64	T(173)	108.23	T(173)	7.80	-5.716
C9H20	2,2,4,4-TETRAMETHYLPENTANE	(L)	128.250	-66.95	AC (693)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C9H20	2,2,4,4-TETRAMETHYLPENTANE	(G)	128.250	-57.83	T(174)	103.13	T(174)	8.13	-5.959
C9H20	2,3,3,4-TETRAMETHYLPENTANE	(L)	128.250	-66.46	A(693)				
C9H20	2,3,3,4-TETRAMETHYLPENTANE	(G)	128.250	-56.46	T(175)	107.65	T(175)	8.15	-5.975
C9H20N2O	TETRAETHYLUREA	(S)	172.266	-130.1	B(1472)				
C9H20O	4-ETHYL-4-HEPTANOL	(L)	144.250	-143.0	C(744)				
C9H20O	NONYL ALCOHOL	(L)	144.250	-109.75	A(215)				
C9H20O	NONYL ALCOHOL	(G)	144.250	-92.47	T(529)	133.45	T(529)	-28.25	20.703
C9H20O	3,5,5-TRIMETHYL-1-HEXANOL	(L)	144.250	-109.2	B(1066)				
C9H20O?	O-ISOBUTOXYMETHANE	(L)	160.250	-133.2	C(744)				
C9H20S	PUTYL PENTYL SULFIDE	(G)	160.316	-44.92	T(818)	136.52	T(818)	13.36	-9.792
C9H20S	ETHYL HEPTYL SULFIDE	(G)	160.316	-44.70	T(819)	136.20	T(819)	13.67	-10.023
C9H20S	HEXYL PROPYL SULFIDE	(G)	160.316	-44.73	T(820)	136.52	T(820)	13.55	-9.931
C9H20S	METHYL OCTYL SULFIDE	(G)	160.316	-44.17	T(821)	135.66	T(821)	14.42	-10.567
C9H20S	1-NONANETHIOL	(G)	160.316	-45.61	T(903)	136.51	T(903)	12.67	-9.289

LXXXVI

C10H5N3O6	1,3,8-TRINITRONAPHTHALENE	(S)	263.164	6.9	B(54)				
C10H5N3O6	1,4,5-TRINITRONAPHTHALENE	(S)	263.164	9.9	B(54)				
C10H6N2O4	1,5-DINITRONAPHTHALENE	(S)	218.164	8.1	B(986)				
C10H6N2O4	1,8-DINITRONAPHTHALENE	(S)	218.164	11.1	B(986)				
C10H6N2O5	2,4-DINITRO-1-NAPHTHOL	(S)	234.164	-41.9	B(58)				
C10H6O	PHENYLCYCLOBUTADIENOQUINONE	(S)	142.148	-20.12	A(809)				
C10H6O2	1,2-NAPHTHOQUINONE	(S)	158.148	-38.1	C(744)				
C10H6O2	1,4-NAPHTHOQUINONE	(S)	158.148	-43.9	C(913)				
C10H6O4	FURIL	(S)	190.148	-80.3	C(744)				
C10H6O8	PYROMELLITIC ACID	(S)	254.148	-368.2	C(744)				
C10H7Cl	1-CHLORONAPHTHALENE	(L)	162.613	12.7	B(1384)				
C10H7Cl	2-CHLORONAPHTHALENE	(S)	162.613	12.9	B(1384)				
C10H7I	1-IODONAPHTHALENE	(L)	254.066	38.6	B(1382)				
C10H7I	2-IODONAPHTHALENE	(S)	254.066	34.6	B(1382)				
C10H7NO2	1,2-NAPHTHOQUINONE 1-OXIME	(S)	173.164	-12.0	C(744)				
C10H7NO2	1,2-NAPHTHOQUINONE 2-OXIME	(S)	173.164	-11.3	C(744)				
C10H7NO2	1,4-NAPHTHOQUINONE OXIME	(S)	173.164	-15.4	C(744)				
C10H7NO2	1-NITRONAPHTHALENE	(S)	173.164	11.0	B(54)				
C10H7N3	NAPHTHOTRIAZOLE, ANG	(S)	169.180	64.8	A(447)				
C10H7N3	NAPHTHOTRIAZOLE, LIN	(S)	169.180	68.1	A(447)				
C10H8	AZULENE	(S)	128.164	50.7	A(803)				

LXXXVII

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C10H8	AZULENE	(G)	128.164	66.90	T(473)	80.75	T(473)	84.10	-61.647
C10H8	NAPHTHALENE	(S)	128.164	18.66	T(446)	39.89	M(1398)	48.05	-35.218
C10H8	NAPHTHALENE	(G)	128.164	36.08	T(446)	80.22	T(446)	53.44	-39.172
C10H8N2O2	DIMETHYL-2,2'-BENZO-4,5,4',5'- BISOXAZOLE, ANG	(S)	188.180	-48.1	C(446)				
C10H8N2O2	DIMETHYL-2,2'-BENZO-4,5,4',5'- BISOXAZOLE, LIN	(S)	188.180	-49.4	C(446)				
C10H8N2O2	METHYLBENZYL FURAZAN	(S)	188.180	30.3	C(1012)				
C10H8N2O2	4-PHENYLURACIL	(S)	188.180	-80.8	C(744)				
C10H8N8	AMMONIUM SALT OF HEXACYANOISOBUTYLENE	(S)	240.228	121.4	A(154)				
C10H8O	1-NAPHTHOL	(S)	144.164	-26.8	B(855)				
C10H8O	2-NAPHTHOL	(S)	144.164	-29.8	B(855)				
C10H8O	3-PHENYLCYCLOBUTENONE	(S)	144.164	6.65	A(809)				
C10H8O	4-PHENYL-3-BUTYN-2-ONE	(L)	144.164	21.5	C(744)				
C10H8O2	METHYL PHENYLPROPIOLATE	(L)	160.164	-17.4	C(744)				
C10H8O2	1,4-NAPHTHALENEDIOL	(S)	160.164	-73.0	C(112)				
C10H8O3	2-PHENYLSUCCINIC ANHYDRIDE	(S)	176.164	-119.7	B(1538)				
C10H8O4	BENZYLIDENEMALONIC ACID	(S)	192.164	-157.0	C(744)				
C10H8O4	FURDIN	(S)	192.164	-98.9	C(744)				
C10H8O4	3,4-(METHYLENEDIOXY)CINNAMIC ACID, CIS (M.P. 99 TO 100 C)	(S)	192.164	-135.4	C(744)				
C10H8O4	3,4-(METHYLENEDIOXY)CINNAMIC ACID, TRANS (M.P. 238 C)	(S)	192.164	-144.5	C(744)				
C10H9FO2	METHYL ALPHA-FLUOROCINNAMATE	(S)	180.172	-103.2	C(744)				
C10H9N	1-NAPHTHYLAMINE	(S)	143.180	16.8	C(744)				
C10H9N	2-NAPHTHYLAMINE	(S)	143.180	11.3	C(1618)				
C10H9N	PHENYLPYRROLE	(S)	143.180	36.8	C(744)				
C10H9N	ALPHA-PHENYLPYRROLE	(S)	143.180	35.9	C(1413)				
C10H9N	1-PHENYLPYRROLE	(S)	143.180	39.5	C(1413)				
C10H9N	QUINALDINE	(L)	143.180	41.0	C(744)				
C10H9NO	5-METHYL-3-PHENYLISOXAZOLE	(S)	159.180	5.5	C(1467)				
C10H9NO	ALPHA-PHENYL-GAMMA- METHYLISOXAZOLE	(S)	159.180	6.6	C(1467)				
C10H9NO4	5,6-DIMETHOXYPHthalaldehydic- ACID ANHYDRIDE, UXIME	(S)	207.180	-95.7	C(744)				

LXXXVI

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole K)	Source	$\Delta G_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Log K_p
C10H9N04	3,4-DIMETHOXYPHthalimide . . .	(S)	207.180	-151.0	B(713)				
C10H9N04	N-PHENYLtartrImide, D . . .	(L)	207.180	-161.5	C(744)				
C10H9N04	N-PHENYLtartrImide, DL . . .	(L)	207.180	-161.3	C(744)				
C10H9N3	NAPHTHO-(2',3',4,5)-								
C10H9N3	1,2,3-TRIAZOLE . . .	(S)	171.196	-0.8	A(447)				
C10H9N3	NAPHTHOTRIAZOLE, ANG . . .	(S)	171.196	-4.2	A(447)				
C10H9N3O2	P-TOLUYLAMINOfURAZAN . . .	(S)	203.196	12.1	C(1012)				
C10H10	1,2-DIHYDRONAPHTHALENE . . .	(L)	130.180	16.5	C(744)				
C10H10	1,4-DIHYDRONAPHTHALENE . . .	(S)	130.180	18.8	C(744)				
C10H10	4-PHENYL-1-BUTYNE . . .	(L)	130.180	58.6	C(744)				
C10H10N2O2	METHYL-P-METHOXY-								
C10H10N2O2	PHENYLfURAZANE . . .	(S)	190.196	21.4	C(1011)				
C10H10N2O3	4-P-METHOXYPHENYL-5-METHYL-								
C10H10N2O3	1,2,3,6-DIOXADIAZOLE . . .	(S)	206.196	6.7	C(1011)				
C10H10N2O3	METHYL-P-METHOXY-								
C10H10N2O3	PHENYLfUROXAZANE . . .	(S)	206.196	-1.9	C(1011)				
C10H10N2O3	2-NAPHTHYLAMINE NITRATE . . .	(S)	206.196	-42.3	C(1618)				
C10H10O	3,4-DIHYDRO-1(2H)-								
C10H10O	NAPHTHALENONE . . .	(L)	146.180	-50.1	C(609)				
C10H10O	4-PHENYL-3-BUTEN-2-ONE . . .	(S)	146.180	-23.6	C(744)				
C10H10O	3-PHENYLCYCLOHUTANONE . . .	(L)	146.180	-13.52	A(809)				
C10H10O2	4-ALLYL-1,2-(METHYLENEDIoxy)-								
C10H10O2	BENZENE . . .	(L)	162.180	-37.0	C(744)				
C10H10O2	METHYL CINNAMATE . . .	(S)	162.180	-69.5	C(744)				
C10H10O2	ALPHA-METHYLCINNAMIC ACID . . .	(S)	162.180	-81.5	C(744)				
C10H10O2	BETA-METHYLCINNAMIC ACID . . .	(S)	162.180	-83.0	C(744)				
C10H10O2	1,2-(METHYLENEDIoxy)-4-								
C10H10O2	PHOPENYLBENZENE . . .	(L)	162.180	-47.2	C(744)				
C10H10O2	PHENYLISOCROTONIC ACID, CIS . . .	(S)	162.180	-85.7	C(744)				
C10H10O3	HYDROXY-METHYLCINNAMIC ACID,								
C10H10O3	CIS (M.P. 91 TO 92 C) (U,S)		178.180	-112.9	C(744)				
C10H10O3	HYDROXY-METHYLCINNAMIC ACID,								
C10H10O3	TRANS (M.P. 182 TO 183 C) (U,S)		178.180	-119.1	C(744)				
C10H10O3	ALLO-P-METHOXYCINNAMIC ACID,								
C10H10O3	CIS (M.P. 66 C) (S)		178.180	-107.8	C(744)				
C10H10O3	P-METHOXYCINNAMIC ACID, TRANS . . .	(S)	178.180	-117.1	C(744)				

LXXXVII

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole K)	Source	$\Delta G_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Log K_p
C10H10O4	BENZYLALONIC ACID . . .	(S)	194.180	-198.8	C(744)				
C10H10O4	2,4-DIACETYLRESORCINOL . . .	(S)	194.180	-178.6	C(145)				
C10H10O4	4,6-DIACETYLRESORCINOL . . .	(S)	194.180	-184.2	C(145)				
C10H10O4	5,6-DIMETHOXYPHthalide . . .	(S)	194.180	-145.4	C(744)				
C10H10O4	DIMETHYL ISOPHTHALATE . . .	(S)	194.180	-170.2	C(744)				
C10H10O4	DIMETHYL PHTHALATE . . .	(L)	194.180	-161.6	C(744)				
C10H10O4	DIMETHYL TEREPHTHALATE . . .	(S)	194.180	-169.7	C(744)				
C10H10O4	PHENYLSUCCINIC ACID . . .	(S)	194.180	-199.8	B(1538)				
C10H10O5	5,6-DIMETHOXYPHthalALDEHYDIC								
C10H10O5	ACID . . .	(S)	210.180	-192.4	C(744)				
C10H10O6	4,5-DIMETHOXYPHthalIC ACID . . .	(S)	226.180	-257.1	C(744)				
C10H11N03	N-BENZOYLALANINE . . .	(S)	193.196	-147.3	C(744)				
C10H11N03	N-BENZOYLSARCOSINE . . .	(S)	193.196	-135.6	C(744)				
C10H11N03	N-(PHENYLACETYL)GLYCINE . . .	(S)	193.196	-150.5	C(744)				
C10H11N03	N-(M-TOLUYL)GLYCINE . . .	(S)	193.196	-148.4	C(744)				
C10H11N03	N-(O-TOLUYL)GLYCINE . . .	(S)	193.196	-147.7	C(744)				
C10H11N03	N-(P-TOLUYL)GLYCINE . . .	(S)	193.196	-147.9	C(744)				
C10H11N04	N-(P-ANISOYL)GLYCINE . . .	(S)	209.196	-180.3	C(744)				
C10H11N5	RENZAL-3-HYDRAZINO-5-								
C10H11N5	METHYL-1,2,4-TRIAZOLE . . .	(S)	201.228	61.6	B(1616)				
C10H12	1-PHENYL-1-BUTENE . . .	(L)	132.196	-1.7	C(744)				
C10H12	1-PHENYL-2-BUTENE . . .	(L)	132.196	13.4	C(744)				
C10H12	2-PHENYL-2-BUTENE . . .	(S)	132.196	9.4	C(744)				
C10H12	4-PHENYL-1-BUTENE . . .	(L)	132.196	7.2	C(744)				
C10H12	1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE(L)		132.196	-12.3	C(721)				
C10H12	1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE(L)		132.196	-6.0	(CALC)	60.10	M(954)	35.97	-26.367
C10H12	1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE(G)		132.196	6.6	B(1621)	89.2	F(1621)	39.90	-29.243
C10H12	3A,4,7,7A-TETRAHYDRO-								
C10H12	4,7-METHANOINDENE . . .	(S)	132.196	38.66	B(83)				
C10H12O	P-ALLYLANISOLE . . .	(L)	148.196	-14.6	C(744)				
C10H12O	BUTYROPHENONE . . .	(L)	148.196	-45.13	A(251)				
C10H12O	ETHYL 1-PHENYLVINYl ETHER . . .	(L)	148.196	-33.3	C(744)				
C10H12O	P-PROPENYLANISOLE . . .	(S)	148.196	-24.8	C(744)				
C10H12O	1,2,3,4-TETRAHYDRO-1-NAPHTHOL(S)		148.196	-68.2	B(163)				
C10H12O2	4-ALLYL-2-METHOXYPHENOL . . .	(L)	164.196	-62.7	C(744)				
C10H12O2	4-ALLYL-2-METHOXYPHENOL . . .	(L)	164.196	-62.9	C(744)				

LXXXVI

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log K_p
C10H12O2	ETHYL PHENYLACETATE	(L)	164.196	-95.0	C(843)				
C10H12O2	P-ISOPROPYLBENZOIC ACID . .	(S)	164.196	-111.3	C(744)				
C10H12O2	P-MENTHA-3,6-DIENE-2,5-DIONE	(S)	164.196	-78.1	C(744)				
C10H12O2	2-METHOXY-4-PROPENYLPHENOL .	(L)	164.196	-71.7	C(744)				
C10H12O2	PROPYL BENZOATE	(L)	164.196	-94.9	C(744)				
C10H12O2	1,2,3,4-TETRAHYDRO-								
C10H12O2	NAPHTHALENE-1,2-DIOL, CIS	(S)	164.196	-99.28	B(1536)				
C10H12O2	1,2,3,4-TETRAHYDRO-								
C10H12O2	NAPHTHALENE-1,2-DIOL, TRANS	(S)	164.196	-100.63	B(1536)				
C10H12O2	1,2,3,4-TETRAHYDRO-								
C10H12O2	NAPHTHALENE-2,3-DIOL, CIS	(S)	164.196	-99.26	B(1536)				
C10H12O2	1,2,3,4-TETRAHYDRO-								
C10H12O2	NAPHTHALENE-2,3-DIOL, TRANS	(S)	164.196	-100.58	B(1536)				
C10H12O2	1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE-								
C10H12O2	HYDROPEROXIDE (S)		164.196	-31.1	C(609)				
C10H12O2	2,3,4-TRIMETHYLBENZOIC ACID	(S)	164.196	-116.30	A(255)				
C10H12O2	2,3,5-TRIMETHYLBENZOIC ACID	(S)	164.196	-116.79	A(255)				
C10H12O2	2,3,6-TRIMETHYLBENZOIC ACID	(S)	164.196	-113.68	A(255)				
C10H12O2	2,4,5-TRIMETHYLBENZOIC ACID	(S)	164.196	-118.46	A(255)				
C10H12O2	2,4,6-TRIMETHYLBENZOIC ACID	(S)	164.196	-114.20	A(255)				
C10H12O2	3,4,5-TRIMETHYLBENZOIC ACID	(S)	164.196	-119.71	A(255)				
C10H12O2	2,4-XYLACETIC ACID	(S)	164.196	-118.2	C(571)				
C10H12O3	PROPYL P-HYDROXYBENZOATE . .	(S)	180.196	-148.9	C(744)				
C10H12O3	PROPYL SALICYLATE	(L)	180.196	-143.8	C(744)				
C10H12O4	DIMETHYL 1,4-CYCLOHEXADIENE-								
C10H12O4	1,4-DICARBOXYLATE (S)		196.196	-169.0	C(744)				
C10H13N	1,2,3,4-TETRAHYDROQUINALDINE	(L)	147.212	-1.2	C(744)				
C10H13NO2	ETHYL N-METHYLCARBANILATE .	(L)	179.212	-101.2	B(984)				
C10H13NO2	P-MENTHA-3,6-DIENE-2,5-DIONE								
C10H13NO2	OXIME . (S)		179.212	-51.7	C(744)				
C10H13NO2	PHENACETIN	(S)	179.212	-98.4	C(744)				
C10H13NO3	ETHYL 2,4-DIMETHYL-5-FORMYL-								
C10H13NO3	3-PYRROLECARBOXYLATE (S)		195.212	-150.3	C(1413)				
C10H13NO3	ETHYL 4-FORMYL-3,5-DIMETHYL-								
C10H13NO3	2-PYRROLECARBOXYLATE (S)		195.212	-150.1	C(1413)				
C10H13NO3	4'-METHOXY-2'-METHYL-								

LXXXVII

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log K_p
C10H13NO3	ACETOPHENONE OXIME (S)		195.212	-95.2	C(843)				
C10H13NO3	4'-METHOXY-3'-METHYL-								
C10H13NO3	ACETOPHENONE OXIME (S)		195.212	-100.0	C(843)				
C10H13NO3	2-METHYL-2-NITRO-								
C10H13NO3	1-PHENYL-1-PROPANOL (S)		195.212	-75.9	B(300)				
C10H13NO3	2-METHYL-2-NITRO-								
C10H13NO3	3-PHENYL-1-PROPANOL (S)		195.212	-83.1	B(300)				
C10H13NO4	DIMETHYL 3,5-DIMETHYL-								
C10H13NO4	2,4-PYRROLEDICARBOXYLATE (S)		211.212	-199.1	C(1413)				
C10H13NO6	PHENYLAMMONIUM D-BITARTRATE	(S)	243.212	-305.3	C(744)				
C10H13NO6	PHENYLAMMONIUM BIRACEMATE .	(S)	243.212	-307.3	C(744)				
C10H14	BUTYLBENZENE	(L)	134.212	-15.28	A(1195)	76.77	M(994)	31.03	-22.743
C10H14	BUTYLBENZENE	(G)	134.212	-3.30	T(410)	105.04	T(410)	34.58	-25.346
C10H14	SEC-BUTYLBENZENE	(L)	134.212	-15.89	A(1195)				
C10H14	SEC-BUTYLBENZENE	(G)	134.212	-4.17	A(1195)				
C10H14	TERT-BUTYLBENZENE	(L)	134.212	-16.92	A(1195)	66.6	M(656)	32.42	-23.763
C10H14	TERT-BUTYLBENZENE	(G)	134.212	-5.42	A(1195)				
C10H14	M-CYMENE	(L)	134.212	-18.69	E(1195)				
C10H14	M-CYMENE	(G)	134.212	-6.79	E(1195)				
C10H14	O-CYMENE	(L)	134.212	-18.19	E(1195)				
C10H14	O-CYMENE	(G)	134.212	-6.10	E(1195)				
C10H14	P-CYMENE	(L)	134.212	-18.7	E(1195)	73.28	M(655)	28.65	-20.999
C10H14	P-CYMENE	(G)	134.212	-6.9	E(1195)				
C10H14	M-DIETHYLBENZENE	(L)	134.212	-17.44	E(1195)				
C10H14	M-DIETHYLBENZENE	(G)	134.212	-5.22	T(411)	104.99	T(411)	32.67	-23.949
C10H14	O-DIETHYLBENZENE	(L)	134.212	-16.94	E(1195)				
C10H14	O-DIETHYLBENZENE	(G)	134.212	-4.53	T(412)	103.81	T(412)	33.72	-24.713
C10H14	P-DIETHYLBENZENE	(L)	134.212	-17.47	E(1195)				
C10H14	P-DIETHYLBENZENE	(G)	134.212	-5.32	T(413)	103.73	T(413)	32.95	-24.152
C10H14	2-ETHYL-M-XYLENE	(L)	134.212	-19.84	E(1195)				
C10H14	2-ETHYL-M-XYLENE	(G)	134.212	-7.11	E(1195)				
C10H14	2-ETHYL-P-XYLENE	(L)	134.212	-20.38	E(1195)				
C10H14	2-ETHYL-P-XYLENE	(G)	134.212	-7.91	E(1195)				
C10H14	3-ETHYL-O-XYLENE	(L)	134.212	-19.84	E(1195)				
C10H14	3-ETHYL-O-XYLENE	(G)	134.212	-7.11	E(1195)				
C10H14	4-ETHYL-O-XYLENE	(L)	134.212	-20.38	E(1195)				

XX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298} (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C10H14	4-ETHYL-O-XYLENE	(G)	134.212	-7.91	F(1195)				
C10H14	4-ETHYL-M-XYLENE	(L)	134.212	-20.38	E(1195)				
C10H14	4-ETHYL-P-XYLENE	(G)	134.212	-7.91	E(1195)				
C10H14	5-ETHYL-M-XYLENE	(L)	134.212	-20.86	E(1195)				
C10H14	5-ETHYL-P-XYLENE	(G)	134.212	-8.50	E(1195)				
C10H14	HEXAHYDRONAPHTHALENE	(L)	134.212	0.93	C(744)				
C10H14	ISOBUTYLBENZENE	(L)	134.212	-16.70	A(1195)				
C10H14	ISOBUTYLBENZENE	(G)	134.212	-5.15	A(1195)				
C10H14	O-PROPYLTOLUENE	(L)	134.212	-17.52	E(1195)				
C10H14	O-PROPYLTOLUENE	(G)	134.212	-5.17	E(1195)				
C10H14	M-PROPYLTOLUENE	(L)	134.212	-18.02	E(1195)				
C10H14	M-PROPYLTOLUENE	(G)	134.212	-5.86	F(1195)				
C10H14	P-PROPYLTOLUENE	(L)	134.212	-18.06	E(1195)				
C10H14	P-PROPYLTOLUENE	(G)	134.212	-5.97	E(1195)				
C10H14	3A,4,7,7A-TETRAHYDRO- 4,7-METHANOINDAN	(S)	134.212	-5.6	B(90)				
C10H14	1,2,3,4-TETRAMETHYLBENZENE	(L)	134.212	-23.0	E(1195)	69.45	M(655)	25.49	-18.684
C10H14	1,2,3,4-TETRAMETHYLBENZENE	(G)	134.212	-10.02	T(414)	99.55	T(414)	29.50	-21.620
C10H14	1,2,3,5-TETRAMETHYLBENZENE	(L)	134.212	-23.54	E(1195)	74.06	M(655)	23.58	-17.281
C10H14	1,2,3,5-TETRAMETHYLBENZENE	(G)	134.212	-10.71	T(415)	100.99	T(415)	28.38	-20.800
C10H14	1,2,4,5-TETRAMETHYLBENZENE	(S)	134.212	-30.7	B(71)	58.70	M(655)	21.00	-15.389
C10H14	1,2,4,5-TETRAMETHYLBENZENE	(L)	134.212	-23.58	B(1195)	71.83	M(655)	24.20	-17.739
C10H14	1,2,4,5-TETRAMETHYLBENZENE	(G)	134.212	-10.82	T(416)	100.03	T(416)	28.55	-20.929
C10H14N2	NICOTINE	(L)	162.228	10.2	C(744)				
C10H14N2O	N-TOLYL-N'-ETHYLUREA	(S)	178.228	-70.6	B(1472)				
C10H14O	CARYACROL	(L)	150.212	-63.0	C(744)				
C10H14O	P-MENTHA-6,8-DIEN-2-ONE	(L)	150.212	-43.1	C(744)				
C10H14O	THYMOL	(S)	150.212	-67.8	C(744)				
C10H14O	THYMOL	(L)	150.212	-64.1	C(744)				
C10H14O	2,6,6-TRIMETHYL-2,4- CYCLOHEPTADIEN-1-ONE (L)	(L)	150.212	-43.1	C(744)				
C10H14O	P-XYLENOLETHYL ETHER	(U,L)	150.212	-48.9	C(744)				
C10H14O2	P-CYMENE-2,5-DIOL	(S)	166.212	-110.6	C(744)				
C10H14O3	CAMPHORIC ANHYDRIDE	(S)	182.212	-166.0	C(744)				
C10H14O3S	P-RUTYLBENZENESULFONIC ACID (G)	(G)	214.278			122.38	E(69)		
C10H14O4	DIMETHYL CYCLOHEXENE-								

DX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298} (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C10H14O4	1,4-DICARBOXYLATE (S)	(S)	198.212	-191.6	C(744)				
C10H14O8	SYMMETRICAL-TETRAMETHYL ETHANETETRACARBOXYLATE (S)	(S)	262.212	-373.0	C(744)				
C10H15N	N,N-DIETHYLANILINE	(L)	149.228	-3.9	E(1547)	63.5	E(1547)	57.84	-42.396
C10H15N	N,N-DIETHYLANILINE	(G)	149.228	9.6	E(1547)	92.4	E(1547)	62.72	-45.975
C10H15N02	ETHYL 2,4,5-TRIMETHYL- 3-PYRROLECARBOXYLATE (S)	(S)	181.228	-114.1	C(1413)				
C10H15N03	ALPHA-NITROCAMPHOR	(U,S)	197.228	-80.8	C(744)				
C10H16	ADAMANTANE	(S)	136.228	-31.6	C(209)	46.81	M(209)	32.95	-24.149
C10H16	ALLOCI-MENE, CIS	(L)	136.228	-5.9	A(580)				
C10H16	BORNEOCAMPHENE	(U,L)	136.228	-15.4	C(744)				
C10H16	CAMPHENE (CRYST)	(S)	136.228	-16.6	C(744)				
C10H16	3-DECEN-1-YNE, CIS	(L)	136.228	23.67	A(1364)				
C10H16	3-DECEN-1-YNE, TRANS	(L)	136.228	23.97	A(1364)				
C10H16	1,5-DIMETHYL-3-VINYL- CYCLOHEXENE (L)	(L)	136.228	-28.6	C(744)				
C10H16	HEXAHYDRO-4,7-METHANOINDAN	(L)	136.228	-32.9	B(90)				
C10H16	1-ISOPROPYL-4-METHYL- 1,3-CYCLOHEXADIENE (L)	(L)	136.228	-13.5	C(744)				
C10H16	P-MENTHA-1,3-DIENE	(L)	136.228	-13.8	C(744)				
C10H16	P-MENTHA-1,8-DIENE, D	(L)	136.228	-13.2	A(580)				
C10H16	P-MENTHA-1,8-DIENE, DL	(L)	136.228	-12.4	A(580)				
C10H16	7-METHYL-3-METHYLENE- 1,6-OCTADIENE (L)	(L)	136.228	3.3	A(580)				
C10H16	1-(2-METHYLPROPENYL)CYCLOHEXENE(L)	(L)	136.228	-22.4	C(744)				
C10H16	DCTAHYDRONAPHTHALENE	(L)	136.228	-34.7	C(303)				
C10H16	2-PINENE	(L)	136.228	-4.1	A(580)				
C10H16	2(10)-PINENE	(L)	136.228	-2.0	A(580)				
C10H16	BETA-PINOLENE	(U,L)	136.228	-14.9	C(744)				
C10H16	SYLVESTRENE	(U,L)	136.228	-19.5	C(744)				
C10H16	TERECAMPHENE (INACTIVE)	(U,L)	136.228	-18.9	C(744)				
C10H16	1,7,7-TRIMETHYLTRICYCLO- (2,2,1,0-2,6)-HEPTANE (S)	(S)	136.228	-16.9	C(744)				
C10H16N6O19	DIPENTAERYTHRITOL								
C10H16N6O19	HEXANITRATE (S)	(S)	524.276	-234.0	B(986)				
C10H16O	CAMPHOR	(S)	152.228	-78.1	B(1461)				

XCII

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log K_p
C10H160	CARONE (U,L)		152.228	-89.7	C(744)				
C10H160	CARVENONE (U,L)		152.228	-76.6	C(744)				
C10H160	DIHYDROEUCALYPTONE (U,L)		152.228	-58.2	C(744)				
C10H160	3,7-DIMETHYL-2,6-OCTADIENAL (L)		152.228	-47.4	C(744)				
C10H160	P-MENTH-8-EN-2-ONE (L)		152.228	-74.6	C(744)				
C10H160	P-MENTH-4(8)-EN-3-ONE (L)		152.228	-72.3	C(744)				
C10H160	P-MENTH-8-EN-3-ONE (L)		152.228	-68.0	C(744)				
C10H160	OCTAHYDRO-2(1H)-								
C10H160	NAPHTHALENONE, CIS . (L)		152.228	-81.4	C(744)				
C10H160	OCTAHYDRO-2(1H)-								
C10H160	NAPHTHALENONE, TRANS (L)		152.228	-83.7	C(744)				
C10H160	3-THUJANONE (L)		152.228	-54.0	C(744)				
C10H1602	CAMPHOLENIC ACID(M.P. 50 C)(U,S)		168.228	-121.2	C(744)				
C10H1602	2,7-DIMETHYL-2,6-								
C10H1602	UCTADIENIC ACID (L)		168.228	-105.6	C(744)				
C10H1602	ETHYL CYCLOHEXYLIDENE-								
C10H1602	ACETATE (L)		168.228	-117.6	C(744)				
C10H1602	ETHYLCYCLOHEXENE-1 ACETATE . (L)		168.228	-124.2	G(744)				
C10H1602	ETHYL 3,5-DIMETHYLSORBATE . (L)		168.228	-133.3	C(744)				
C10H1602	ETHYL 2-OCTYNOATE (L)		168.228	-92.9	C(744)				
C10H1602	ISOCAMPHOLYTIC ACID (U,S)		168.228	-123.9	C(744)				
C10H1602	METHYL 2-CYCLOHEX-1-ENE-								
C10H1602	PROPIONATE (L)		168.228	-135.4	C(744)				
C10H1602	METHYL 2-CYCLOHEXYLIDENE-								
C10H1602	PROPIONATE (L)		168.228	-110.0	C(744)				
C10H1602	METHYL 4-METHYLCYCLOHEX-1-ENE-								
C10H1602	ACETATE (L)		168.228	-122.6	C(744)				
C10H1602	METHYL 4-METHYLCYCLOHEXYLIDENE-								
C10H1602	ACETATE (L)		168.228	-110.7	C(744)				
C10H1603	3-(1-HYDROXY-1-METHYLETHYL)-								
C10H1603	6-OXOHEPTANOIC ACID, GAMMA-								
C10H1603	LACTONE (S)		184.228	-182.7	C(571)				
C10H1603	OCTAHYDRONAPHTHALENE OZONIDE (S)		184.228	-141.9	C(303)				
C10H1603	ALPHA-TANACETONEKETOCARBOXYLIC								
C10H1603	ACID (S)		184.228	-160.0	C(744)				
C10H1603	TRIETHYLSUCCINIC ANHYDRIDE (S)		184.228	-177.6	B(1538)				

XCIII

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log K_p
C10H1604	CAMPHORIC ACID, D (S)		200.228	-242.3	C(744)				
C10H1604	1,2-CYCLOHEXYLENE								
C10H1604	DIACETATE, CIS (S)		200.228	-225.0	B(1537)				
C10H1604	1,2-CYCLOHEXYLENE								
C10H1604	DIACETATE, TRANS (S)		200.228	-223.4	B(1537)				
C10H1604	DIMETHYL 1,3-CYCLOHEXANE-								
C10H1604	DICARBOXYLATE, CIS (L)		200.228	-189.4	C(1368)				
C10H1604	DIMETHYL 1,3-CYCLOHEXANE-								
C10H1604	DICARBOXYLATE, TRANS(L)		200.228	-191.3	C(1368)				
C10H1604	DIMETHYL 1,4-CYCLOHEXANE-								
C10H1604	DICARBOXYLATE (S)		200.228	-212.6	C(744)				
C10H1604	DIMETHYL 2,3-DIMETHYL-1,3-CYCLO-								
C10H1604	BUTANEDICARBOXYLATE, CIS (L)		200.228	-197.4	C(744)				
C10H16S4	1,3,5,7-TETRAMETHYL-2,4,6,8-								
C10H16S4	TETRATHIAADAMANTANE (S)		264.492			71.90	M(213)		
C10H17CL	CAMPHENE HYDROCHLORIDE (L)		172.693	-57.1	C(744)				
C10H17CL	2(10)-PINENE HYDROCHLORIDE . (S)		172.693	-57.7	C(744)				
C10H17NO	CAMPHOR OXIME (S)		167.244	-39.2	C(744)				
C10H18	BICYCLOPENTANE (L)		138.244	-41.9	A(806)				
C10H18	DECAHYDRONAPHTHALENE, CIS . (L)		138.244	-52.45	A(1401)	63.34	M(954)	16.47	-12.074
C10H18	DECAHYDRONAPHTHALENE, CIS . (G)		138.244	-40.38	T(474)	90.28	T(474)	20.51	-15.034
C10H18	DECAHYDRONAPHTHALENE, TRANS (L)		138.244	-55.14	A(1401)	63.32	M(954)	13.79	-10.107
C10H18	DECAHYDRONAPHTHALENE, TRANS (G)		138.244	-43.57	T(475)	89.52	T(475)	17.55	-12.862
C10H18	1-OECYNE (G)		138.244	9.85	T(327)	125.36	T(327)	60.28	-44.186
C10H18	2-ETHYL-4,4-DIMETHYL-								
C10H18	CYCLOHEXENE (L)		138.244	-48.0	C(744)				
C10H18	P-MENTH-3-ENE (L)		138.244	-30.7	C(744)				
C10H18	THUJANE (L)		138.244	-46.1	C(744)				
C10H18	1,3,3-TRIMETHYLNORHORNANE . (L)		138.244	-52.2	C(744)				
C10H18	SPINOSIN (L)		138.244	-48.0	A(805)				
C10H18CL2	P-MENTHA-1,3-DIENE-								
C10H18CL2	DIHYDROCHLORIDE (L)		209.158	-99.1	C(744)				
C10H18O	BORNANOL (S)		154.244	-68.2	(11836)				
C10H18O	BORNANOL (S)		154.244	-68.2	(11836)				
C10H18O	BORNANOL (S)		154.244	-68.2	(11836)				
C10H18O	BORNANOL (S)		154.244	-68.2	(11836)				

XCIV

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log <i>K_p</i>
C10H180	BORNEOL (SYNTHETIC)	(L)	154.244	-87.9	C(744)				
C10H180	DECAHYDRO-1-NAPHTHOL, CIS	(S)	154.244	-101.9	C(843)				
C10H180	DECAHYDRO-1-NAPHTHOL, TRANS	(S)	154.244	-105.9	C(843)				
C10H180	DECAHYDRO-2-NAPHTHOL, CIS	(S)	154.244	-104.7	C(843)				
C10H180	DECAHYDRO-2-NAPHTHOL, TRANS	(S)	154.244	-106.2	C(843)				
C10H180	9-HYDROXYDECAHYDRO-								
C10H180	NAPHTHALENE, TRANS	(S)	154.244	-106.0	B(163)				
C10H180	ISOBORNEOL	(S)	154.244	-82.9	C(1636)				
C10H180	4-PROPYL-1,6-HEPTADIEN-4-OL	(L)	154.244	-83.0	C(744)				
C10H180	TERPINEOL	(S)	154.244	-85.6	C(744)				
C10H180	3-THUJANOL	(L)	154.244	-75.1	C(744)				
C10H1802	4-ISOPROPYLCYCLOHEXANE-								
C10H1802	CARBOXYLIC ACID	(S)	170.244	-158.8	C(744)				
C10H1802	9-PEROXYDECAHYDRO-								
C10H1802	NAPHTHALENE, TRANS	(S)	170.244	-83.2	B(163)				
C10H1802	1,2,2,3-TETRAMETHYLCYCLOPENTANE-								
C10H1802	CARBOXYLIC ACID	(S)	170.244	-143.2	C(744)				
C10H1804	DIETHYL DIMETHYLSUCCINATE, MESO	(S)	202.244	-230.3	C(744)				
C10H1804	DIETHYL DIMETHYLSUCCINATE,								
C10H1804	RACEMIC	(L)	202.244	-231.5	C(744)				
C10H1804	DIETHYL DIMETHYLSUCCINATE, SYM	(L)	202.244	-235.8	C(744)				
C10H1804	DIMETHYL SUBERATE	(L)	202.244	-221.2	C(744)				
C10H1804	HEPTYLMALONIC ACID	(S)	202.244	-257.7	B(1535)				
C10H1804	SEBACIC ACID	(S)	202.244	-257.1	C(744)				
C10H1804	TRIETHYLSUCCINIC ACID	(S)	202.244	-254.1	B(1538)				
C10H19N	CAMPYLAMINE	(U·L)	153.260	-55.1	C(744)				
C10H19N3O4	LEUCYLGLYCYLGLYCINE	(U·S)	245.276	-254.3	C(744)				
C10H20	BUTYLCYCLOHEXANE	(L)	140.260	-62.91	A(1196)	82.45	M(423)	9.62	-7.052
C10H20	BUTYLCYCLOHEXANE	(G)	140.260	-50.95	T(383)	109.58	T(383)	13.49	-9.890
C10H20	CYCLODECANE	(L)	140.260	-49.55	A(271)				
C10H20	1-CYCLOPENTYLPENTANE	(G)	140.260	-45.15	T(356)	118.35	T(356)	16.68	-12.224
C10H20	1-DECENE	(L)	140.260	-41.73	A(1236)	101.58	M(950)	25.10	-18.396
C10H20	1-DECENE	(G)	140.260	-29.67	T(293)	129.17	T(293)	28.93	-21.206
C10H20	1,1-DIMETHYL-2-PENTYL-								
C10H20	CYCLOPROPANE	(L)	140.260	-40.0	A(710)				
C10H20	1-ISOPROPYL-4-METHYLCYCLOHEXANE	(L)	140.260	-108.7	C(744)				

XCV

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log <i>K_p</i>
C10H20	1,2,3,4-TETRAMETHYL-3-PROPYLCYCLOHEXANE	(L)	140.260	-120.5	C(744)				
C10H20	2,2,3,5-TETRAMETHYL-								
C10H20	3-HEXENE, CIS	(L)	140.260	-44.18	A(1236)				
C10H20	2,2,3,5-TETRAMETHYL-								
C10H20	3-HEXENE, TRANS	(L)	140.260	-33.67	A(1236)				
C10H200	DECANAL	(G)	156.260	-79.09	T(553)	138.28	T(553)	-15.90	11.654
C10H200	MENTHOL	(S)	156.260	-114.7	C(744)				
C10H200	4-PROPYL-1-HEPTEN-4-OL	(L)	156.260	-73.9	C(744)				
C10H200	4-PROPYL-1-HEPTEN-4-OL	(L)	156.260	-105.4	C(744)				
C10H2002	DECANOIC ACID	(S)	172.260	-170.70	A(3)				
C10H2002	DECANOIC ACID	(L)	172.260	-163.68	A(3)				
C10H2002	METHYL NONANOATE	(L)	172.260	-147.40	A(3)				
C10H22	DECANE	(L)	142.276	-71.95	A(1200)	101.79	M(420)	4.12	-3.020
C10H22	DECANE	(G)	142.276	-59.67	T(176)	130.17	T(176)	7.94	-5.819
C10H22	2,2-DIMETHYLOCTANE	(L)	142.276	-75.25	E(820)				
C10H22	2,2-DIMETHYLOCTANE	(G)	142.276	-63.93	T(183)	122.29	T(183)	6.03	-4.419
C10H22	2,3-DIMETHYLOCTANE	(L)	142.276	-72.87	E(820)				
C10H22	2,3-DIMETHYLOCTANE	(G)	142.276	-61.25	T(184)	126.01	T(184)	7.60	-5.570
C10H22	2,4-DIMETHYLOCTANE	(L)	142.276	-73.83	E(820)				
C10H22	2,4-DIMETHYLOCTANE	(G)	142.276	-62.41	T(185)	126.01	T(185)	6.44	-4.720
C10H22	2,5-DIMETHYLOCTANE	(L)	142.276	-73.87	E(820)				
C10H22	2,5-DIMETHYLOCTANE	(G)	142.276	-62.41	T(186)	126.01	T(186)	6.44	-4.720
C10H22	2,6-DIMETHYLOCTANE	(L)	142.276	-73.97	E(820)				
C10H22	2,6-DIMETHYLOCTANE	(G)	142.276	-62.41	T(187)	126.01	T(187)	6.44	-4.720
C10H22	2,7-DIMETHYLOCTANE	(L)	142.276	-74.67	E(820)				
C10H22	2,7-DIMETHYLOCTANE	(G)	142.276	-63.10	T(188)	123.25	T(188)	6.57	-4.817
C10H22	3,3-DIMETHYLOCTANE	(L)	142.276	-74.05	E(820)				
C10H22	3,3-DIMETHYLOCTANE	(G)	142.276	-62.67	T(189)	124.47	T(189)	6.64	-4.866
C10H22	3,4-DIMETHYLOCTANE	(L)	142.276	-72.14	E(820)				
C10H22	3,4-DIMETHYLOCTANE	(G)	142.276	-60.56	T(190)	126.70	T(190)	8.08	-5.925
C10H22	3,5-DIMETHYLOCTANE	(L)	142.276	-73.17	E(820)				
C10H22	3,5-DIMETHYLOCTANE	(G)	142.276	-61.72	T(191)	126.70	T(191)	6.92	-5.075
C10H22	3,6-DIMETHYLOCTANE	(L)	142.276	-73.27	E(820)				
C10H22	3,6-DIMETHYLOCTANE	(G)	142.276	-61.72	T(192)	125.32	T(192)	7.33	-5.376
C10H22	4,4-DIMETHYLOCTANE	(L)	142.276	-73.91	E(820)				
C10H22	4,4-DIMETHYLOCTANE	(G)	142.276	-62.67	T(193)	124.47	T(193)	6.64	-4.866

XCVI

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	$\log K_p$
C10H22	4,5-DIMETHYLOCTANE	(L)	142.276	-72.67	E(820)				
C10H22	4,5-DIMETHYLOCTANE	(G)	142.276	-60.58	T(194)	125.32	T(194)	8.80	-6.227
C10H22	3,3-DIETHYLHEXANE	(L)	142.276	-71.60	E(820)				
C10H22	3,3-DIETHYLHEXANE	(G)	142.276	-64.19	T(222)	122.29	T(222)	9.81	-7.189
C10H22	3,4-DIETHYLHEXANE	(L)	142.276	-70.67	E(820)				
C10H22	3,4-DIETHYLHEXANE	(G)	142.276	-59.17	T(223)	123.25	T(223)	10.50	-7.698
C10H22	3,3-DIETHYL-2-METHYLPENTANE	(L)	142.276	-70.91	E(820)				
C10H22	3,3-DIETHYL-2-METHYLPENTANE	(G)	142.276	-59.49	T(245)	119.18	T(245)	11.40	-8.353
C10H22	3-ETHYL-2,2-DIMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-72.93	E(820)				
C10H22	3-ETHYL-2,2-DIMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-61.89	T(224)	120.56	T(224)	8.58	-6.292
C10H22	3-ETHYL-2,3-DIMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-72.01	E(820)				
C10H22	3-ETHYL-2,3-DIMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-60.75	T(226)	122.74	T(226)	9.07	-6.651
C10H22	3-ETHYL-2,4-DIMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-71.71	E(820)				
C10H22	3-ETHYL-2,4-DIMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-60.43	T(228)	123.59	T(228)	9.14	-6.700
C10H22	3-ETHYL-2,5-DIMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-73.39	E(820)				
C10H22	3-ETHYL-2,5-DIMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-62.27	T(230)	122.90	T(230)	7.51	-5.502
C10H22	3-ETHYL-3,3-DIMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-71.26	E(820)				
C10H22	3-ETHYL-3,3-DIMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-60.06	T(232)	122.74	T(232)	9.76	-7.157
C10H22	4-ETHYL-2,2-DIMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-73.22	E(820)				
C10H22	4-ETHYL-2,2-DIMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-62.37	T(225)	119.18	T(225)	8.52	-6.242
C10H22	4-ETHYL-2,3-DIMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-71.74	E(820)				
C10H22	4-ETHYL-2,3-DIMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-60.43	T(227)	122.90	T(227)	9.35	-6.851
C10H22	4-ETHYL-2,4-DIMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-72.43	E(820)				
C10H22	4-ETHYL-2,4-DIMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-61.23	T(229)	121.36	T(229)	9.01	-6.601
C10H22	4-ETHYL-3,3-DIMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-71.86	E(820)				
C10H22	4-ETHYL-3,3-DIMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-60.63	T(231)	121.36	T(231)	9.61	-7.041
C10H22	3-ETHYL-2-METHYLHEPTANE	(L)	142.276	-72.04	E(820)				
C10H22	3-ETHYL-2-METHYLHEPTANE	(G)	142.276	-60.56	T(197)	126.01	T(197)	8.29	-6.076
C10H22	3-ETHYL-3-METHYLHEPTANE	(L)	142.276	-72.81	E(820)				
C10H22	3-ETHYL-3-METHYLHEPTANE	(G)	142.276	-61.41	T(200)	124.47	T(200)	7.90	-5.789
C10H22	3-ETHYL-4-METHYLHEPTANE	(L)	142.276	-71.37	E(820)				
C10H22	3-ETHYL-4-METHYLHEPTANE	(G)	142.276	-59.87	T(203)	126.01	T(203)	8.98	-6.582
C10H22	3-ETHYL-5-METHYLHEPTANE	(L)	142.276	-72.48	E(820)				
C10H22	3-ETHYL-5-METHYLHEPTANE	(G)	142.276	-61.04	T(202)	126.01	T(202)	7.81	-5.724
C10H22	4-ETHYL-2-METHYLHEPTANE	(L)	142.276	-73.03	E(820)				
C10H22	4-ETHYL-2-METHYLHEPTANE	(G)	142.276	-61.72	T(198)	126.01	T(198)	7.13	-5.226

XCVII

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	$\log K_p$
C10H22	4-ETHYL-3-METHYLHEPTANE	(L)	142.276	-71.34	E(820)				
C10H22	4-ETHYL-3-METHYLHEPTANE	(G)	142.276	-59.87	T(201)	126.70	T(201)	8.77	-6.431
C10H22	4-ETHYL-4-METHYLHEPTANE	(L)	142.276	-72.70	E(820)				
C10H22	4-ETHYL-4-METHYLHEPTANE	(G)	142.276	-61.41	T(204)	124.47	T(204)	7.90	-5.789
C10H22	5-ETHYL-2-METHYLHEPTANE	(L)	142.276	-73.17	E(820)				
C10H22	5-ETHYL-2-METHYLHEPTANE	(G)	142.276	-61.72	T(199)	124.63	T(199)	7.54	-5.527
C10H22	3-ETHYLOCTANE	(L)	142.276	-71.82	E(820)				
C10H22	3-ETHYLOCTANE	(G)	142.276	-60.01	T(181)	127.74	T(181)	8.32	-6.101
C10H22	4-ETHYLOCTANE	(L)	142.276	-71.68	E(820)				
C10H22	4-ETHYLOCTANE	(G)	142.276	-60.01	T(182)	129.12	T(182)	7.91	-5.799
C10H22	2-ETHYL-2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	(L)	142.276	-71.33	E(820)				
C10H22	2-ETHYL-2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	(G)	142.276	-60.09	T(248)	118.25	T(248)	11.07	-8.116
C10H22	2-ETHYL-2,4,4-TRIMETHYLPENTANE	(L)	142.276	-71.40	E(820)				
C10H22	2-ETHYL-2,4,4-TRIMETHYLPENTANE	(G)	142.276	-60.55	T(247)	115.91	T(247)	11.31	-8.290
C10H22	3-ETHYL-2,2,3-TRIMETHYLPENTANE	(L)	142.276	-71.46	E(820)				
C10H22	3-ETHYL-2,2,3-TRIMETHYLPENTANE	(G)	142.276	-60.37	T(246)	117.29	T(246)	11.08	-8.121
C10H22	3-ETHYL-2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	(L)	142.276	-72.66	E(820)				
C10H22	3-ETHYL-2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	(G)	142.276	-61.67	T(244)	116.23	T(244)	10.10	-7.399
C10H22	4-ISOPROPYLHEPTANE	(L)	142.276	-71.39	E(820)				
C10H22	4-ISOPROPYLHEPTANE	(G)	142.276	-60.02	T(196)	124.63	T(196)	9.24	-6.773
C10H22	3-ISOPROPYL-2-METHYLHEXANE	(L)	142.276	-72.29	E(820)				
C10H22	3-ISOPROPYL-2-METHYLHEXANE	(G)	142.276	-61.11	T(221)	121.52	T(221)	9.08	-6.654
C10H22	2-METHYLNONANE	(L)	142.276	-74.66	A(1025)	100.4	M(1120)	1.82	-1.337
C10H22	2-METHYLNONANE	(G)	142.276	-61.38	T(177)	127.74	T(177)	6.95	-5.097
C10H22	3-METHYLNONANE	(L)	142.276	-72.62	E(820)	102.1	M(1120)	3.36	-2.461
C10H22	3-METHYLNONANE	(G)	142.276	-60.70	T(178)	129.12	T(178)	7.22	-5.293
C10H22	4-METHYLNONANE	(L)	142.276	-72.51	E(820)	101.7	M(639)	3.59	-2.629
C10H22	4-METHYLNONANE	(G)	142.276	-60.70	T(179)	129.12	T(179)	7.22	-5.293
C10H22	5-METHYLNONANE	(L)	142.276	-74.08	A(1025)	101.3	M(1120)	2.14	-1.566
C10H22	5-METHYLNONANE	(G)	142.276	-60.70	T(180)	127.74	T(180)	7.63	-5.595
C10H22	2,2,3,3,4-PENTAMETHYLPENTANE	(L)	142.276	-69.99	E(820)				
C10H22	2,2,3,3,4-PENTAMETHYLPENTANE	(G)	142.276	-59.08	T(249)	112.80	T(249)	13.71	-10.047
C10H22	2,2,3,4,4-PENTAMETHYLPENTANE	(L)	142.276	-69.56	E(820)				
C10H22	2,2,3,4,4-PENTAMETHYLPENTANE	(G)	142.276	-59.04	T(250)	110.62	T(250)	14.40	-10.553
C10H22	4-PROPYLHEPTANE	(L)	142.276	-71.58	E(820)				
C10H22	4-PROPYLHEPTANE	(G)	142.276	-60.01	T(195)	125.56	T(195)	8.97	-6.577

XCVIII

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C10H22	2,2,3,3-TETRAMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-72.57	E(820)				
C10H22	2,2,3,3-TETRAMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-61.63	T(233)	115.91	T(233)	10.23	-7.499
C10H22	2,2,3,4-TETRAMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-71.50	E(820)				
C10H22	2,2,3,4-TETRAMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-60.55	T(234)	118.14	T(234)	10.65	-7.803
C10H22	2,2,3,5-TETRAMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-75.08	E(820)				
C10H22	2,2,3,5-TETRAMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-64.29	T(235)	117.45	T(235)	7.11	-5.212
C10H22	2,2,4,4-TETRAMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-71.92	E(820)				
C10H22	2,2,4,4-TETRAMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-61.50	T(236)	115.91	T(236)	10.36	-7.594
C10H22	2,2,4,5-TETRAMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-74.27	E(820)				
C10H22	2,2,4,5-TETRAMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-63.61	T(237)	117.45	T(237)	7.79	-5.711
C10H22	2,2,5,5-TETRAMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-78.54	E(820)				
C10H22	2,2,5,5-TETRAMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-68.18	T(238)	112.35	T(238)	4.74	-3.476
C10H22	2,3,3,4-TETRAMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-71.83	E(820)				
C10H22	2,3,3,4-TETRAMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-60.66	T(239)	119.63	T(239)	10.09	-7.397
C10H22	2,3,3,5-TETRAMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-72.68	E(820)				
C10H22	2,3,3,5-TETRAMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-61.83	T(240)	118.25	T(240)	9.33	-6.841
C10H22	2,3,4,4-TETRAMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-71.02	E(820)				
C10H22	2,3,4,4-TETRAMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-59.98	T(241)	119.63	T(241)	10.77	-7.895
C10H22	2,3,4,5-TETRAMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-72.79	E(820)				
C10H22	2,3,4,5-TETRAMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-61.67	T(242)	119.10	T(242)	9.24	-6.772
C10H22	3,3,4,4-TETRAMETHYLHEXANE	(L)	142.276	-71.50	E(820)				
C10H22	3,3,4,4-TETRAMETHYLHEXANE	(G)	142.276	-60.37	T(243)	116.71	T(243)	11.25	-8.247
C10H22	2,2,3-TRIMETHYLHEPTANE	(L)	142.276	-73.73	E(820)				
C10H22	2,2,3-TRIMETHYLHEPTANE	(G)	142.276	-62.58	T(205)	120.56	T(205)	7.89	-5.786
C10H22	2,2,4-TRIMETHYLHEPTANE	(L)	142.276	-73.92	E(820)				
C10H22	2,2,4-TRIMETHYLHEPTANE	(G)	142.276	-63.06	T(206)	120.56	T(206)	7.41	-5.434
C10H22	2,2,5-TRIMETHYLHEPTANE	(L)	142.276	-75.91	E(820)				
C10H22	2,2,5-TRIMETHYLHEPTANE	(G)	142.276	-64.95	T(207)	120.56	T(207)	5.52	-4.049
C10H22	2,2,6-TRIMETHYLHEPTANE	(L)	142.276	-76.61	E(820)				
C10H22	2,2,6-TRIMETHYLHEPTANE	(G)	142.276	-65.64	T(208)	119.18	T(208)	5.25	-3.845
C10H22	2,3,3-TRIMETHYLHEPTANE	(L)	142.276	-73.22	E(820)				
C10H22	2,3,3-TRIMETHYLHEPTANE	(G)	142.276	-62.01	T(209)	121.36	T(209)	8.23	-6.029
C10H22	2,3,4-TRIMETHYLHEPTANE	(L)	142.276	-72.43	E(820)				
C10H22	2,3,4-TRIMETHYLHEPTANE	(G)	142.276	-61.11	T(210)	123.59	T(210)	8.46	-6.201
C10H22	2,3,5-TRIMETHYLHEPTANE	(L)	142.276	-73.53	E(820)				
C10H22	2,3,5-TRIMETHYLHEPTANE	(G)	142.276	-62.27	T(211)	123.59	T(211)	7.30	-5.351

XCIX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C10H22	2,3,6-TRIMETHYLHEPTANE	(L)	142.276	-74.22	E(820)				
C10H22	2,3,6-TRIMETHYLHEPTANE	(G)	142.276	-62.96	T(212)	122.90	T(212)	6.82	-4.996
C10H22	2,4,4-TRIMETHYLHEPTANE	(L)	142.276	-73.37	E(820)				
C10H22	2,4,4-TRIMETHYLHEPTANE	(G)	142.276	-62.49	T(213)	121.36	T(213)	7.75	-5.677
C10H22	2,4,5-TRIMETHYLHEPTANE	(L)	142.276	-73.49	E(820)				
C10H22	2,4,5-TRIMETHYLHEPTANE	(G)	142.276	-62.27	T(214)	123.59	T(214)	7.30	-5.351
C10H22	2,4,6-TRIMETHYLHEPTANE	(L)	142.276	-71.58	E(820)				
C10H22	2,4,6-TRIMETHYLHEPTANE	(G)	142.276	-60.52	T(215)	121.52	T(215)	9.67	-7.086
C10H22	2,5,5-TRIMETHYLHEPTANE	(L)	142.276	-75.40	E(820)				
C10H22	2,5,5-TRIMETHYLHEPTANE	(G)	142.276	-64.38	T(216)	121.36	T(216)	5.86	-4.292
C10H22	3,3,4-TRIMETHYLHEPTANE	(L)	142.276	-72.56	E(820)				
C10H22	3,3,4-TRIMETHYLHEPTANE	(G)	142.276	-61.32	T(217)	122.74	T(217)	8.50	-6.233
C10H22	3,3,5-TRIMETHYLHEPTANE	(L)	142.276	-72.81	E(820)				
C10H22	3,3,5-TRIMETHYLHEPTANE	(G)	142.276	-61.80	T(218)	122.74	T(218)	8.02	-5.881
C10H22	3,4,4-TRIMETHYLHEPTANE	(L)	142.276	-72.52	E(820)				
C10H22	3,4,4-TRIMETHYLHEPTANE	(G)	142.276	-61.32	T(219)	122.74	T(219)	8.50	-6.233
C10H22	3,4,5-TRIMETHYLHEPTANE	(L)	142.276	-71.81	E(820)				
C10H22	3,4,5-TRIMETHYLHEPTANE	(G)	142.276	-60.43	T(220)	123.59	T(220)	9.14	-6.700
C10H22O	DECYL ALCOHOL	(L)	158.276	-114.66	A(215)				
C10H22O	DECYL ALCOHOL	(G)	158.276	-96.38	T(530)	142.76	T(530)	-25.22	18.486
C10H22O	PENTYL ETHER	(L)	158.276	-82.5	C(744)				
C10H22O2	1,10-DECANEDIOL	(S)	174.276	-165.86	A(1114)				
C10H22O3	P-MENTHANE-1,8-DIOL	(S)	190.276	-241.7	C(744)				
C10H22O7	DIPENTERYTHRITOL	(S)	254.276	-376.2	B(986)				
C10H22S	BUTYL HEXYL SULFIDE	(G)	174.342	-49.84	T(822)	145.83	T(822)	15.37	-11.270
C10H22S	1-DECANETHIOL	(L)	174.342	-66.10	A(507)				
C10H22S	1-DECANETHIOL	(G)	174.342	-50.54	T(904)	145.82	T(904)	14.68	-10.759
C10H22S	ETHYL OCTYL SULFIDE	(G)	174.342	-49.63	T(823)	145.51	T(823)	15.68	-11.493
C10H22S	HEPTYL PROPYL SULFIDE	(G)	174.342	-49.66	T(824)	145.83	T(824)	15.55	-11.402
C10H22S	ISOPENTYL SULFIDE	(L)	174.342	-67.4	B(899)				
C10H22S	ISOPENTYL SULFIDE	(G)	174.342	-53.0	B(899)				
C10H22S	METHYL NONYL SULFIDE	(G)	174.342	-49.05	T(825)	144.97	T(825)	16.42	-12.037
C10H22S	PENTYL SULFIDE	(L)	174.342	-63.7	B(899)				
C10H22S	PENTYL SULFIDE	(G)	174.342	-49.84	T(826)	144.45	T(826)	15.79	-11.571
C10H22S	PENTYL SULFIDE	(G)	174.342	-49.0	B(899)				
C10H22S2	PENTYL DISULFIDE	(G)	206.408	-47.71	T(876)	155.53	T(876)	16.89	-12.379

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C10H23N	DIISOPENTYLAMINE	(L)	157.292	-64.3	C(744)				
C11H7N	1-NAPHTHONITRILE	(S)	153.174	53.8	C(744)				
C11H7N	2-NAPHTHONITRILE	(S)	153.174	48.6	C(744)				
C11H8O2	2-METHYL-1,4-NAPHTHOQUINONE (S)	(S)	172.174	-54.8	C(112)				
C11H8O2	1-NAPHTHOIC ACID	(S)	172.174	-75.0	C(744)				
C11H8O2	2-NAPHTHOIC ACID	(S)	172.174	-79.2	C(744)				
C11H8O3	3-HYDROXY-2-NAPHTHOIC ACID (S)	(S)	188.174	-130.2	B(1640)				
C11H10	1-METHYLNAPHTHALENE	(L)	142.190	21.5	C(606)	60.90	M(954)	54.33	-39.826
C11H10	1-METHYLNAPHTHALENE	(L)	142.190	13.43	A(1401)	60.90	M(954)	46.26	-33.911
C11H10	1-METHYLNAPHTHALENE	(G)	142.190	27.93	T(447)	90.21	T(447)	52.03	-38.134
C11H10	2-METHYLNAPHTHALENE	(S)	142.190	10.72	A(1401)	52.58	M(954)	46.03	-33.743
C11H10	2-METHYLNAPHTHALENE	(L)	142.190	13.55	A(1401)				
C11H10	2-METHYLNAPHTHALENE	(G)	142.190	27.75	T(448)	90.83	T(448)	51.66	-37.866
C11H10O	1-PHENYL-1-PENTYN-3-ONE	(L)	158.190	9.7	C(744)				
C11H10O	1,4,4A,8A-TETRAHYDRO-1,4-METHANONAPHTHALENE-5,8-DIONE (S)	(S)	158.190	-39.2	C(843)				
C11H10O2	ETHYL PHENYLPROPIOLATE	(L)	174.190	-37.4	C(744)				
C11H10O2	2-METHYL-1,4-NAPHTHO-HYDROQUINONE (S)	(S)	174.190	-99.0	C(112)				
C11H10O2	5-PHENYL-2,4-PENTADIENOIC ACID (M.P. 165 C) (S)	(S)	174.190	-65.4	C(744)				
C11H10O2	5-PHENYL-2,4-PENTADIENOIC ACID (M.P. 138 C) (S)	(S)	174.190	-56.6	C(744)				
C11H10O4	ACETYLCOUMARIC ACID, CIS (M.P. 85 C) (U,S)	(U,S)	206.190	-162.4	C(744)				
C11H10O4	ACETYLCOUMARIC ACID, TRANS (M.P. 154 TO 155 C) (U,S)	(U,S)	206.190	-166.5	C(744)				
C11H10O4	(HYDROXYMETHYL)PHENYLSUCCINIC ACID GAMMA-LACTONE (S)	(S)	206.190	-179.7	C(744)				
C11H11N04	N-BENZYL TARTRIMIDE, D	(S)	221.206	-171.6	C(744)				
C11H11N04	N-BENZYL TARTRIMIDE, D,L	(S)	221.206	-171.7	C(744)				
C11H11N04	N-BENZYL TARTRIMIDE, MESO	(S)	221.206	-168.7	C(744)				
C11H12N2O	TRYPTOPHAN, L	(S)	204.222	-99.2	A(241)	60.00	M(241)	-28.54	20.917
C11H12N2O4	HIPPURYL GLYCINE	(S)	236.222	-199.09	A(643)	75.2	M(642)	-118.35	86.747
C11H12O	3-METHYL-4-PHENYL-								

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C11H12O	3-BUTEN-2-ONE (S)	(S)	160.206	-29.7	C(744)				
C11H12O	1-METHYL-4-PHENYL-3-BUTEN-2-ONE (L)	(L)	160.206	-25.5	C(744)				
C11H12O3	ETHYL-O-HYDROXYCINNAMIC ACID, CIS, (M.P. 101 TO 102 C) (S)	(S)	192.206	-119.2	C(744)				
C11H12O3	ETHYL-HYDROXYCINNAMIC ACID, TRANS (M.P. 133 TO 134 C) (U,S)	(U,S)	192.206	-125.7	C(744)				
C11H12O5	METHYL 5,6-DIMETHOXYPHTHAL-ALDEHYDATE (S)	(S)	224.206	-181.5	C(744)				
C11H13N03	N-(O-TOLUOYL)ALANINE	(S)	207.222	-155.9	C(744)				
C11H13N03	N-(P-TOLUOYL)ALANINE	(S)	207.222	-158.1	C(744)				
C11H13N04	5-CAROMETHOXY-2,4-DIMETHYL-3-PYRROLEACRYLIC ACID (S)	(S)	223.222	-189.8	C(1413)				
C11H14	1-PHENYL-2-PENTENE	(L)	146.222	0.2	C(744)				
C11H14	1,2,3,4-TETRAHYDRO-1-METHYLNAPHTHALENE (L)	(L)	146.222	-14.1	C(721)				
C11H14	1,2,3,4-TETRAHYDRO-5-METHYLNAPHTHALENE (L)	(L)	146.222	-14.1	C(606)				
C11H14N2O2	ETHYL 4-(CYANOMETHYL)-3,5-DI-METHYL-2-PYRROLECARBOXYLATE (S)	(S)	206.238	-89.1	C(1414)				
C11H14N2O3	GLYCINE PHENYLALANINE ANHYDRIDE (S)	(S)	222.238	-150.9	B(1177)				
C11H14N2O3	GLYCINE TYROSINE ANHYDRIDE (S)	(S)	222.238	-190.8	B(1177)				
C11H14N2O3	GLYCYLPHENYLALANINE	(S)	222.238	-163.6	B(1176)				
C11H14O	ISOBUTYLACETOPHENONE	(L)	162.222	-52.62	A(251)				
C11H14O	METHYL-1,2,3,4-TETRAHYDRO-NAPHTHUL (L)	(L)	162.222	-58.4	C(609)				
C11H14O	TERT-BUTYLACETOPHENONE	(L)	162.222	-49.91	A(251)				
C11H14O	2,4,5-TRIMETHYLACETOPHENONE (L)	(L)	162.222	-61.39	B(65)				
C11H14O	2,4,6-TRIMETHYLACETOPHENONE (L)	(L)	162.222	-64.96	B(65)				
C11H14O2	(1,2,3,4-TETRAHYDRO-1-METHYL-NAPHTHYL) HYDROPEROXIDE (L)	(L)	178.222	-37.6	C(609)				
C11H14O2	2,3,4,5-TETRAMETHYL-BENZOIC ACID (S)	(S)	178.222	-123.74	A(254)				
C11H14O2	ISOBUTYL BENZOATE	(L)	178.222	-100.2	C(744)				
C11H14O2	METHYLEUGENOL	(U,L)	178.222	-53.0	C(744)				

CII

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° ₂₉₈ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f° ₂₉₈ (kcal/mole)	Log Kp
C11H1402	METHYLISOEUGENOL	(U,L)	178.222	-64.2	C(744)				
C11H1402	2,3,4,6-TETRAMETHYL-								
C11H1402	BENZOIC ACID (S)		178.222	-121.33	A(254)				
C11H1402	2,3,5,6-TETRAMETHYL-								
C11H1402	BENZOIC ACID (S)		178.222	-120.95	A(254)				
C11H1403	ISOBUTYL SALICYLATE	(L)	194.222	-146.2	C(744)				
C11H1408	TETRAMETHYL ALPHA,ALPHA,BETA-								
C11H1408	BETA,TRIMETHYLENE-								
C11H1408	TETRACARBOXYLATE (U,S)		274.222	-342.4	C(744)				
C11H15N0	CYANOCAMPHOR	(U,S)	177.238	-50.3	C(744)				
C11H15N02	ETHYL 3,5-DIMETHYL-4-VINYL-								
C11H15N02	2-PYRROLECARBOXYLATE (S)		193.238	-109.7	C(1413)				
C11H15N02	ETHYL N-ETHYL CARBANILATE . . .	(S)	193.238	-110.8	B(984)				
C11H15N03	ETHYL 3-ACETYL-2,4-DIMETHYL-								
C11H15N03	PYRROLE-5-CARBOXYLATE (S)		209.238	-153.7	C(1255)				
C11H15N06	BENZYLAMMONIUM								
C11H15N06	BITARTRATE, MESO (S)		257.238	-317.0	C(744)				
C11H15N06	BENZYLAMMONIUM BIRACEMATE . .	(S)	257.238	-315.4	C(744)				
C11H16	PENTAMETHYLBENZENE	(S)	148.238	-32.33	A(1121)	70.22	M(655)	25.64	-18.795
C11H16	PENTAMETHYLBENZENE	(G)	148.238	-17.80	T(418)	106.09	T(418)	29.48	-21.606
C11H16	PENTYLBENZENE	(G)	148.238	-8.23	T(417)	114.47	T(417)	36.55	-26.790
C11H160	METHYL TRYMYL ETHER	(U,L)	164.238	-55.4	C(744)				
C11H1602	ETHYL 1-METHYLCYCLOHEXENE-								
C11H1602	1-METHENE-3-CARBOXYLATE (U,L)		180.238	-101.4	C(744)				
C11H1603S	P-PENTYLBENZENESULFONIC ACID (G)		228.304			131.55	E(69)		
C11H1604	DIMETHYL SPIROHEPTANE-								
C11H1604	DICARBOXYLATE	(U,L)	212.238	-171.0	C(744)				
C11H1608	TETRAMETHYL 1,1,3,3-								
C11H1608	PROPANETETRACARBOXYLATE (S)		276.238	-378.9	C(744)				
C11H17N02	ETHYL 4-ETHYL-3,5-DIMETHYL-								
C11H17N02	PYRROLE-2-CARBOXYLATE (S)		195.254	-125.0	C(1255)				
C11H18	1,5-DIMETHYL-3-ISOPROPENE-								
C11H18	CYCLOHEXENE-1	(U,L)	150.254	-31.3	C(744)				
C11H1802	ETHYL 2-NDONYDATE	(L)	182.254	-98.4	C(744)				
C11H1802	UNDECYNOIC ACID	(U,S)	182.254	-110.3	C(744)				
C11H1803	ETHYL METHYL-1-ETHYL-4-								

CIII

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° ₂₉₈ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f° ₂₉₈ (kcal/mole)	Log Kp
C11H1803	CYCLOPENTANONE CARBOXYLATE (U,L)		198.254	-183.5	C(744)				
C11H1803	METHYL-3-ACETYL-2,2-DIMETHYL-								
C11H1803	CYCLOBUTANE ACETATE (L)		198.254	-169.6	C(744)				
C11H1804	DIMETHYL 3-CARBOXY-2,2-DIMETHYL-								
C11H1804	CYCLOBUTANE ACETATE	(L)	214.254	-206.8	C(744)				
C11H1804	DIMETHYL ALPHA-TANACETONE-								
C11H1804	DICARBOXYLATE	(U,L)	214.254	-195.6	C(744)				
C11H20	DICYCLOPENTYLMETHANE	(L)	152.270	-55.0	A(806)				
C11H20	DECAHYDRO-2-METHYL-								
C11H20	NAPHTHALENE, TRANS (L)		152.270	-63.3	A(806)				
C11H20	DECAHYDRO-9-METHYL-								
C11H20	NAPHTHALENE, CIS (L)		152.270	-58.31	A(307)				
C11H20	DECAHYDRO-9-METHYL-								
C11H20	NAPHTHALENE, TRANS (L)		152.270	-59.70	A(307)				
C11H20	SPIRO(5,5)UNDECANE	(L)	152.270	-59.5	A(805)				
C11H20	1-UNDECYNE	(G)	152.270	4.92	T(328)	134.67	T(328)	62.29	-45.656
C11H2002	UNDECENOIC ACID	(U,S)	184.270	-136.7	C(744)				
C11H2004	DIMETHYL AZELATE	(L)	216.270	-228.3	C(744)				
C11H2004	OCTYLMALONIC ACID	(S)	216.270	-264.9	B(1535)				
C11H2004	UNDECANEDIOIC ACID	(S)	216.270	-261.1	C(744)				
C11H22	1-TERT-BUTYL-2-METHYL-								
C11H22	CYCLOHEXANE (L)		154.286	-61.4	C(1338)				
C11H22	1-TERT-BUTYL-3-METHYL-								
C11H22	CYCLOHEXANE (HB,L)		154.286	-68.4	C(1338)				
C11H22	1-TERT-BUTYL-3-METHYL-								
C11H22	CYCLOHEXANE (LB,L)		154.286	-68.4	C(1338)				
C11H22	1-TERT-BUTYL-4-METHYL-								
C11H22	CYCLOHEXANE (HB,L)		154.286	-67.4	C(1338)				
C11H22	1-TERT-BUTYL-4-METHYL-								
C11H22	CYCLOHEXANE (LB,L)		154.286	-73.4	C(1338)				
C11H22	1-CYCLOPENTYLHEXANE	(G)	154.286	-50.07	T(357)	127.66	T(357)	18.69	-13.702
C11H22	CYCLOUNDECANE	(L)	154.286	-57.45	A(271)				
C11H22	1,1-DIMETHYL-								
C11H22	2-HEXYLCYCLOPROPANE (L)		154.286	-46.2	A(710)				
C11H22	PENTYLCYCLOHEXANE	(G)	154.286	-55.88	T(384)	118.89	T(384)	15.50	-11.360
C11H22	1-UNDECENE	(L)	154.286			109.3	M(950)		

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C11H22	1-UNDECENE	(G)	154.286	-34.60	T(294)	138.48	T(294)		
C11H22N2O3	VALINE LEUCINE ANHYDRIDE	(S)	230.302	-218.0	B(1177)			30.94	-22.676
C11H22O	4-METHYL-1-DECEN-4-OL	(L)	170.286	-119.1	C(744)				
C11H22O2	METHYL DECANOATE	(L)	186.286	-153.20	A(3)				
C11H22O2	UNDECANOIC ACID	(S)	186.286	-176.00	A(3)				
C11H22O2	UNDECANOIC ACID	(L)	186.286	-169.83	A(3)				
C11H24	UNDECANE	(L)	156.302	-78.05	A(686)	109.49	M(420)	5.44	-3.984
C11H24O	UNDECYL ALCOHOL	(G)	156.302	-64.60	T(251)	139.48	T(251)	9.94	-7.289
C11H24O2	BIS(ISOPENTYLOXY)METHANE	(L)	172.302	-100.91	T(531)	152.07	T(531)	-22.81	16.722
C11H24S	BUTYL HEPTYL SULFIDE	(G)	188.302	-144.3	C(744)				
C11H24S	DECYL METHYL SULFIDE	(G)	188.368	-54.77	T(827)	155.14	T(827)	17.38	-12.740
C11H24S	ETHYL NONYL SULFIDE	(G)	188.368	-53.97	T(828)	154.28	T(828)	18.44	-13.514
C11H24S	OCTYL PROPYL SULFIDE	(G)	188.368	-54.55	T(829)	154.82	T(829)	17.70	-12.971
C11H24S	1-UNDECANETHIOL	(G)	188.368	-55.46	T(905)	155.14	T(905)	17.59	-12.894
C12H4N4	2,5-CYCLOHEXADIENE-DELTA-								
C12H4N4	1,4-ALPHA:4-ALPHA'-								
C12H4N4	DIMALONONITRILE	(S)	204.184	158.9	A(154)				
C12H4N4	2,5-CYCLOHEXADIENE-DELTA-								
C12H4N4	1,4-ALPHA:4-ALPHA'-								
C12H4N4	DIMALONONITRILE	(G)	204.184	184.0	A(154)				
C12H5N7O12	HEXANITRODIPHENYLAMINE	(S)	439.216	9.9	B(981)	105.0	E(748)	142.15	-104.192
C12H6O3	NAPHTHALIC ANHYDRIDE	(S)	198.168	-75.8	C(744)				
C12H6O12	MELLITIC ACID	(S)	342.168	-545.6	C(744)				
C12H8	ACENAPHTHYLENE	(S)	152.184	44.7	A(156)				
C12H8	ACENAPHTHYLENE	(G)	152.184	61.7	A(156)				
C12H8	BIPHENYLENE	(S)	152.184	84.4	A(95)				
C12H8	BIPHENYLENE	(G)	152.184	115.2	A(95)				
C12H8Cl2	2,2'-DICHLOROBIPHENYL	(S)	223.098	7.34	A(1386)				
C12H8Cl2	2,2'-DICHLOROBIPHENYL	(G)	223.098	30.3	B(1386)				
C12H8Cl2	4,4'-DICHLOROBIPHENYL	(S)	223.098	3.91	A(1386)				
C12H8Cl2	4,4'-DICHLOROBIPHENYL	(G)	223.098	28.7	B(1386)				
C12H8F2	2,2'-DIFLUOROBIPHENYL	(S)	190.184	-70.8	A(1386)				
C12H8F2	2,2'-DIFLUOROBIPHENYL	(G)	190.184	-48.1	B(1386)				
C12H8F2	4,4'-DIFLUOROBIPHENYL	(S)	190.184	-71.0	A(1386)				

CV

CV

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C12H8F2	4,4'-DIFLUOROBIPHENYL	(G)	190.184	-49.2	B(1386)				
C12H8N2	PHENAZINE	(S)	180.200	57.6	C(1618)				
C12H8N5	AMMONIUM 2,5-CYCLOHEXADIENE-								
C12H8N5	DELTA-1,4-ALPHA:4-ALPHA'-								
C12H8N5	DIMALONONITRILE ION-RADICAL	(S)	222.224	103.2	A(154)				
C12H8O	DIBENZOFURAN	(S)	168.184	-1.4	A(202)				
C12H8O4	NAPHTHALIC ACID	(S)	216.184	-157.7	C(744)				
C12H8S2	THIANTHRENE	(L)	216.316	43.65	A(1447)				
C12H9N	CARBAZOLE	(S)	167.200	40.4	C(744)				
C12H9NO	2-METHYL-1',2'-NAPHTHO-QUAZOLE	(S)	183.200	-19.2	A(447)				
C12H9NO	2-METHYL-2',1'-NAPHTHO-QUAZOLE	(L)	183.200	-10.5	A(447)				
C12H9NO	2-METHYL-2',3'-NAPHTHO-QUAZOLE	(S)	183.200	-10.8	A(447)				
C12H9NO2	3-NITROBIPHENYL	(S)	199.200	17.7	C(177)				
C12H9NO2	4-NITROBIPHENYL	(S)	199.200	12.3	C(177)				
C12H10	ACENAPHTHENE	(S)	154.200	16.8	A(156)				
C12H10	ACENAPHTHENE	(G)	154.200	37.4	A(156)				
C12H10	BIPHENYL	(S)	154.200	24.02	A(246)	49.2	M(656)	60.75	-44.527
C12H10	BIPHENYL	(L)	154.200	28.5	(CALC)	59.8	M(656)	62.07	-45.495
C12H10	BIPHENYL	(G)	154.200	43.52	T(476)	93.85	T(476)	66.94	-49.063
C12H10N2	AZOBENZENE, CIS	(S)	182.216	86.59	A(244)				
C12H10N2	AZOBENZENE, TRANS	(S)	182.216	76.49	A(244)				
C12H10N2O	AZOXYBENZENE	(S)	198.216	63.4	C(744)				
C12H10N2O	N-NITROSODIPHENYLAMINE	(S)	198.216	43.4	B(984)				
C12H10N2O	P-NITROSODIPHENYLAMINE	(S)	198.216	50.9	B(986)				
C12H10N2O	P-(PHENYL AZO)PHENOL	(S)	198.216	33.1	C(744)				
C12H10N4O4	4,4'-DINITROHYDRAZO BENZENE	(S)	274.232	26.2	A(244)				
C12H10O	PHENYL ETHER	(S)	170.200	-7.57	A(453)	55.91	M(453)	34.46	-25.261
C12H10O	PHENYL ETHER	(L)	170.200	-3.48	A(453)	69.62	M(453)	34.47	-25.262
C12H10O	O-PHENYLPHENOL	(S)	170.200	12.3	C(177)				
C12H10O5	PHENYL SULFOXYL	(L)	202.266	2.3	B(907)				
C12H10O5	PHENYL SULFOXYL	(G)	202.266	25.5	B(907)				
C12H10O2	METHYL 2-NAPHTHOATE	(S)	186.200	-67.5	C(744)				
C12H10O2	1-NAPHTHYL ACETATE	(S)	186.200	-66.8	B(855)				
C12H10O2	2-NAPHTHYL ACETATE	(S)	186.200	-70.3	B(855)				
C12H10O2S	PHENYL SULFOXYL	(L)	218.266	-53.3	B(905)				
C12H10O2S	PHENYL SULFOXYL	(G)	218.266	-27.9	B(905)				

CVI

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_f^{\circ 298}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_f^{\circ 298}$ (kcal/mole)	Log K_p
C12H1004	CINNAMYLIDENEMALONIC ACID	(S)	218.200	-150.7	C (744)				
C12H1004	QUINHYDRONE	(S)	218.200	-134.7	C (744)				
C12H1004S2	PHENYL DISULFONE	(L)	282.332	-153.62	A (910)				
C12H1004S2	PHENYL DISULFONE	(G)	282.332	-114.9	B (910)				
C12H10S2	PHENYL DISULFIDE	(L)	218.332	35.6	B (900)				
C12H10S2	PHENYL DISULFIDE	(G)	218.332	58.3	B (900)				
C12H11N	2-BIPHENYLAMINE	(S)	169.216	29.1	C (177)				
C12H11N	4-BIPHENYLAMINE	(S)	169.216	20.8	C (177)				
C12H11N	DIPHENYLAMINE	(S)	169.216	27.93	A (244)				
C12H11N	DIPHENYLAMINE	(L)	169.216	31.5	C (1547)	67.5	E (1547)	74.25	-54.422
C12H11N	DIPHENYLAMINE	(G)	169.216	48.20	E (843)	97.5	E (843)	82.00	-60.107
C12H11N3	N-(PHENYLAZO)ANILINE	(S)	197.232	79.03	A (401)				
C12H11N3	P-(PHENYLAZO)ANILINE	(S)	197.232	70.96	C (744)				
C12H12	1,2-DIMETHYLNAPHTHALENE	(G)	156.216	19.97	T (451)	97.23	T (451)	51.68	-37.883
C12H12	1,3-DIMETHYLNAPHTHALENE	(G)	156.216	19.55	T (452)	97.86	T (452)	51.08	-37.438
C12H12	1,4-DIMETHYLNAPHTHALENE	(G)	156.216	19.72	T (453)	95.86	T (453)	51.84	-37.999
C12H12	1,5-DIMETHYLNAPHTHALENE	(G)	156.216	19.55	T (454)	95.86	T (454)	51.67	-37.875
C12H12	1,6-DIMETHYLNAPHTHALENE	(G)	156.216	19.72	T (455)	97.86	T (455)	51.25	-37.562
C12H12	1,7-DIMETHYLNAPHTHALENE	(G)	156.216	19.55	T (456)	97.86	T (456)	51.08	-37.438
C12H12	2,3-DIMETHYLNAPHTHALENE	(G)	156.216	19.97	T (457)	98.22	T (457)	51.39	-37.667
C12H12	2,6-DIMETHYLNAPHTHALENE	(G)	156.216	19.72	T (458)	97.68	T (458)	51.30	-37.602
C12H12	2,7-DIMETHYLNAPHTHALENE	(G)	156.216	19.72	T (459)	97.68	T (459)	51.30	-37.602
C12H12	1-ETHYLNAPHTHALENE	(L)	156.216	-0.4	C (606)				
C12H12	1-ETHYLNAPHTHALENE	(G)	156.216	23.10	T (449)	99.94	T (449)	54.01	-39.585
C12H12	2-ETHYLNAPHTHALENE	(G)	156.216	22.92	T (450)	100.56	T (450)	53.64	-39.318
C12H12N2	BENZIDINE	(S)	184.232	16.9	B (1175)				
C12H12N2	2,4-BIPHENYLDIAMINE	(L)	184.232	24.7	C (744)				
C12H12N2	HYDRAZOBENZENE	(S)	184.232	52.9	A (244)				
C12H12N4	1,3-DIPHENYLTETRAZENE	(S)	212.248	98.4	B (974)				
C12H12N4	4-(PHENYLAZO)- M-PHENYLENEDIAMINE (S)	(S)	212.248	60.2	C (744)				
C12H12O	1-PHENYL-1-HEXYN-3-ONE	(L)	172.216	-0.3	C (744)				
C12H12O2	HINOKITICOL	(S)	188.216	-81.0	C (1465)				
C12H12O3	BETA-BENZALLELVULINIC ACID (U,S)	(U,S)	204.216	-124.0	C (744)				
C12H12O3	DELTA-BENZALLELVULINIC ACID (U,S)	(U,S)	204.216	-127.3	C (744)				
C12H12O6	TRIMETHYL TRIMESATE	(S)	252.216	-245.9	C (744)				

CVII

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_f^{\circ 298}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_f^{\circ 298}$ (kcal/mole)	Log K_p
C12H12O12	1,2,3,4,5,6-CYCLOHEXANHEXA-								
C12H12O12	CARBOXYLIC ACID (S)	(S)	158.232	-614.8	C (744)				
C12H14	HEXACYCLO-(7.2.1.0(2,5).0-(3,10)- .0(4,8).0(6,12))-DODECANE (S)	(S)	158.232	12.06	A (629)				
C12H14	PHENYLCYCLOHEXENE	(L)	158.232	-2.8	B (177)				
C12H14I2N2	BENZIDINE DIHYDRIDIODE	(S)	440.068	-29.8	C (1175)				
C12H14I2N2	HYDRAZOBENZENE DIHYDRIDIODE (S)	(S)	440.068	38.0	C (1175)				
C12H14N4O6	DESOXYAMALIC ACID	(U,S)	310.264	-283.9	C (744)				
C12H14N4O8	TETRAMETHYLLALLOXANTHINE . (U,S)	(U,S)	342.264	-366.8	C (744)				
C12H14O2	ETHYL ALPHA-METHYLCINNAMATE (L)	(L)	190.232	-77.3	C (744)				
C12H14O2	ETHYL BETA-METHYLCINNAMATE . (L)	(L)	190.232	-76.6	C (744)				
C12H14O2	PROPYL CINNAMATE	(L)	190.232	-78.1	C (744)				
C12H14O3	4-ALLYL-2-METHOXYPHENYL ACETATE (S)	(S)	206.232	-107.8	C (744)				
C12H14O3	ETHYL O-HYDROXYMETHYLCINNAMATE(L)	(L)	206.232	-110.0	C (744)				
C12H14O3	O-HYDROXYPROPYLCINNAMIC ACID, CIS (M.P. 83 TO 84 C)(U,S)	(U,S)	206.232	-127.9	C (744)				
C12H14O3	HYDROXYPROPYLCINNAMIC ACID, TRANS (M.P. 105 TO 106 C)(U,S)	(U,S)	206.232	-133.8	C (744)				
C12H14O3	2-METHOXY-4-PROPENYLPHENYL ACETATE (S)	(S)	206.232	-117.4	C (744)				
C12H14O3	METHYL ETHYL-O- HYDROXYCINNAMATE, CIS (L)	(L)	206.232	-109.2	C (744)				
C12H14O3	METHYL ETHYL-O- HYDROXYCINNAMATE, TRANS (L)	(L)	206.232	-113.9	C (744)				
C12H14O4	1-ALLYL-2,5-DIMETHOXY- 3,4-(METHYLENEDIOXY)BENZENE (S)	(S)	222.232	-106.9	C (744)				
C12H14O4	DIETHYL PHTHALATE	(L)	222.232	-183.67	B (982)				
C12H14O4	1,4-DIMETHOXY-2,3-(METHYLENE- DIOXY)-5-PROPENYLBENZENE (S)	(S)	222.232	-117.5	C (744)				
C12H16	DICYCLOHEXADIENE	(U,L)	160.248	6.3	B (90)				
C12H16	2-ETHYL-1-PHENYL-1-BUTENE . (L)	(L)	160.248	-7.0	C (744)				
C12H16	1-ETHYL- 1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE(L)	(L)	160.248	-21.0	C (721)				
C12H16	5-ETHYL- 1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE(L)	(L)	160.248	-21.0	C (606)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C12H16N2	1,5,7,8-TETRAAZAFETHYL-								
C12H16N2	3,3'-DIPYRIDYL (S)	(S)	188.264	31.60	A(247)				
C12H16N2O3	ALANINE PHENYLALANINE ANHYDRIDE (S)	(S)	236.264	-157.3	B(1177)				
C12H16N2O3	ALANYLPHENYLALANINE (S)	(S)	236.264	-169.8	B(1176)				
C12H16O2	ETHYL-4-PROPENYLGLUCOL (U,S)	(U,S)	192.248	-71.5	C(744)				
C12H16O2	PENTAMETHYLBENZOIC ACID (S)	(S)	192.248	-128.12	A(254)				
C12H16O2	PENTYL BENZOATE (L)	(L)	192.248	-104.3	C(744)				
C12H16O2	1-PHENYL-1,2-CYCLOHEXANEDIOL, CIS (S)	(S)	192.248	-111.80	B(1536)				
C12H16O2	1-PHENYL-1,2-CYCLOHEXANEDIOL, TRANS (S)	(S)	192.248	-110.94	B(1536)				
C12H16O3	1,2,4-TRIMETHOXY-5-PROPENYLBENZENE (L)	(L)	208.248	-97.7	C(744)				
C12H17NO3	ETHYL 2,4-DIMETHYL-5-PROPIONYL-PYRROLID-3-CARBOXYLATE (S)	(S)	223.264	-159.2	C(1413)				
C12H17NO3	ETHYL 2,4-DIMETHYL-5-PROPIONYL-PYRROLE-3-CARBOXYLATE (S)	(S)	223.264	-111.3	C(1255)				
C12H17NO3	ETHYL 3,5-DIMETHYL-4-PROPIONYL-2-PYRROLIDECARBOXYLATE (S)	(S)	223.264	-158.8	C(1413)				
C12H17NO4	DIMETHYL 5-CARBOXY-2,4-DIMETHYLPYRROLID-3-PROPIONATE (S)	(S)	239.264	-199.2	C(1413)				
C12H17NO4	ETHYL 3-(2-CARBOXYETHYL)-2,4-DIMETHYLPYRROLID-5-CARBOXYLATE (S)	(S)	239.264	-220.6	C(1255)				
C12H17NO4	ETHYL 2,4-DIMETHYLPYRROLID-3,5-DICARBOXYLATE (S)	(S)	239.264	-216.0	C(1255)				
C12H17NO5	DIMETHYL(HYDROXYMETHYL)-3-METHYLPYRROLID-2,4-DICARBOXYLATE (S)	(S)	255.264	-248.8	C(1413)				
C12H18	1,9-DODECADIENE (L)	(L)	162.264	47.00	A(433)				
C12H18	5,7-DODECADIENE (L)	(L)	162.264	43.09	A(433)				
C12H18	1-EETHYL-1-PHENYLRUTANE (L)	(L)	162.264	-28.8	C(839)				
C12H18	HEXAMETHYLBENZENE (S)	(S)	162.264	-39.19	A(1121)	71.66	M(441)	28.06	-20.570
C12H18	HEXAMETHYLBENZENE (G)	(G)	162.264	-25.26	T(423)	108.12	T(423)	31.12	-22.813
C12H18	HEXYLBENZENE (G)	(G)	162.264	-13.15	T(419)	123.78	T(419)	38.96	-28.267
C12H18	7-PHENYLHEXANE (L)	(L)	162.264	-33.8	C(839)				

(L,S)

(L)

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C12H18	1,2,3-TRIETHYLBENZENE (G)	(G)	162.264	-16.25	T(420)	121.23	T(420)	36.22	-26.552
C12H18	1,2,4-TRIETHYLBENZENE (G)	(G)	162.264	-16.99	T(421)	123.84	T(421)	34.71	-25.439
C12H18	1,3,5-TRIETHYLBENZENE (G)	(G)	162.264	-17.86	T(422)	121.34	T(422)	34.58	-25.348
C12H18N2O4	DIETHYL 1-AMINO-2,5-DIMETHYLPYRROLID-3,4-DICARBOXYLATE (S)	(S)	254.280	-177.7	C(1414)				
C12H18O	ETHYL THYMYL ETHER (L)	(L)	178.264	-62.0	C(744)				
C12H18O2	ETHYL 1,3-DIMETHYL-4-CYCLOHEXENE-3-METHENE-5-CARBOXYLATE (U,S)	(U,S)	194.264	-109.1	C(744)				
C12H18O3S	P-HEXYLBENZENESULFONIC ACID (G)	(G)	242.330			140.72	E(69)		
C12H18O8	RHAMNOSE TRIACETATE (S)	(S)	290.264	-393.1	C(744)				
C12H19NO2	ETHYL 2,4-DIMETHYL-3-PROPYL-PYRROLID-5-CARBOXYLATE (S)	(S)	209.280	-131.4	C(1413)				
C12H20	2,3-DIMETHYLBUTADIENE, DIMER (L)	(L)	164.280	7.4	C(786)				
C12H20	TETRAHYDRODICYCLHEXADIENE (U,S)	(U,S)	164.280	-50.9	B(90)				
C12H20O2	PROPYL 2-NONYNOATE (L)	(L)	196.280	-94.3	C(744)				
C12H20O3	TETRAETHYLSUCCINIC ANHYDRIDE (S)	(S)	212.280	-190.4	B(1538)				
C12H20O4	DIETHYLHEXAHYDROISOPHTHALATE, CIS (L)	(L)	228.280	-223.65	C(1368)				
C12H20O4	DIETHYLHEXAHYDROISOPHTHALATE, TRANS (L)	(L)	228.280	-225.50	C(1368)				
C12H20O6	MANNITETRIACETAL (U,S)	(U,S)	260.280	-271.7	C(744)				
C12H20O7	TRIEETHYL CITRATE (L)	(L)	276.280	-352.8	C(744)				
C12H22	CYCLOPENTYLCYCLOHEPTANE (L)	(L)	166.296	-54.1	A(806)				
C12H22	DICYCLOHEXYL (L)	(L)	166.296	-77.57	B(177)				
C12H22	1-DODECYNE (G)	(G)	166.296	-0.01	T(329)	143.98	T(329)	64.29	-47.126
C12H22	SPIND(5,6)DODECANE (L)	(L)	166.296	-60.7	A(805)				
C12H22N2O2	3,6-DIISOBUTYL-2,5-PIPERAZINEDIONE (S)	(S)	226.312	-153.4	C(744)				
C12H22O2	PENTYLPHOSPHOLIC ACETAL (U,L)	(U,L)	198.296	-87.9	C(744)				
C12H22O3	DIETHYLACETIC ANHYDRIDE (U,S)	(U,S)	214.296	-210.9	C(744)				
C12H22O4	ACETYLFREDDICARBOXALDEHYDE-1,3-DIISOBUTYL ACETAL (S)	(S)	230.296	-153.9	C(744)				
C12H22O4	DIMETHYL SEBACATE (S)	(S)	230.296	-243.1	C(744)				
C12H22O4	DIMETHYL SEBACATE (L)	(L)	230.296	-234.2	C(744)				
C12H22O4	DODECANEDIOLIC ACID (S)	(S)	230.296	-268.2	C(744)				
C12H22O4	DIETHYLMALONIC ACID (S)	(S)	230.296	-272.0	B(1535)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C12H22O4	TETRAETHYLSUCCINIC ACID	(S)	230.296	-261.3	B(1538)				
C12H22O11	CELLOBIOSE	(S)	342.296	-529.4	C(744)				
C12H22O11	BETA-LACTOSE	(S)	342.296	-534.59	A(228)	92.3	M(15)	-374.52	274.519
C12H22O11	MALTOSE	(S)	342.296	-528.0	C(744)				
C12H22O11	SUCROSE	(S)	342.296	-531.1	A(228)	86.1	M(1106)	-369.18	270.605
C12H22O11	TREHALOSE	(S)	342.296	-529.9	C(744)				
C12H24	CYCLODODECANE	(S)	168.312	-73.48	A(271)				
C12H24	1-CYCLOHEXYL-2-ETHYLBUTANE	(L)	168.312	-82.2	C(839)				
C12H24	3-CYCLOHEXYLHEXANE	(L)	168.312	-82.2	C(839)				
C12H24	1-CYCLOHEXYLHEXANE	(G)	168.312	-60.80	T(385)	128.20	T(385)	17.51	-12.837
C12H24	1-CYCLOPENTYLHEPTANE	(G)	168.312	-55.00	T(358)	136.96	T(358)	20.70	-15.174
C12H24	1-DODECENE	(L)	168.312			117.07	M(950)		
C12H24	1-DODECENE	(G)	168.312	-39.52	T(295)	147.78	T(295)	32.96	-24.156
C12H24	2-METHYLPROPENE TRIMER	(L)	168.312	-89.7	C(744)				
C12H24O2	T-BUTYL OCTANOATE	(L)	200.312	-167.1	A(1454)				
C12H24O2	LAURIC ACID	(S)	200.312	-185.28	A(3)				
C12H24O2	LAURIC ACID	(L)	200.312	-176.51	A(3)				
C12H24O2	METHYL UNDECANOATE	(L)	200.312	-159.11	A(3)				
C12H24O3	PEROXYLAURIC ACID	(S)	216.312	-162.7	A(1454)				
C12H24O12	ALPHA-LACTOSE MONOHYDRATE	(S)	360.312	-593.6	A(228)	99.1	M(15)	-418.95	307.083
C12H24O12	BETA-MALTOSE MONOHYDRATE	(S)	360.312	-587.8	A(228)	99.8	M(15)	-413.36	302.984
C12H26	DODECANE	(L)	170.328	-84.02	A(1200)	117.26	M(420)	6.86	-5.029
C12H26	DODECANE	(G)	170.328	-69.52	T(252)	148.78	T(252)	11.96	-8.769
C12H26O	DODECYL ALCOHOL	(G)	186.328	-105.84	T(532)	161.38	T(532)	-20.81	15.252
C12H26O3S	1-DODECANESULFONIC ACID	(G)	250.394	-360.1	C(1254)				
C12H26O4	SEC-BUTYLIDENE-								
C12H26O4	RIS(TERT-BUTYLPEROXIDE)	(L)	234.328	-147.93	C(843)				
C12H26O13	TREHALOSE DIHYDRATE	(S)	378.328	-674.5	C(744)				
C12H26S	BUTYL OCTYL SULFIDE	(G)	202.394	-59.69	T(831)	164.45	T(831)	19.40	-14.217
C12H26S	DECYL ETHYL SULFIDE	(G)	202.394	-59.84	T(832)	164.13	T(832)	19.34	-14.177
C12H26S	1-DODECANETHIOL	(G)	202.394	-60.39	T(906)	164.44	T(906)	18.70	-13.706
C12H26S	HEXYL SULFIDE	(G)	202.394	-59.69	T(833)	163.07	T(833)	19.81	-14.519
C12H26S	METHYL UNDECYL SULFIDE	(G)	202.394	-58.90	T(834)	163.59	T(834)	20.44	-14.984
C12H26S	NONYL PROPYL SULFIDE	(G)	202.394	-59.51	T(835)	164.45	T(835)	19.58	-14.349
C12H26S2	HEXYL DISULFIDE	(G)	234.460	-57.56	T(877)	174.15	T(877)	20.91	-15.326
C12H27N	TRISOBUTYLAMINE	(L)	185.344	-75.6	C(744)				

XX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C12F22	DICOSAFLUOROBICYCLOHEXYL	(S)	562.120	-1047.2	A(291)				
C13H9N	ACRIDINE	(S)	179.210	46.2	C(1618)				
C13H9N	2-BIPHENYLCARBONITRILE	(S)	179.210	57.4	C(177)				
C13H10	FLUORENE	(S)	166.210	21.1	C(744)				
C13H10N2	3-AMINOACRIDINE	(S)	194.226	37.9	C(1618)				
C13H10N2	5-AMINOACRIDINE	(S)	194.226	36.1	C(1618)				
C13H10N2O	ACRIDINE NITRATE	(S)	242.226	-12.2	C(1618)				
C13H10N4	1,5-DIPHENYLTETRAZOLE	(S)	222.242	99.3	B(974)				
C13H10N4	2,5-DIPHENYLTETRAZOLE	(S)	222.242	94.4	B(974)				
C13H10O	BENZOPHENONE	(S)	182.210	-8.3	A(256)				
C13H10O	BENZOPHENONE	(L)	182.210	-4.3	A(256)				
C13H10O	DIBENZOPYRAN	(S)	182.210	-15.26	A(202)				
C13H10O2	PHENYL BENZOATE	(S)	198.210	-52.4	C(744)				
C13H10O2	O-PHENYLBENZOIC ACID	(S)	198.210	-81.8	B(177)				
C13H10O3	DIPHENYL CARBONATE	(S)	214.210	-95.93	A(1357)	66.54	M(1357)	-42.05	30.822
C13H10O3	PHENYL SALICYLATE	(S)	214.210	-104.2	C(185)				
C13H11Cl	CHLORODIPHENYLMETHANE	(S)	202.675	14.1	C(744)				
C13H11N	N-BENZYLIDENEANILINE	(S)	181.226	41.0	C(239)				
C13H11NO	BENZANILIDE	(S)	197.226	-21.5	C(744)				
C13H11NO	BENZOPHENONE OXIME	(S)	197.226	28.7	C(744)				
C13H11N2O3	3-AMINOACRIDINE NITRATE	(S)	243.234	-17.6	C(1618)				
C13H11N2O3	5-AMINOACRIDINE NITRATE	(S)	243.234	-35.9	C(1618)				
C13H11N3	2,8-DIAMINOACRIDINE	(S)	209.242	28.4	C(1618)				
C13H12	DIPHENYLMETHANE	(S)	168.226	16.81	A(1115)	57.2	M(656)	60.86	-44.613
C13H12	DIPHENYLMETHANE	(L)	168.226	21.25	A(1115)	72.1	M(656)	60.86	-44.611
C13H12	M-METHYLBIPHENYL	(L)	168.226	21.81	B(177)				
C13H12	O-METHYLBIPHENYL	(S)	168.226	27.28	B(177)				
C13H12	P-METHYLBIPHENYL	(L)	168.226	14.59	B(177)				
C13H12N2O	CARBANILIDE	(S)	212.242	-19.1	C(744)				
C13H12N2O	1,1-DIPHENYLUREA	(S)	212.242	-26.7	B(982)				
C13H12N4	FORMAZANE	(S)	224.258	109.3	B(974)				
C13H12N4O3	2,8-DIAMINOACRIDINE NITRATE	(S)	272.258	-39.3	C(1618)				
C13H12O	BENZHYDROL	(S)	184.226	-25.16	A(1112)				
C13H12O	2,7-DIMETHYL-4,5-BENZOTROPONE	(S)	184.226	-17.40	A(1290)				
C13H13N	4-METHYLDIPHENYLAMINE	(S)	183.242	14.2	B(1472)				

XXI

CXXI

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_f^{\circ 298}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_f^{\circ 298}$ (kcal/mole)	Log K_p
C13H13N	N-METHYLDIPHENYLAMINE (S)		183.242	31.4	B(1472)				
C13H14	2-FTHYL-3-METHYLNAPHTHALENE (G)		170.242	15.72	T(462)	109.33	T(462)	53.54	-39.242
C13H14	2-FTHYL-6-METHYLNAPHTHALENE (G)		170.242	14.65	T(463)	108.79	T(463)	52.63	-38.576
C13H14	2-FTHYL-7-METHYLNAPHTHALENE (G)		170.242	14.65	T(464)	108.79	T(464)	52.63	-38.576
C13H14	1-PROPYLNAPHTHALENE (L)		170.242	2.8	C(606)				
C13H14	1-PROPYLNAPHTHALENE (G)		170.242	17.85	T(460)	109.55	T(460)	55.60	-40.755
C13H14	2-PROPYLNAPHTHALFNE (G)		170.242	17.65	T(461)	110.18	T(461)	55.21	-40.471
C13H14N2O	TETRAHYDROCARBAZOLE								
C13H14N2O	CARBOXAMIDE (S)		214.258	-256.0	B(1472)				
C13H14O	5-METHYL-1-PHENYL-1-HEXYN-3-ONE (L)		186.242	20.0	C(744)				
C13H14O	7-PHENYL-4-HEPTYN-3-ONE (L)		186.242	-14.1	C(744)				
C13H14O4	1,2-INDANYLENE DIACETATE, CIS(S)		234.242	-185.1	B(1537)				
C13H14O4	1,2-INDANYLENE DIACETATE, TRANS(L)		234.242	-181.6	B(1537)				
C13H16O3	BUTYL O-HYDROXYCINNAMIC ACID, CIS (M.P. 53 TO 54 C) (U,S)		220.258	-129.3	C(744)				
C13H16O3	RUTYL-HYDROXYCINNAMIC ACID, TRANS (M.P. 89 TO 90 C) (U,S)		220.258	-135.7	C(744)				
C13H17NO5	FTHYL 5-CARBETHOXY-2,4-DIMETHYLPYRROLE-3-GLYOXYLATE (S)		267.274	-238.6	C(1413)				
C13H17NO5	DIMETHYLPYRROLE-3-GLYOXYLATE (S)		269.290	-266.8	C(1413)				
C13H20	2,4-DIMETHYL-1-PHENYLPENTANE (L)		176.290	-45.7	C(839)				
C13H20	2,4-DIMETHYL-3-PHENYLPENTANE (L)		176.290	-40.7	C(839)				
C13H20	1-PHENYLHEPTANE (G)		176.290	-18.08	T(424)	133.09	T(424)	40.57	-29.737
C13H20O	6,10-DIMETHYL-3,5,9-UNDECATRIEN-2-ONE (L)		192.290	-51.2	C(744)				
C13H20O	4-(2,6,6-TRIMETHYL-1-CYCLOHEXEN-1-YL)-3-BUTEN-2-ONE(L)		192.290	-62.5	G(744)				
C13H20O	4-(2,6,6-TRIMETHYL-2-CYCLOHEXEN-1-YL)-3-BUTEN-2-ONE(L)		192.290	-67.0	C(744)				
C13H20O3S	P-HEPTYLBENZENESULFONIC ACID (G)		256.356			149.89	E(69)		
C13H24	DICYCLOHEXYLMETHANE (L)		180.322	-71.3	C(1335)				
C13H24	2-METHYLBICYCLOHEXYL (L)		180.322	-46.3	C(517)				
C13H24	2-METHYLBICYCLOHEXYL (L)		180.322	-61.3	C(517)				

CXXII

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_f^{\circ 298}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_f^{\circ 298}$ (kcal/mole)	Log K_p
C13H24	1-TRIDECYNE (G)		180.322	-4.93	T(330)	153.29	T(330)	66.31	-48.603
C13H24O2	HEXYLPROPIOLIC ACETAL (U,L)		212.322	-94.4	C(744)				
C13H24O4	DECYLMALONIC ACID (S)		244.322	-279.1	B(1535)				
C13H24O4	TRIDECANEDIOIC ACID (S)		244.322	-272.5	C(744)				
C13H26	3-CYCLOHEXYL-2,4-DIMETHYL-PENTANE (L)		182.338	-84.1	C(839)				
C13H26	1-CYCLOHEXYLHEPTANE (L)		182.338	-84.51	A(1113)	106.8	M(1113)	9.90	-7.253
C13H26	1-CYCLOHEXYLHEPTANE (G)		182.338	-65.73	T(386)	137.51	T(386)	19.52	-14.307
C13H26	1-CYCLOPENTYLOCTANE (G)		182.338	-59.92	T(359)	146.27	T(359)	22.72	-16.651
C13H26	CYCLOTRIDECANE (L)		182.338	-74.21	A(271)				
C13H26	1-TRIDECENE (G)		182.338	-44.45	T(296)	157.09	T(296)	34.96	-25.626
C13H26O2	METHYL DODECANOATE (L)		214.338	-165.82	A(3)				
C13H26O2	TRIDECANOIC ACID (S)		214.338	-192.97	A(3)				
C13H26O2	TRIDECANOIC ACID (L)		214.338	-182.67	A(3)				
C13H28	TRIDECANE (L)		184.354	-90.27	E(1203)	124.97	M(420)	8.02	-5.881
C13H28	TRIDECANE (G)		184.354	-74.45	T(253)	158.09	T(253)	13.97	-10.239
C13H28O	1-TRIDECANOL (G)		200.354	-110.77	T(533)	170.37	T(533)	-18.71	13.712
C13H28S	BUTYL NONYL SULFIDE (G)		216.420	-64.62	T(836)	173.76	T(836)	21.40	-15.687
C13H28S	DECYL PROPYL SULFIDE (G)		216.420	-64.44	T(837)	173.76	T(837)	21.58	-15.819
C13H28S	DODECYL METHYL SULFIDE (G)		216.420	-63.82	T(838)	172.90	T(838)	22.46	-16.461
C13H28S	ETHYL UNDECYL SULFIDE (G)		216.420	-64.40	T(839)	173.44	T(839)	21.72	-15.918
C13H28S	1-TRIDECANETHIOL (G)		216.420	-65.31	T(907)	173.75	T(907)	20.71	-15.183
C14H8N10O16	BIS(TRINITROPHENYL)-N,N'-DINITROETHYLENEDIAMINE(S)		572.284	32.7	B(981)				
C14H8O2	ANTHRAQUINONE (S)		208.204	-49.72	C(913)				
C14H8O2	PHENANTHRENEQUINONE (S)		208.204	-55.30	C(913)				
C14H8O3	HYDROXYANTHRAQUINONE (S)		224.204	-107.0	C(744)				
C14H8O4	1,2-DIHYDROXYANTHRAQUINONE (S)		240.204	-139.9	C(744)				
C14H8O5	1,2,4-TRIHYDROXYANTHRAQUINONE(L)		256.204	-186.8	C(744)				
C14H8O8	1,2,3,5,6,7-HEXAHYDROXYANTHRAQUINONE (S)		304.204	-340.0	C(744)				
C14H9NO4	4-NITROBENZIL (S)		255.220	-22.0	C(744)				
C14H10	ANTHRACENE (S)		178.220	30.87	A(246)	49.58	M(655)	68.30	-50.060
C14H10	ANTHRACENE (G)		178.220	55.17	A(246)				
C14H10	DIPHENYLACETYLENE (S)		178.220	76.4	A(432)	58.6	M(1388)	111.14	-81.462

CXIV

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C14H10	PHENANTHRENE	(S)	178.220	27.76	A(246)	50.63	M(655)	64.87	-47.551
C14H10	PHENANTHRENE	(G)	178.220	49.46	A(246)				
C14H10N2O	DIPHENYL FURAZAN	(S)	222.236	79.9	C(1012)				
C14H10N2O	DIPHENYL-1,2,4-OXADIAZOLE	(S)	222.236	51.9	C(1012)				
C14H10N2O	DIPHENYL-1,3,4-OXADIAZOLE	(S)	222.236	41.9	C(1012)				
C14H10N2O4	4,4'-DINITROSTILBENE, CIS	(S)	270.236	17.00	A(16)				
C14H10N2O4	4,4'-DINITROSTILBENE, TRANS	(S)	270.236	12.40	A(16)				
C14H10O2	ANTHRACENE-9,10-PEROXIDE	(S)	210.220	19.7	A(102)				
C14H10O2	BENZIL	(S)	210.220	-36.91	A(1114)				
C14H10O2	9,10-PHENANTHRENE-2,5-DIOL	(S)	210.220	-56.8	C(744)				
C14H10O3	BENZOIC ANHYDRIDE	(S)	226.220	-103.1	B(163)				
C14H10O3	DISALICYLIC ALDEHYDE	(U,S)	226.220	-69.1	C(744)				
C14H10O4	BENZOYL PEROXIDE	(S)	242.220	-93.8	B(163)				
C14H10O5	SALICYLOSALICYLIC ACID	(S)	258.220	-249.7	C(1340)				
C14H11N2	4-NITROSTILBENE, CIS	(S)	225.236	30.73	A(16)				
C14H11N2	4-NITROSTILBENE, TRANS	(S)	225.236	23.73	A(16)				
C14H12	9,10-DIHYDROANTHRACENE	(S)	180.236	16.0	B(914)				
C14H12	1,1-DIPHENYLETHENE	(L)	180.236	40.34	A(263)				
C14H12	STILBENE, CIS	(L)	180.236	43.00	A(263)				
C14H12	STILBENE, TRANS	(S)	180.236	32.27	A(263)	60.0	M(1104)	75.90	-55.630
C14H12N2	BENZALDEHYDE AZINE	(S)	208.252	81.0	C(239)				
C14H12N2O2	DIBENZOYLHYDRAZINE	(S)	240.252	-51.23	A(244)				
C14H12N2O2	DIPHENYLGLYOXIME, ALPHA	(S)	240.252	11.7	B(1013)				
C14H12N2O2	DIPHENYLGLYOXIME, BETA	(S)	240.252	6.0	B(1013)				
C14H12N2O2	DIPHENYLGLYOXIME, GAMMA	(S)	240.252	14.4	B(1013)				
C14H12O	P-METHYLBENZOPHENONE	(S)	196.236	-118.6	A(256)				
C14H12O	2-PHENYLACETOPHENONE	(S)	196.236	-17.11	A(1114)				
C14H12O2	BENZOIN	(S)	212.236	-59.35	A(1114)				
C14H12O2	DIPHENYLACETIC ACID	(S)	212.236	-73.7	C(744)				
C14H12O2	P-TOLYL BENZOATE	(S)	212.236	-65.1	C(744)				
C14H12O3	BENZILIC ACID	(S)	228.236	-107.1	C(744)				
C14H12O4	O-METHOXYPHENYL SALICYLATE	(S)	244.236	-135.6	C(744)				
C14H13NO	N-ACETYLDIPHENYLAMINE	(S)	211.252	-7.6	B(1472)				
C14H14	BIBENZYL	(L)	182.252	12.31	A(246)	64.6	M(656)	63.87	-46.815
C14H14	1,1-DIPHENYLETHANE	(L)	182.252	11.7	A(270)	80.28	M(1388)	58.58	-42.941
C14H14	BI-M-TOLYL	(L)	182.252	6.2	B(177)				

CXV

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C14H14	BI-P-TOLYL	(S)	182.252	4.8	B(177)				
C14H14N2O	N-ACETYLDIHYDRAZOBENZENE	(S)	226.268	-2.0	C(1175)				
C14H14N2O	4'-(P-AMINOPHENYL)ACETANILIDE	(S)	226.268	-38.8	C(1175)				
C14H14N2O	4,4'-AZODIANISOLE	(L)	226.268	2.9	C(744)				
C14H14N2O	1-METHYL-1,3-DIPHENYLUREA	(S)	226.268	-22.7	B(982)				
C14H14O2	1,2-DIPHENYL-1,2-ETHANEDIOL	(S)	214.252	-70.4	C(744)				
C14H14O2	1,2-DIPHENYL-1,2-ETHANEDIOL	(S)	214.252	-65.6	C(744)				
C14H14O2S	BENZYL SULFONE	(L)	246.318	-63.3	B(905)				
C14H14O2S	BENZYL SULFONE	(G)	246.318	-36.0	B(905)				
C14H14O2S	P-TOLYL SULFONE	(L)	246.318	-74.4	B(905)				
C14H14O2S	P-TOLYL SULFONE	(G)	246.318	-48.2	B(905)				
C14H14O4	ALLYL PHTHALATE	(L)	246.252	-131.5	B(985)				
C14H14S	BENZYL SULFIDE	(L)	246.384	23.7	B(900)				
C14H14S	BENZYL SULFIDE	(G)	246.384	46.0	B(900)				
C14H15N	DIBENZYLAMINE	(S)	197.268	25.7	C(744)				
C14H15N	DI-P-TOLYLAMINE	(S)	197.268	-0.1	B(1472)				
C14H16	1-BUTYLNAPHTHALENE	(G)	184.268	12.68	T(465)	118.83	T(465)	57.38	-42.056
C14H16	2-BUTYLNAPHTHALENE	(G)	184.268	12.50	T(466)	119.46	T(466)	57.01	-41.786
C14H16N4O	M-AZOXYTOLUIDINE	(U,S)	256.300	41.6	C(744)				
C14H16O	1-PHENYL-1-OCTYN-3-ONE	(L)	200.268	-29.5	C(744)				
C14H16O4	1,2,3,4-TETRAHYDRO-1,2-NAPHTHYLENE DIACETATE, CIS	(S)	248.268	-194.2	B(1537)				
C14H16O4	1,2,3,4-TETRAHYDRO-1,2-NAPHTHYLENE DIACETATE, TRANS	(S)	248.268	-195.8	B(1537)				
C14H18O	1-PHENYL-2-OCTYN-1-OL	(L)	202.284	-39.7	C(744)				
C14H18O3	O-HYDROXY-ISUPENTYL CINNAMIC ACID, CIS	(M,P, RO TO 80.5 C)(U,S)	234.284	-137.1	C(744)				
C14H18O3	HYDROXY-ISUPENTYL CINNAMIC ACID, TRANS	(M,P, 79 TO 79.5 C)(U,S)	234.284	-138.7	C(744)				
C14H19NO	N-ACETYLCYCLOHEXYLPHENYLAMINE	(S)	217.300	-69.5	B(1472)				
C14H19N3O4	GLYCYLALANYLPHENYLALANINE	(S)	293.316	-221.5	B(1176)				
C14H20	1,8-CYCLOTETRADECADIENE	(S)	188.300	35.23	A(449)				
C14H20	1,8-CYCLOTETRADECADIENE	(G)	188.300	74.91	B(449)				
C14H20N2O3	VALINE PHENYLALANINE ANHYDRIDE	(S)	264.316	-162.2	B(1177)				
C14H20N2O3	VALYLPHENYLALANINE	(S)	264.316	-183.1	B(1178)				

CXVI

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298} (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log K_p
C14H2008	TETRAETHYL								
C14H2008	ETHENETETRACARBOXYLATE . (S)		316.300	-377.2	C(744)				
C14H21N02	2,4-DIETHYL-3,5-DIPROPIONYL-								
C14H21N02	PYRROLE (S)		235.316	-110.7	C(1413)				
C14H21N05	DIETHYL 5-(1-HYDROXY-								
C14H21N05	PROPYL)-3-METHYL-								
C14H21N05	2,4-PYRROLEDICARBOXYLATE (S)		283.316	-254.7	C(1414)				
C14H22	1-PHENYLOCTANE (G)		190.316	-23.00	T(425)	142.40	T(425)	42.59	-31.214
C14H22	1,2,3,4-TETRAETHYLBENZENE . (G)		190.316	-29.46	T(426)	138.55	T(426)	37.27	-27.321
C14H22	1,2,3,5-TETRAETHYLBENZENE . (G)		190.316	-29.36	T(427)	139.99	T(427)	36.94	-27.079
C14H22	1,2,4,5-TETRAETHYLBENZENE . (G)		190.316	-29.46	T(428)	139.03	T(428)	37.13	-27.216
C14H22035	P-OCTYLBENZENESULFONIC ACID (G)		270.382			159.06	E(69)		
C14H2208	TETRAETHYL-								
C14H2208	ETHANETETRACARBOXYLATE, SYM (S)		318.316	-405.9	C(744)				
C14H24	PERHYDROANTHRACENE-								
C14H24	TRANS-ANTI-TRANS (S)		192.332	-70.31	A(931)				
C14H24	PERHYDROANTHRACENE-								
C14H24	TRANS-ANTI-TRANS (G)		192.332	-52.93	B(931)				
C14H24	PERHYDROANTHRACENE-								
C14H24	TRANS-SYN-TRANS (S)		192.332	-79.21	A(931)				
C14H24	PERHYDROANTHRACENE-								
C14H24	TRANS-SYN-TRANS (G)		192.332	-58.32	B(931)				
C14H26	BICYCLOHEPTANE (L)		194.348	-67.5	A(806)				
C14H26	1,2-DICYCLOHEXYLETHANE . . . (L)		194.348	-90.1	B(177)				
C14H26	3,3-DIMETHYLBICYCLOHEXYL . . (L)		194.348	-98.9	C(744)				
C14H26	1-TETRADECYNE (G)		194.348	-9.86	T(331)	162.60	T(331)	68.31	-50.073
C14H2603	HEPTANOIC ANHYDRIDE (S)		247.348	-219.2	C(744)				
C14H2604	UNDECYLMALONIC ACID (S)		258.348	-286.2	B(1535)				
C14H28	1-CYCLOHEXYLACTANE (G)		196.364	-70.85	T(387)	146.82	T(387)	21.53	-15.784
C14H28	CYCLOTETRADECANE (S)		196.364	-64.85	T(360)	155.58	T(360)	24.72	-18.121
C14H28	CYCLOTETRADECANE (G)		196.364	-89.15	A(449)				
C14H28	1-TETRADECENE (G)		196.364	-56.94	B(449)				
C14H2802	TERT-BUTYL DECANOATE (L)		228.364	-49.36	T(297)	166.40	T(297)	36.99	-27.111
C14H2802	METHYL TRIDECANOATE (L)		228.364	-180.1	A(1454)				
C14H2802	MYRISTIC ACID (S)		228.364	-171.73	A(3)				
				-199.7	A(1454)				

CXVII

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298} (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log K_p
C14H2802	MYRISTIC ACID (S)		228.364	-199.39	A(3)				
C14H2802	MYRISTIC ACID (L)		228.364	-188.70	A(3)				
C14H2803	TERT-BUTYL PEROXYCAPRATE . . (L)		244.364	-164.7	A(1454)				
C14H2803	PEROXYMYRISTIC ACID (S)		244.364	-179.4	A(1454)				
C14H30	TETRADECANE (L)		198.380	-96.38	E(1203)	132.74	M(420)	9.31	-6.823
C14H30	TETRADECANE (G)		198.380	-79.38	T(254)	167.40	T(254)	15.97	-11.709
C14H300	1-TETRADECANOL (G)		214.380	-115.70	T(534)	179.68	T(534)	-16.70	12.242
C14H30S	BUTYL DECYL SULFIDE (G)		230.446	-69.55	T(840)	183.07	T(840)	23.41	-17.157
C14H30S	DODECYL ETHYL SULFIDE (G)		230.446	-69.33	T(841)	182.75	T(841)	23.72	-17.388
C14H30S	HEPTYL SULFIDE (G)		230.446	-69.54	T(842)	181.69	T(842)	23.83	-17.466
C14H30S	METHYL TRIDECYL SULFIDE . . . (G)		230.446	-68.75	T(843)	182.21	T(843)	24.46	-17.931
C14H30S	PROPYL UNDECYL SULFIDE (G)		230.446	-69.36	T(844)	183.07	T(844)	23.60	-17.296
C14H30S	1-TETRADECANETHIOL (G)		230.446	-70.24	T(908)	183.06	T(908)	22.72	-16.654
C14H30S2	HEPTYL DISULFIDE (G)		262.512	-67.41	T(878)	192.77	T(878)	24.93	-18.274
C15H100	3-PHENYLPROPIOLPHENONE . . . (S)		206.230	35.3	C(744)				
C15H110G	ALPHA, GAMMA-DIPHENYLISOXAZOLE(S)		221.246	37.5	C(1467)				
C15H1202	1,3-DIPHENYL-1,3-PROPANEDIONE(S)		224.246	-53.26	A(1114)				
C15H14	1,1-DIPHENYLCYCLOPROPANE . . (L)		194.262	44.3	A(804)				
C15H14	1,2-DIPHENYLCYCLOPROPANE, CIS(L)		194.262	42.7	A(804)				
C15H14	1,2-DIPHENYLCYCLOPROPANE, TRANS(L)		194.262	39.7	A(804)				
C15H14	ALPHA, BETA-METHYLPHENYLSTYRENE(U,S)		194.262	40.2	C(744)				
C15H140	1,3-DIPHENYL-2-PROPANONE . . (S)		210.262	-20.3	B(1403)				
C15H140	P-ETHYLBENZOPHENONE (L)		210.262	-15.40	A(256)				
C15H1402	O-XYLENYL BENZOATE (U,S)		226.262	-73.1	C(744)				
C15H15N02	ETHYL DIPHENYLCARBAMATE . . . (S)		241.278	-80.8	B(984)				
C15H16	1,1-DIPHENYLPROPANE (L)		196.278	11.8	C(1335)				
C15H16	1,2-DIPHENYLPROPANE (L)		196.278	6.8	C(1335)				
C15H16	1,3-DIPHENYLPROPANE (L)		196.278	11.8	C(1335)				
C15H16	2,2-DIPHENYLPROPANE (L)		196.278	21.8	C(1335)				
C15H16	2-ETHYLDIPHENYLMETHANE . . . (L)		196.278	6.8	C(841)				
C15H16	3-ETHYLDIPHENYLMETHANE . . . (L)		196.278	1.8	C(841)				
C15H16	4-ETHYLDIPHENYLMETHANE . . . (L)		196.278	1.8	C(841)				
C15H16	(M-ETHYLPHENYL)PHENYLMETHANE (L)		196.278	1.8	C(841)				
C15H16	(O-ETHYLPHENYL)PHENYLMETHANE (L)		196.278	6.8	C(841)				
C15H16	(P-ETHYLPHENYL)PHENYLMETHANE (L)		196.278	1.8	C(841)				

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C15H34N2O2	HEPTYL CARBAMATE	(S)	274.438	-222.0	H(218)				
C16H10	DIPHENYLBUTADIENE	(S)	202.240	123.7	A(266)				
C16H10	FLUORANTHENE	(S)	202.240	45.35	A(1600)	55.09	M(1600)	81.95	-60.064
C16H10	FLUORANTHENE	(S)	202.240	46.0	A(156)	55.09	M(1600)	82.60	-60.541
C16H10	FLUORANTHENE	(G)	202.240	70.4	A(156)				
C16H10	PYRENE	(S)	202.240	27.41	A(1600)	53.75	M(1600)	64.40	-47.208
C16H10N2O2	(DELTA-2,2'-BIINDOLINE)-								
C16H10N2O2	3,3'-DIONE	(S)	262.256	-29.9	C(744)				
C16H10N2O3	DIBENZOYL FURAZAN	(S)	278.256	-28.0	C(1012)				
C16H10O3	DIPHENYLMALEIC ANHYDRIDE	(S)	250.240	-76.0	C(744)				
C16H11NO2	BENZALHIPPURIC ACID LACTONE(U,L)		249.256	-25.1	C(744)				
C16H11NO5	P-NITROACETYL BENZOIN	(U,S)	297.256	-14.8	C(744)				
C16H12O2	1,4-DIPHENYL-2-BUTENE-								
C16H12O2	1,4-DIONE	(S)	236.256	-77.55	A(1112)	76.3	M(1104)	26.64	-19.525
C16H12O3	2,3-DIPHENYLSUCCINIC ANHYDRIDE								
C16H12O3	(HACEMIC) (S)	(S)	252.256	-97.3	C(744)				
C16H12O3	2,3-DIPHENYLSUCCINIC								
C16H12O3	ANHYDRIDE, TRANS (S)	(S)	252.256	-98.8	B(1538)				
C16H13N	PHENYL-ALPHA-NAPHTHYLAMINE (U,S)	(U,S)	219.272	56.1	C(744)				
C16H13N	PHENYL-BETA-NAPHTHYLAMINE (U,S)	(U,S)	219.272	51.0	C(744)				
C16H13N	N-PHENYL-2-NAPHTHYLAMINE	(S)	219.272	38.2	A(1234)				
C16H13NO3	BENZALHIPPURIC ACID	(U,S)	267.272	-97.2	C(744)				
C16H14	2,7-DIMETHYLPHENANTHRENE	(S)	206.272	8.50	A(448)				
C16H14	4,5-DIMETHYLPHENANTHRENE	(S)	206.272	21.05	A(448)				
C16H14	1,4-DIPHENYL-1,3-BUTADIENE,								
C16H14	CIS-CIS	(S)	206.272	47.30	A(265)				
C16H14	1,4-DIPHENYL-1,3-BUTADIENE,								
C16H14	TRANS-TRANS (S)	(S)	206.272	42.52	A(265)				
C16H14	DI-O-TOLYLACETYLENE	(S)	206.272	55.9	A(266)				
C16H14	DI-P-TOLYLACETYLENE	(S)	206.272	53.8	A(266)				
C16H14O2	1,4-DIPHENYL-1,4-BUTANEDIONE (S)	(S)	238.272	-61.24	A(1112)	77.6	M(1104)	1.87	-1.367
C16H14O3	O-TOLUIC ACID ANHYDRIDE	(S)	254.272	-127.6	B(163)				
C16H14O3	P-TOLUIC ACID ANHYDRIDE	(S)	254.272	-124.6	B(163)				
C16H14O4	2,3-DIPHENYLSUCCINIC-								
C16H14O4	ACID, CIS	(S)	270.272	-174.0	H(1538)				

CXX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C16H14O4	2,3-DIPHENYLSUCCINIC								
C16H14O4	ACID, TRANS (S)	(S)	270.272	-175.3	A(1538)				
C16H14O4	O-TOLYL PEROXIDE	(S)	270.272	-119.7	B(163)				
C16H14O4	P-TOLYL PEROXIDE	(S)	270.272	-108.0	B(163)				
C16H15NO2	N,N-DIPHENYLACETOACETAMIDE	(S)	253.288	-51.2	B(1472)				
C16H15NO3	BENZOYLPHENYLALANINE	(U,S)	269.288	-123.7	C(744)				
C16H16	1,1-DI-O-TOLYLETHYLENE	(S)	208.288	21.0	A(265)				
C16H16	1,1-DI-P-TOLYLETHYLENE	(S)	208.288	20.3	A(265)				
C16H16	1,2-DI-O-TOLYLETHYLENE, CIS (S)	(S)	208.288	20.3	A(265)				
C16H16	1,2-DI-O-TOLYLETHYLENE, TRANS(S)	(S)	208.288	17.7	A(265)				
C16H16	1,2-DI-P-TOLYLETHYLENE, CIS (S)	(S)	208.288	23.2	A(265)				
C16H16	1,2-DI-P-TOLYLETHYLENE, TRANS(S)	(S)	208.288	13.6	A(265)				
C16H16	2,2-PARACYCLOPHANE	(S)	208.288	36.9	A(155)				
C16H16	2,2-PARACYCLOPHANE	(G)	208.288	59.9	B(155)				
C16H16N2	DIBENZYLIDENEETHYLENEDIAMINE (S)	(S)	236.304	65.0	C(239)				
C16H16N2O	N-ALLYLCARBANILIDE	(S)	252.304	-6.1	B(1472)				
C16H16N2O2	N,N'-DIACETYL BENZIDINE	(S)	268.304	-113.0	C(1175)				
C16H16N2O2	N,N'-DIACETYLHYDRAZOBENZENE (S)	(S)	268.304	-45.1	C(1175)				
C16H16N2O2	SUCCINANILIDE, SYM	(S)	268.304	-79.3	C(744)				
C16H16O	P-ISOPROPYLBENZOPHENONE	(L)	224.288	-28.4	A(256)				
C16H16O	8,9,10,11-TETRAHYDRO-6,12-								
C16H16O	METHANO-7H-BENZOCYCLO-								
C16H16O	UNDECEN-14-ONE (S)	(S)	224.288	14.4	A(1290)				
C16H16O2	BETA-BENZYLHYDROCINNAMIC ACID(S)	(S)	240.288	-95.3	C(744)				
C16H16O2	4,4'-DIMETHOXYSTILBENE	(S)	240.288	-34.4	C(744)				
C16H16O2	PSEUDOCUMENYL BENZOATE	(U,S)	240.288	-81.8	C(744)				
C16H18	2-BUTYLBIPHENYL	(L)	210.304	5.0	C(516)				
C16H18	(P-CUMENYL)PHENYLMETHANE	(L)	210.304	20.0	C(840)				
C16H18	ALPHA,ALPHA'-DIMETHYL-								
C16H18	BIBENZYL, DL (S)	(S)	210.304	15.0	C(1337)				
C16H18	ALPHA,ALPHA'-DIMETHYL-								
C16H18	BIBENZYL, MESO (S)	(S)	210.304	10.0	C(1337)				
C16H18	1,1-DIPHENYLBUTANE	(L)	210.304	10.0	C(1337)				
C16H18	1,2-DIPHENYLBUTANE	(L)	210.304	5.0	C(1337)				
C16H18	1,3-DIPHENYLBUTANE	(L)	210.304	10.0	C(1337)				
C16H18	1,4-DIPHENYLBUTANE	(S)	210.304	-2.58	A(264)				

CXXI

CXXII

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Log K_p
C16H18	1,4-DIPHENYLBUTANE	(L)	210.304	10.0	C(1337)				
C16H18	2,2-DIPHENYLBUTANE	(L)	210.304	10.0	C(1337)				
C16H18	2,3-DIPHENYLBUTANE, MESO	(L)	210.304	10.0	C(1337)				
C16H18	2,3-DIPHENYLBUTANE, DL	(L)	210.304	15.0	C(1337)				
C16H18	1,3-DIPHENYL-2-METHYLPROPANE (L)	(L)	210.304	20.0	C(206)				
C16H18	1,2-DI-O-TOLYLETHANE	(S)	210.304	-9.27	A(264)				
C16H18	1,1-DI-O-TOLYLETHANE	(L)	210.304	-5.93	A(264)				
C16H18	1,2-DI-P-TOLYLETHANE	(S)	210.304	-9.74	A(264)				
C16H18	1,1-DI-P-TOLYLETHANE	(L)	210.304	-7.60	A(264)				
C16H18	ALPHA-ETHYLPHENYL	(L)	210.304	5.0	C(1337)				
C16H18	4-ISOPROPYLDIPHENYLMETHANE	(L)	210.304	20.0	C(840)				
C16H18	PHENYL(P-PROPYLPHENYL)METHANE(L)	(L)	210.304	0.0	C(840)				
C16H18	4-PROPYLDIPHENYLMETHANE	(L)	210.304	0.0	C(840)				
C16H18N2O	1-ETHYL-3-METHYL-								
C16H18N2O	1,3-DIPHENYLUREA (S)	(S)	254.320	-24.6	B(982)				
C16H18N2O2	4,4'-AZODIPHENETOLE	(S)	270.320	-17.9	C(744)				
C16H18N2O3	2,2'-AZOXIDIPHENETOLE	(S)	288.320	-31.9	C(744)				
C16H18N2O3	4,4'-AZOXIDIPHENETOLE	(S)	288.320	-19.6	C(744)				
C16H20N2O5	DIETHYL 3-HYDROXY-5,5'-								
C16H20N2O5	DIMETHYL(2,3'-BIPIRROLE)-								
C16H20N2O5	4,4'-DICARBOXYLATE (S)	(S)	320.336	-236.0	C(1414)				
C16H20O4	1-PHENYL-1,2-CYCLOHEXYLENE								
C16H20O4	DIACETATE, CIS (S)	(S)	276.320	-203.7	H(1537)				
C16H22O4	DIBUTYL PHTHALATE	(L)	278.336	-198.3	H(12)				
C16H22O4	ALPHA-GLUCOSE PENTAACETATE, D(S)	(S)	278.336	-537.7	A(230)				
C16H22O4	BETA-GLUCOSE PENTAACETATE, D (S)	(S)	278.336	-533.7	A(230)				
C16H22O11	GALACTOSE PENTAACETATE	(S)	390.336	-531.0	C(744)				
C16H26	PENTATHYLBENZENE	(G)	218.368	-41.87	T(431)	154.84	T(431)	39.43	-28.901
C16H26	1-PHENYLDECANE	(L)	218.368	-51.58	A(880)				
C16H26	1-PHENYLDECANE	(G)	218.368	-32.86	T(430)	161.02	T(430)	46.60	-34.155
C16H26O3S	P-DECYLBENZENE SULFONIC ACID (G)	(G)	298.434			177.40	E(69)		
C16H30	2-BUTYLDICYCLOHEXYL	(LH+L)	222.400	-42.9	C(517)				
C16H30	2-BUTYLDICYCLOHEXYL	(HH+L)	222.400	-42.9	C(517)				
C16H30	1,1-DICYCLOHEXYLAUTANE	(L)	222.400	-57.9	C(1337)				
C16H30	1,2-DICYCLOHEXYLAUTANE	(L)	222.400	-47.9	C(1337)				
C16H30	1,3-DICYCLOHEXYLAUTANE	(L)	222.400	-57.9	C(1337)				

CXXIII

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_{f,298}^{\circ}$ (kcal/mole)	Log K_p
C16H30	1,4-DICYCLOHEXYLBUTANE	(L)	222.400	-57.9	C(1337)				
C16H30	2,2-DICYCLOHEXYLBUTANE	(L)	222.400	-52.9	C(1337)				
C16H30	2,3-DICYCLOHEXYLBUTANE, DL	(L)	222.400	-57.9	C(1337)				
C16H30	2,3-DICYCLOHEXYLBUTANE, MESO (L)	(L)	222.400	-47.9	C(1337)				
C16H30	1,3-DICYCLOHEXYL-								
C16H30	2-METHYLPROPANE (L)	(L)	222.400	-42.9	C(206)				
C16H30	1-HEXADECENE	(G)	222.400	-19.71	T(333)	181.22	T(333)	72.34	-53.020
C16H30	4-ISOPROPYL-								
C16H30	DICYCLOHEXYLMETHANE	(LH+L)	222.400	-62.9	C(840)				
C16H30	4-ISOPROPYL-								
C16H30	DICYCLOHEXYLMETHANE	(HH+L)	222.400	-67.9	C(840)				
C16H30O4	TRIDECYLMALONIC ACID	(S)	286.400	-300.8	A(1535)				
C16H32	CYCLOHEXADECANE	(S)	224.416	-96.66	A(271)				
C16H32	1-CYCLOHEXYLDECANE	(L)	224.416	-100.03	A(880)	129.10	M(423)	16.86	-12.358
C16H32	1-CYCLOHEXYLDECANE	(G)	224.416	-80.51	T(389)	165.43	T(389)	25.55	-18.727
C16H32	1-CYCLOPENTYLUNDECANE	(G)	224.416	-74.70	T(362)	174.20	T(362)	28.74	-21.069
C16H32	1-HEXADECENE	(L)	224.416	-77.34	A(880)	147.9	M(950)	33.95	-24.881
C16H32	1-HEXADECENE	(G)	224.416	-59.23	T(299)	185.02	T(299)	40.99	-30.043
C16H32O2	TERT-BUTYL DUODECANOATE	(L)	256.416	-195.6	A(1454)				
C16H32O2	METHYL PENTADECANOATE	(L)	256.416	-184.45	A(3)				
C16H32O2	PALMITIC ACID	(S)	256.416	-213.30	A(3)	108.12	M(1622)	-75.54	55.373
C16H32O2	PALMITIC ACID	(S)	256.416	-211.3	A(853)	108.12	M(1622)	-73.54	53.907
C16H32O2	PALMITIC ACID	(S)	256.416	-213.3	A(1454)	108.12	M(1622)	-75.54	55.373
C16H32O2	PALMITIC ACID	(L)	256.416	-201.0	A(853)				
C16H32O2	PALMITIC ACID	(L)	256.416	-200.53	A(3)				
C16H32O3	TERT-BUTYL PEROXYLAURATE	(L)	272.416	-176.6	A(1454)				
C16H32O3	PEROXYPALMITIC ACID	(S)	272.416	-191.8	A(1454)				
C16H34	HEXADECANE	(L)	226.432	-109.07	A(443)	148.09	M(420)	11.46	-8.403
C16H34	HEXADECANE	(G)	226.432	-89.23	T(256)	186.02	T(256)	0.00	-14.656
C16H34O	1-HEXADECANOL	(S)	242.432	-163.55	A(1116)	108.0	M(1109)	-23.76	17.414
C16H34O	1-HEXADECANOL	(L)	242.432	-151.86	A(1116)	145.0	M(1109)	-23.10	16.932
C16H34O	1-HEXADECANOL	(G)	242.432	-125.54	T(536)	198.30	T(536)	-12.67	9.288
C16H34S	BUTYL DUODECYL SULFIDE	(G)	258.498	-79.40	T(849)	201.69	T(849)	27.43	-20.105
C16H34S	ETHYL TETRADECYL SULFIDE	(G)	258.498	-79.18	T(850)	201.36	T(850)	27.75	-20.338
C16H34S	1-HEXADECANETHIOL	(G)	258.498	-80.09	T(910)	201.67	T(910)	26.74	-19.603
C16H34S	METHYL PENTADECYL SULFIDE	(G)	258.498	-78.60	T(851)	200.82	T(851)	28.49	-20.861

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298} (cal/mole K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C16H34S	BCTYL SULFIDE	(G)	258.498	-79.39	T(852)	200.31	T(852)	27.85	-20.413
C16H34S	PROPYL TRIDECYL SULFIDE	(G)	258.498	-79.22	T(853)	201.69	T(853)	27.61	-20.236
C16H34S2	BCTYL DISULFIDE	(G)	290.564	-77.27	T(879)	211.39	T(879)	28.94	-21.214
C17H1202	2-NAPHTHYL BENZOATE	(S)	248.266	-44.0	H(855)				
C17H13N02	3-ANILINO-2-NAPHTHOIC ACID	(S)	263.282	-62.9	H(1640)				
C17H140	1,5-DIPHENYL-1,4-PENTADIENE- 3-ONE (S)	(S)	234.282	12.8	C(744)				
C17H1603	4-ALLYL-3,4-GUAIACOL BENZOATE (U,S)	(U,S)	268.298	-79.3	C(744)				
C17H1603	4-ALLYL-2-METHOXYPHENYL BENZOATE (S)	(S)	268.298	-79.5	C(744)				
C17H1603	2-METHOXY-4-PROPENYLPHENYL BENZOATE (S)	(S)	268.298	-88.7	C(744)				
C17H1603	BETA-TOLYL METHOXYCINNAMIC ACID (LABILE)	(U,S)	268.298	-102.5	C(744)				
C17H1603	BETA-TOLYL METHOXYCINNAMIC ACID (STABLE) (U,S)	(U,S)	268.298	-106.5	C(744)				
C17H180	P-TEHT BUTYLBENZOPHENONE	(L)	238.314	-32.4	A(256)				
C17H18N2O2	N,N-DIPHENYL- 4-MORPHOLINE CARBOXYAMIDE (S)	(S)	282.330	-48.6	B(1471)				
C17H1802	THYMYL BENZOATE	(S)	254.314	-84.2	C(744)				
C17H1802	THYMYL BENZOATE	(L)	254.314	-79.9	C(744)				
C17H20	2-BENZYL-1-PHENYLBUTANE	(L)	224.330	2.6	C(206)				
C17H20	(O-BUTYLPHENYL)PHENYLMETHANE (L)	(L)	224.330	-17.4	C(840)				
C17H20	(O-SEC-BUTYLPHENYL)- PHENYLMETHANE	(L)	224.330	-17.4	C(840)				
C17H20	(P-BUTYLPHENYL)- PHENYLMETHANE	(L)	224.330	-12.4	C(840)				
C17H20	(P-SEC-BUTYLPHENYL)- PHENYLMETHANE	(L)	224.330	-22.4	C(840)				
C17H20	1,1-DIPHENYLPENTANE	(L)	224.330	2.6	C(1336)				
C17H20	1,5-DIPHENYLPENTANE	(L)	224.330	-7.4	C(1336)				
C17H21N04	MORPHINE MONOHYDRATE	(S)	303.346	-169.7	C(744)				
C17H22N2O2	ETHYL 5-(ANILINOMETHYL)- 3-ETHYL-4-METHYL- PYRROLE-2-CARBOXYLATE (S)	(S)	286.362	-85.8	C(1414)				

CXXIV

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298} (cal/mole K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C17H24N2	4-ETHYL-2-(4-ETHYL-3,5-DIMETHYL- 2-PYRROLYLMETHYLENE)-3,5-DIMETHYL- ISOPYRROLE (S)	(S)	256.378	-1.9	C(1414)				
C17H24N2	RIS(4-ETHYL-3,5-DIMETHYL- 2-PYRROLYL)KETONE (S)	(S)	272.378	-55.4	C(1413)				
C17H25N06	TRIETHYL 4-(2,2- DICARBOXYETHYL)-3,5-DIMETHYL- PYRROLE-2-CARBOXYLATE (S)	(S)	339.378	-330.1	C(1414)				
C17H28	1-PHENYLBUNDFANE	(G)	232.394	-37.78	T(432)	170.32	T(432)	48.62	-35.634
C17H28O3S	P-UNDECYLBENZENE SULFONIC ACID (G)	(G)	312.460			186.57	E(69)		
C17H300	CYCLOHEPTADECANE	(S)	250.410	-106.6	C(1272)				
C17H32	1,3-DICYCLOHEXYL- 2-ETHYLPROPANE (L)	(L)	236.426	-89.2	C(206)				
C17H32	1,1-DICYCLOHEXYLPENTANE	(L)	236.426	-89.2	C(1336)				
C17H32	1,5-DICYCLOHEXYLPENTANE	(L)	236.426	-89.2	C(1336)				
C17H32	1-HEPTADECYNE	(G)	236.426	-24.64	T(334)	190.53	T(334)	74.34	-54.490
C17H320	CYCLOHEPTADECANONE	(S)	252.426	-118.9	C(1272)				
C17H3204	TETRADECYLMALONIC ACID	(S)	300.426	-307.9	B(1535)				
C17H34	CYCLOHEPTADECANE	(S)	238.442	-103.13	A(271)				
C17H34	1-CYCLOPENTYLDODECANE	(G)	238.442	-80.28	T(363)	183.51	T(363)	30.10	-22.062
C17H34	1-CYCLOHEXYLUNDECANE	(G)	238.442	-85.43	T(390)	174.74	T(390)	27.56	-20.204
C17H34	1-HEPTADECENE	(G)	238.442	-64.15	T(300)	194.33	T(300)	43.00	-31.521
C17H3402	HEPTADECANOIC ACID	(S)	270.442	-221.17	A(3)				
C17H3402	HEPTADECANOIC ACID	(L)	270.442	-207.12	A(3)				
C17H3402	METHYL PALMITATE	(S)	270.442			118.33	M(1622)		
C17H36	HEPTADECANE	(L)	240.458	-114.69	E(1203)	155.83	E(1248)	13.25	-9.710
C17H36	HEPTADECANE	(G)	240.458	-94.15	T(257)	195.33	T(257)	22.01	-16.133
C17H36N2O	1,3-DIOCTYL UREA	(S)	284.474	-170.0	B(218)				
C17H36O	1-HEPTADECANOL	(G)	256.458	-130.47	T(537)	207.61	T(537)	-10.67	7.818
C17H36S	BUTYL TRIDECYL SULFIDE	(G)	272.524	-84.32	T(854)	210.99	T(854)	29.45	-21.584
C17H36S	ETHYL PENTADECYL SULFIDE	(G)	272.524	-84.11	T(855)	210.67	T(855)	29.75	-21.808
C17H36S	1-HEPTADECANETHIOL	(G)	272.524	-85.02	T(911)	210.98	T(911)	28.75	-21.073
C17H36S	HEXADECYL METHYL SULFIDE	(G)	272.524	-83.53	T(856)	210.13	T(856)	30.49	-22.351
C17H36S	PROPYL TETRADECYL SULFIDE	(G)	272.524	-84.14	T(857)	210.99	T(857)	29.63	-21.716
C17H38N2O2	BCTYLAMMONIUM BCTYL CARBAMATE (S)	(S)	302.490	-243.0	B(218)				

CXXV

CXVI

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f° (kcal/mole)	Log K_p
C18H1002	BENZANTHRAQUINONE	(S)	258.260	-55.6	C(913)				
C18H1002	TETRACENEQUINONE	(S)	258.260	-34.3	C(913)				
C18H12	1,2-BENZANTHRACENE	(S)	228.276	40.9	B(914)				
C18H12	3,4-BENZOPHENANTHRACENE	(S)	228.276	44.3	B(914)				
C18H12	CHRYSENE	(S)	228.276	34.8	B(914)				
C18H12	NAPHTHACENE	(S)	228.276	38.0	B(914)	51.48	M(1624)	85.79	-62.882
C18H12	TRIPHENYLENE	(S)	228.276	37.69	A(1600)	60.87	M(1600)	78.68	-57.670
C18H14N2O2S	BENZONAPHTHQUINONETHIAZINE(S)	(S)	322.374	-200.7	C(744)				
C18H14N2O3	DI-P-TOLUYLFURAZAN	(S)	306.308	8.3	C(1012)				
C18H14O3	CINNAMIC ANHYDRIDE	(S)	278.292	-83.2	B(163)				
C18H15N	TRIPHENYLAMINE	(S)	245.308	58.7	C(1105)	73.0	C(1105)	120.85	-88.584
C18H16	DIPHENYLHEXATRIENE	(S)	232.308	50.5	C(744)				
C18H1602	ISOPROPYL-X-METHYL- PHENANTHRENEQUINONE	(U,S)	264.308	-85.1	C(744)				
C18H1604	DIMETHYL DIPHENYLMALATE	(S)	296.308	-125.8	C(744)				
C18H1604	ALPHA-TRUXILLIC ACID	(U,S)	296.308	-155.7	C(744)				
C18H18	5,12-DIHYDROTETRACENE	(S)	230.292	24.5	B(914)				
C18H1803	CINNAMOYL PEROXIDE	(S)	278.292	-85.2	B(163)				
C18H18	CYCLOOCTADECANONAENE	(S)	234.324	39.0	A(98)				
C18H18	1,6-DIPHENYL-1,5-HEXADIENE	(S)	234.324	39.0	C(744)				
C18H18	1,6-DIPHENYL-2,4-HEXADIENE	(S)	234.324	35.6	C(744)				
C18H18	7-ISOPROPYL-1-METHYL- PHENANTHRENE (S)	(S)	234.324	1.3	C(744)				
C18H18	2,4,5,7-TETRAMETHYL- PHENANTHRENE (S)	(S)	234.324	2.98	A(720)				
C18H18	2,4,5,6-TETRAMETHYL- PHENANTHRENE (S)	(S)	234.324	5.56	A(720)				
C18H1802	CINNAMOIN	(L)	266.324	-30.9	C(1332)				
C18H18012	HEXAMETHYL MELLITATE	(S)	426.324	-482.3	C(744)				
C18H20	3,6-DIPHENYL-3-HEXENE	(L)	236.340	1.3	C(744)				
C18H20N2O	N-P-PIPERIDYL-N',N'- DIPHENYLFORMAMIDE (S)	(S)	280.356	-22.5	B(1472)				
C18H20N2O3	PHENYLALANINE ANHYDRIDE	(S)	312.356	-137.1	B(1178)				
C18H2072	HYDROCINNAMOIN	(L)	268.340	-44.7	C(1332)				
C18H22	2-BRANZY - -PHENYLPENTANE	(L)	238.356	16.3	C(206)				

CXVII

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f° (kcal/mole)	Source	S_{298}° (cal/mole °K)	Source	ΔG_f° (kcal/mole)	Log K_p
C18H22	1,1-DIPHENYLHEXANE	(L)	238.356	1.3	C(1336)				
C18H22	1,6-DIPHENYLHEXANE	(L)	238.356	1.3	C(1336)				
C18H23N04	CODEINE MONOHYDRATE	(S)	317.372	-150.7	C(744)				
C18H2604	DIPENTYL PHTHALATE	(L)	306.388	-219.0	B(12)				
C18H2606	1,2,3-PROPANETRIYL TRICYCLOPENTANECARBOXYLATE (L)	(L)	338.388	-272.3	C(744)				
C18H30	HEXAETHYLBENZENE	(G)	246.420	-53.60	T(434)	166.62	T(434)	43.61	-31.965
C18H30	1-PHENYLDODECANE	(G)	246.420	-42.71	T(433)	179.63	T(433)	50.62	-37.104
C18H30035	P-DODECYLBENZENESULFONIC ACID(G)	(G)	326.486			195.74	E(69)		
C18H3202	LINOLEIC ACID	(L)	280.436	-161.1	B(728)				
C18H3202	9-OCTADECENOIC ACID	(S)	280.436	-155.1	C(744)				
C18H32016	RAFFINOSE (MELITOSE)	(S)	504.436	-759.3	C(744)				
C18H34	1-CYCLOHEXYL-2- (CYCLOHEXYLMETHYL)PENTANE (L)	(L)	250.452	-85.5	C(206)				
C18H34	1,1-DICYCLOHEXYLHEXANE	(L)	250.452	-90.5	C(1336)				
C18H34	1,6-DICYCLOHEXYLHEXANE	(L)	250.452	-90.5	C(1336)				
C18H34	1-OCTADECYNE	(G)	250.452	-29.56	T(335)	199.84	T(335)	76.36	-55.968
C18H3402	ELAIDIC ACID	(S)	282.452	-187.8	C(744)				
C18H3402	OLEIC ACID	(L)	282.452	-191.8	C(1439)				
C18H34017	MELIZITOS MONOHYDRATE	(S)	522.452	-812.3	C(744)				
C18H36	1-CYCLOHEXYLDODECANE	(L)	252.468	-113.0	A(1025)	147.1	M(1113)	17.95	-13.154
C18H36	1-CYCLOHEXYLDODECANE	(G)	252.468	-90.36	T(391)	184.05	T(391)	29.57	-21.674
C18H36	1-CYCLOPENTYLTRIDECANE	(G)	252.468	-84.55	T(364)	192.89	T(364)	32.74	-24.001
C18H36	1-OCTADECENE	(G)	252.468	-69.08	T(301)	203.64	T(301)	45.01	-32.991
C18H3602	TERT-BUTYL TETRADECANOATE	(L)	284.468	-206.5	A(1454)				
C18H3602	HEXADECYL ACETATE	(S)	284.468	-192.2	C(744)				
C18H3602	STEARIC ACID	(S)	284.468	-226.80	A(3)				
C18H3602	STEARIC ACID	(S)	284.468	-226.4	A(853)				
C18H3602	STEARIC ACID	(S)	284.468	-229.0	A(1454)				
C18H3602	STEARIC ACID	(L)	284.468	-211.74	A(3)				
C18H3602	STEARIC ACID	(L)	284.468	-213.1	A(853)				
C18H3603	TERT-BUTYL PEROXYMYRISTATE	(L)	300.468	-190.4	A(1454)				
C18H3603	PEROXYSTEARIC ACID	(S)	300.468	-205.1	A(1454)				
C18H38	OCTADECANE	(S)	254.484	-135.92	A(1113)	118.7	M(1113)	12.80	-9.382
C18H38	OCTADECANE	(L)	254.484	-121.54	A(1113)	166.5	M(1113)	12.93	-9.476
C18H38	OCTADECANE	(G)	254.484	-99.08	T(258)	204.64	T(258)	24.02	-17.604

LXXX

Formula	Name	State	MolWt	ΔH_f (kcal/mole)	Source	γ_{298} (cal/mole K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log K_p
C18H38O	1-OCTADECANOL	(G)	270.484	-135.49	T(538)	216.92	T(538)	-8.65	6.340
C18H38S	RUPLYI TETRADECYL SULFIDE	(G)	286.550	-89.25	T(858)	220.30	T(858)	31.45	-23.054
C18H38S	ETHYL HEXADECYL SULFIDE	(G)	286.550	-89.03	T(859)	219.98	T(859)	31.77	-23.285
C18H38S	HEPTADECYL METHYL SULFIDE	(G)	286.550	-88.45	T(860)	219.44	T(860)	32.51	-23.828
C18H38S	NONYL SULFIDE	(G)	286.550	-89.25	T(861)	218.92	T(861)	31.86	-23.356
C18H38S	PENTADECYL PROPYL SULFIDE	(G)	286.550	-89.07	T(862)	220.30	T(862)	31.63	-23.186
C18H38S	1-OCTADECANETHIOL	(G)	286.550	-89.94	T(912)	220.29	T(912)	30.77	-22.551
C18H38S2	NONYL DISULFIDE	(G)	316.616	-87.10	T(880)	230.00	T(880)	32.97	-24.163
C19H42O2	CAFFEINOSE PENTAHYDRATE	(S)	594.516	-1108.7	C(744)				
C19H13N3O6	TRINITROTROPHENYLMETHANE (L,S)	(S)	379.418	40.5	C(744)				
C19H13N3O7	TRINITROTROPHENYLCAHRINDOL (U,S)	(S)	395.318	-14.4	C(744)				
C19H15	TRITYL	(S)	243.310	79.9	C(744)				
C19H15CL	CHLOROTRIPHENYLMETHANE	(S)	278.767	43.4	C(744)				
C19H16	TRIPHENYLMETHANE	(S)	244.318	38.7	A(1121)	74.6	M(656)	98.61	-72.281
C19H16	TRIPHENYLMETHANE	(S)	244.318	39.7	A(269)	74.6	M(656)	99.61	-73.014
C19H16N4	ALPHA-(PHENYLAZO)-ALPHA-								
C19H16N4	(PHENYLHYDRAZONO)TOLUENE	(S)	300.350	129.5	H(974)				
C19H16O	TRIPHENYLMETHANOL	(S)	260.318	-0.80	A(1112)	78.7	M(1388)	65.20	-47.787
C19H17N	N-PHENYLDIPHENYLAMINE	(S)	259.334	47.9	B(1472)				
C19H18O4	1,2-CYCLOPENTYLENE								
C19H18O4	LIPENZOATE, CIS (S)	(S)	310.334	-159.5	H(1537)				
C19H18O4	1,2-CYCLOPENTYLENE								
C19H18O4	DIPHENZOATE, TRANS (S)	(S)	310.334	-161.3	H(1537)				
C19H19N3O	TRIAMINOTRIPHENYLCAHRINDOL (L,S)	(S)	365.366	47.9	C(744)				
C19H21N3O3	THERIANE	(S)	311.366	-62.7	C(744)				
C19H24N2O4	DIFETHYL 2-(4-CARBOXY-3,5-								
C19H24N2O4	DIMETHYL-2-PYRROLYLMETHYLENE)-								
C19H24N2O4	2,5-DIMETHYLISOPYRROLE-4-								
C19H24N2O4	CARBOXYLATE (S)	(S)	344.396	-191.1	C(1413)				
C19H26N2O4	DIFETHYL METHYLENE-BIS(2,4-								
C19H26N2O4	DIMETHYLPYRROLE-								
C19H26N2O4	3-CARBOXYLATE)	(S)	346.414	-201.8	C(1413)				
C19H26N2O4	DIFETHYL METHYLENE-BIS(2,5-DI-								
C19H26N2O4	METHYLPYRROLE-4-CARBOXYLATE)(S)	(S)	346.414	-203.2	C(1414)				

LXXXIX

Formula	Name	State	MolWt	ΔH_f (kcal/mole)	Source	γ_{298} (cal/mole K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log K_p
C19H26N2O4	METHYLPYRROLE-5-CARBOXYLATE)(S)	(S)	346.414	-159.7	C(1414)				
C19H32O3S	P-TRIOECYL-								
C19H32O3S	BENZENSULFONIC ACID (G)	(G)	340.512			204.91	E(69)		
C19H32	1-PHENYLTRIDECANE	(G)	260.446	-47.67	T(435)	188.94	T(435)	52.64	-38.582
C19H36	1-NONADECYNE	(G)	264.478	-34.49	T(336)	209.15	T(336)	78.36	-57.438
C19H36O2	METHYL GLAIDATE	(S)	296.478	-174.6	B(730)				
C19H36O2	METHYL ELAIDATE	(S)	296.478	-172.9	B(730)				
C19H36O4	HEXADECYLMALONIC ACID	(S)	328.478	-307.2	C(744)				
C19H38	1-CYCLOHEXYLTETRADECANE	(G)	266.494	-95.28	T(392)	193.36	T(392)	31.59	-23.151
C19H38	1-CYCLOPENTYLTRIDECANE	(G)	266.494	-89.48	T(365)	192.13	T(365)	34.77	-25.486
C19H38	1-NONADECENE	(G)	266.494	-74.00	T(302)	212.95	T(302)	47.02	-34.468
C19H38O2	METHYL STEARATE	(S)	298.494	-208.5	C(1439)				
C19H38O2	NONADECANOIC ACID	(S)	298.494	-235.42	A(3)				
C19H38O2	NONADECANOIC ACID	(L)	298.494	-219.24	A(3)				
C19H38O4	2,3-DIHYDROXYPROPYL PALMITATE(S)	(S)	330.494	-306.2	A(229)				
C19H38O4	2-HYDROXY-1-(HYDROXYMETHYL)-								
C19H38O4	ETHYL PALMITATE (S)	(S)	330.494	-296.7	A(229)				
C19H40	NONADECANE	(L)	268.510	-126.9	F(1248)	171.35	E(1248)	15.83	-11.605
C19H40	NONADECANE	(G)	268.510	-104.00	T(259)	213.95	T(259)	26.03	-19.081
C19H40O	1-NONADECANOL	(G)	284.510	-140.32	T(539)	226.23	T(539)	-6.64	4.870
C19H40S	RUPLYI PENTADECYL SULFIDE	(G)	300.576	-94.18	T(863)	229.61	T(863)	33.46	-24.524
C19H40S	ETHYL HEPTADECYL SULFIDE	(G)	300.576	-93.96	T(864)	229.29	T(864)	33.77	-24.755
C19H40S	HEXADECYL PROPYL SULFIDE	(G)	300.576	-93.99	T(865)	229.61	T(865)	33.65	-24.663
C19H40S	METHYL OCTADECYL SULFIDE	(G)	300.576	-93.38	T(866)	228.75	T(866)	34.51	-25.298
C19H40S	1-NONADECANETHIOL	(G)	300.576	-94.87	T(913)	229.60	T(913)	32.77	-24.021
C20H10O2	1,12-PERYLENEDIONE	(S)	282.280	-10.44	C(843)				
C20H12	PERYLENE	(S)	252.296	43.66	A(1600)	63.23	M(1600)	88.76	-65.057
C20H14O4	M-PHENYLENE DIBENZOATE	(S)	318.312	-120.3	C(744)				
C20H16	1',9'-DIMETHYLBENZANTHRACENE (S)	(S)	256.328	32.96	A(448)				
C20H16	3',6'-DIMETHYLBENZANTHRACENE (S)	(S)	256.328	17.96	A(448)				
C20H16	1,1'-DIMETHYLBENZOC(C)-								
C20H16	PHENANTHRENE (S)	(S)	256.328	36.67	A(448)				
C20H16	5,8-DIMETHYLBENZO(C)-								
C20H16	PHENANTHRENE (S)	(S)	256.328	25.67	A(448)				
C20H16	TRIPHENYLETHYLENE	(S)	254.328	56.0	H(263)	78.7	M(1388)	115.10	-84.363

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C20H18	1,1,1-TRIPHENYLETHANE . . .	(S)	258.344	37.3	A(270)	78.7	M(1388)	105.70	-77.477
C20H18	1,1,2-TRIPHENYLETHANE . . .	(S)	258.344	30.9	A(270)				
C20H2004	1,2-CYCLOHEXYLENE								
C20H2004	DIBENZOATE, CIS (S)	(S)	324.360	-171.7	B(1537)				
C20H2004	1,2-CYCLOHEXYLENE								
C20H2004	DIBENZOATE, TRANS (S)	(S)	324.360	-175.5	B(1537)				
C20H2004	DIMETHYL BETA-TRUXILLATE . (U,S)	(U,S)	324.360	-140.5	C(744)				
C20H2004	1-METHYL-1,2-CYCLOPENTYLENE								
C20H2004	DIBENZOATE, TRANS (S)	(S)	324.360	-168.0	B(1537)				
C20H21N04	PAPAVERINE	(S)	339.376	-120.0	C(744)				
C20H2204	DIETHYL DIPHENYLSUCCINATE, MESO(S)	(S)	326.376	-181.1	C(744)				
C20H2204	DIETHYL DIPHENYLSUCCINATE								
C20H2204	RACEMIC (S)	(S)	326.376	-179.6	C(744)				
C20H24	TETRACYCLOPENTADIENE	(S)	264.392	30.0	B(90)				
C20H26	DIHYDROTETRACYCLOPENTADIENE (S)	(S)	266.408	-3.0	B(90)				
C20H27N011	AMYGDALIN	(S)	457.424	-453.4	C(744)				
C20H28N204	DIETHYL 5,5'-ETHYLIDENE-								
C20H28N204	HIS(2,4-DIMETHYL-								
C20H28N204	PYRROLE-3-CARBOXYLATE) (S)	(S)	360.440	-207.6	C(1413)				
C20H34	1-PHENYLTETRADECANE	(G)	274.472	-57.56	T(436)	198.25	T(436)	54.64	-40.052
C20H34035	P-TETRADECYL-								
C20H34035	BENZENESULFONIC ACID (G)	(G)	342.528			214.08	E(69)		
C20H38	1-EICOSYNE	(G)	278.504	-39.41	T(337)	218.46	T(337)	80.38	-58.915
C20H3802	ETHYL ELAIDATE	(L)	310.504	-183.3	B(730)				
C20H3802	ETHYL OLEATE	(L)	310.504	-183.9	B(730)				
C20H40	1-CYCLOHEXYLTETRADECANE . . .	(G)	280.520	-100.21	T(393)	202.67	T(393)	33.59	-24.621
C20H40	1-CYCLOPENTYLPENTADECANE . . .	(G)	280.520	-94.41	T(366)	211.44	T(366)	36.78	-26.956
C20H40	1-EICOSENE	(G)	280.520	-78.93	T(303)	222.26	T(303)	49.03	-35.938
C20H4002	EICOSANOIC ACID	(S)	312.520	-242.07	A(3)				
C20H4002	EICOSANOIC ACID	(L)	312.520	-224.87	A(3)				
C20H42	EICOSANE	(S)	282.536	-149.7	E(1248)	133.5	M(1107)	14.03	-10.283
C20H42	EICOSANE	(L)	282.536	-133.0	E(1248)	179.1	E(1248)	17.13	-12.559
C20H42	EICOSANE	(G)	282.536	-108.93	T(260)	223.26	T(260)	28.04	-20.551
C20H420	1-EICOSANOL	(G)	298.536	-145.25	T(540)	235.54	T(540)	-4.64	3.400
C20H42S	BUTYL HEXADECYL SULFIDE	(G)	314.602	-99.10	T(867)	238.92	T(867)	35.47	-26.002
C20H42S	DECYL SULFIDE	(G)	314.602	-99.10	T(868)	237.54	T(868)	35.89	-26.303

XXXX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C20H42S	1-EICOSANETHIOL	(G)	314.602	-99.80	T(914)	238.91	T(914)	34.78	-25.491
C20H42S	ETHYL OCTADECYL SULFIDE	(G)	314.602	-98.89	T(869)	238.60	T(869)	35.78	-26.225
C20H42S	HEPTADECYL PROPYL SULFIDE . . .	(G)	314.602	-98.92	T(870)	238.92	T(870)	35.65	-26.133
C20H42S	METHYL NONADECYL SULFIDE	(G)	314.602	-98.31	T(871)	238.06	T(871)	36.52	-26.769
C20H42S2	DECYL DISULFIDE	(G)	346.668	-96.97	T(881)	248.62	T(881)	36.99	-27.111
C21H13N05	P-NITROGENZOYLRENZOIN	(U,S)	359.322	26.3	C(744)				
C21H160	3,3-DIPHENYLACRYLOPHENONE . . .	(L)	284.338	24.3	C(744)				
C21H160	1,1,3-TRIPHENYL-2-PROPYN-1-OL(L)	(L)	284.338	51.4	C(744)				
C21H1602	BETA-DIOXYDINAPHTHYLMETHANE (U,S)	(U,S)	300.338	-45.3	C(744)				
C21H1602	BETA-NAPHTHOLFORMAL	(U,S)	300.338	-20.6	C(744)				
C21H1802	3-HYDROXY-3,3-DIPHENYL-								
C21H1802	PROPIOPHENONE (L)	(L)	302.354	-51.4	C(744)				
C21H21N	TRIBENZYLAMINE	(S)	287.386	38.8	B(1472)				
C21H22N202	STRYCHNINE	(S)	334.402	-38.5	C(744)				
C21H2204	1-METHYL-1,2-CYCLOHEXYLENE								
C21H2204	DIBENZOATE, TRANS (L)	(L)	338.386	-181.4	B(1537)				
C21H38	1-PHENYLPENTADECANE	(G)	288.498	-57.49	T(437)	207.56	T(437)	56.65	-41.522
C21H4002	PROPYL ELAIDATE	(L)	324.530	-189.1	B(730)				
C21H4002	PROPYL OLEATE	(L)	324.530	-187.6	B(730)				
C21H42	1-CYCLOHEXYLPENTADECANE	(G)	294.546	-105.14	T(394)	211.98	T(394)	35.60	-26.092
C21H42	1-CYCLOPENTYLHEXADECANE	(G)	294.546	-99.33	T(367)	220.75	T(367)	38.79	-28.434
C21H44N20	1,3-DIOECYL UREA	(S)	340.578	-209.0	B(218)				
C21H46N202	DECYLAMONIUM								
C21H46N202	DECYL CARBAMATE (S)	(S)	358.594	-282.0	B(218)				
C22H1402	PENTACENQUINONE	(S)	308.316	-17.7	C(913)				
C22H140	METHYL 1,1,3-TRIPHENYL-2-								
C22H140	PROPYNYL ETHER (L)	(L)	298.364	56.1	C(744)				
C22H23N07	NARCOTINE	(S)	413.412	-210.2	C(744)				
C22H38	1-PHENYLHEXADECANE	(G)	302.524	-62.41	T(438)	216.87	T(438)	58.66	-42.999
C22H4002	OSOSYNOIC ACID	(U,S)	336.540	-177.7	C(744)				
C22H4002	PROSSIDIC ACID	(U,S)	338.556	-224.3	B(729)				
C22H4002	BUTYL ELAIDATE	(L)	338.556	-195.0	B(730)				
C22H4002	BUTYL OLEATE	(L)	338.556	-193.4	B(730)				
C22H4202	13-OXOCENSOIC ACID, CIS	(S)	338.556	-204.2	C(744)				

XXXX

CXXIII

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log K_p
C22H44	1-CYCLOHEXYLHEXADECANE	(G)	308.572	-110.06	T(395)	221.29	T(395)	37.61	-27.569
C22H44O2	DODCOSAHOIC ACID	(S)	340.572	-254.1	C(843)				
C22H44O4	DIHYDROXYDODCOSAHOIC ACID	(U,S)	372.572	-333.7	C(744)				
C23H18N2O	N-(1-NAPHTHYL)CARBANILIDE	(S)	338.390	22.9	B(1472)				
C23H18N2O	N-(2-NAPHTHYL)CARBANILIDE	(S)	338.390	19.4	B(1471)				
C23H18O4	1,2-INDANYLENE DIBENZOATE, CIS(S)	(S)	358.374	-132.7	R(1537)				
C23H18O4	1,2-INDANYLENE DIBENZOATE, TRANS (S)	(S)	358.374	-130.7	B(1537)				
C23H20O	ETHYL 1,1,3-TRIPHENYL-2- PROPYNYL ETHER (L)	(L)	312.390	45.8	C(744)				
C23H22	TRI-O-TOLYLETHYLENE	(S)	298.406	29.6	A(265)				
C23H22	TRI-P-TOLYLETHYLENE	(S)	298.406	28.7	A(265)				
C23H24	1,1,2-TRI-O-TOLYLETHANE	(S)	300.422	5.5	A(264)				
C23H24	1,1,2-TRI-P-TOLYLETHANE	(S)	300.422	3.6	A(264)				
C23H26N2O4	PRUCINE	(S)	394.454	-115.9	C(744)				
C23H30O	2,7-DODECANEETHYLENE- 4,5-BENZOTROPON (U,S)	(U,S)	322.470	-60.4	A(1290)				
C23H31NO10	NARCEINE DIHYDRATE	(S)	481.486	-419.1	C(744)				
C23H44O2	PENTYL ELAIDATE	(L)	352.582	-201.3	R(730)				
C24H12O2	HENZO(RST)PENTAPHENE- 5,8-DIONE (S)	(S)	332.336	-60.3	C(913)				
C24H16O2	3,9-DIACETYLPERYLENE	(S)	336.368	-22.4	C(843)				
C24H18	1,3,5-TRIPHENYLHENZENE	(S)	306.384	52.3	A(1226)	87.8	M(1118)	119.61	-87.673
C24H20N2	TETRAPHENYLHYDRAZINE	(S)	336.416	109.2	A(244)				
C24H20O4	1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE- 1,2-DIBENZOATE, CIS (S)	(S)	372.400	-141.0	B(1537)				
C24H20O4	1,2,3,4-TETRAHYDRO-1,2- NAPHTHYLENEDIBENZOATE, CIS (S)	(S)	372.400	-142.5	B(1537)				
C24H20O4	1,2,3,4-TETRAHYDRO-2,3- NAPHTHYLENEDIBENZOATE, CIS (S)	(S)	372.400	-142.6	B(1537)				
C24H20O4	1,2,3,4-TETRAHYDRO-2,3- NAPHTHYLENEDIBENZOATE, TRANS (S)	(S)	372.400	-140.3	B(1537)				
C24H20O6	1,2,3-PROPANETRIYL TRIBENZOATE (S)	(S)	404.400	-219.3	C(744)				

CXXIII

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log K_p
C24H20O8	CINNAMYLDIENEMALONIC ACID (EX- POSED TO THE ACTION OF LIGHT)(S)	(S)	436.400	-301.6	C(744)				
C24H22O	PROPYL 1,1,3-TRIPHENYL-2- PROPYNYL ETHER (L)	(L)	326.416	39.6	C(744)				
C24H34	1,1-DIPHENYLDODECANE	(L)	322.512			163.70	M(716)		
C24H38O4	BIS(ETHYLHEXYL) PHTHALATE	(L)	390.544	-257.1	B(1471)				
C24H40	1-CYCLOHEXYL-1-PHENYLDODECANE(L)	(L)	328.560			166.33	M(716)		
C24H42O21	STACHYOSE	(S)	666.576	-981.6	C(744)				
C24H46	1,1-DICYCLOHEXYLDODECANE	(S)	334.608			130.42	M(716)		
C24H50	TETRACOSANE	(S)	338.640	-170.5	(CALC)	155.56	M(1113)	25.50	-18.689
C25H20	TETRAPHENYLMETHANE	(S)	320.410	57.8	A(268)	91.6	M(1388)	133.69	-97.992
C25H20N2	TRIPHENYL(PHENYLAZO)METHANE (S)	(S)	348.426	137.0	C(1610)				
C25H38N2	2,2-(DIISORUTENYLMETHYLENE)- BIS(4-ETHYL-3,5-DIMETHYL- PYRROLE) (S)	(S)	366.570	-31.9	C(1413)				
C25H52	PENTACOSANE	(S)	352.666	-186.0	C(1105)	160.4	M(1107)	18.27	-13.389
C26H18	9,10-DIPHENYLANTHRACENE	(S)	330.404	73.9	B(914)				
C26H20	DIANTHRACENE	(S)	332.420	255.4	C(744)				
C26H20	TETRAPHENYLETHYLENE	(S)	332.420	76.1	A(263)				
C26H20N2O	ALPHA-(TRIPHENYLMETHYLAZO)- BENZALDEHYDE (S)	(S)	376.436	110.0	C(1610)				
C26H20O	BETA-BENZOPINACOLONE	(S)	348.420	52.0	C(1610)				
C26H20O2	3,9-DIPROPIONYLPERYLENE	(S)	364.420	-47.3	C(843)				
C26H22	1,1,1,2-TETRAPHENYLETHANE	(S)	334.436	54.1	A(270)	96.9	M(1388)	138.12	-101.240
C26H22	1,1,2,2-TETRAPHENYLETHANE	(S)	334.436	52.4	A(270)	99.6	M(1388)	135.62	-99.404
C26H22N4O2	1,2-BIS(DIPHENYLCARBAMOYL)- HYDRAZINE (S)	(S)	422.468	18.5	B(1472)				
C26H46	3-PHENYLEICOSANE	(S)	358.628	-131.6	A(768)				
C26H46	9-PHENYLEICOSANE	(L)	358.628	-114.1	A(768)				
C26H52	1-CYCLOHEXYLEICOSANE	(L)	364.676	-159.6	A(768)				
C26H52	9-CYCLOHEXYLEICOSANE	(L)	364.676	-161.5	A(768)				
C26H52	11-CYCLOPENTYLBENEICOSANE	(L)	364.676	-155.5	A(768)				
C26H54	5-BUTYLDODOCOSANE	(L)	366.692	-171.0	A(768)				
C26H54	11-BUTYLDODOCOSANE	(L)	366.692	-171.5	A(768)				

CXXXIX

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C27H48	11-PHENYLENEICOSANE	(L)	372.654	-120.8	A(1113)	207.4	M(1113)	51.65	-37.861
C27H54	11-CYCLOHEXYLHENEICOSANE	(L)	378.702	-165.1	A(1113)	211.3	M(1113)	34.11	-25.000
C28H18	9,9'-BIANTHRYL	(S)	354.424	78.1	B(914)				
C28H18	9,9'-BIPHENANTHRYL	(S)	354.424	51.0	B(914)				
C28H20	DELTA-9,9'-(10H,10'H)-BIANTHRACENE (S)	(S)	356.440	73.2	A(102)				
C28H22	1,1,4,4-TETRAPHENYL-1,3-BUTADIENE (S)	(S)	358.456	78.5	A(265)				
C28H22	1,2,3,4-TETRAPHENYLBUTADIENE, TRANS, TRANS (S)	(S)	358.456	85.4	A(265)				
C28H2203	DIPHENYLACETIC ANHYDRIDE	(U,S)	406.456	-76.2	C(744)				
C28H2402	3,9-DIBUTYRILPERYLENE	(S)	392.472	-55.9	C(843)				
C28H26	1,1,4,4-TETRAPHENYLBUTANE (S)	(S)	362.488	38.65	A(264)				
C28H26N402	N,N'-BIS(DIPHENYL-CARBAMOYL)-ETHYLENEDIAMINE	(S)	450.520	-41.1	B(1472)				
C28H38019	CELLOBIOSE OCTAACETATE	(S)	678.584	-896.9	C(744)				
C28H38019	LACTOSE OCTAACETATE	(S)	678.584	-900.2	C(744)				
C28H38019	MALTOSE OCTAACETATE	(S)	678.584	-898.9	C(744)				
C28H38019	SUCROSE OCTAACETATE	(S)	678.584	-896.2	C(744)				
C28H440	ERGOSTEROL	(S)	396.632	-189.9	C(130)				
C30H28	TETRA-P-TOLYLETHYLENE	(S)	388.524	40.6	A(264)				
C30H30	1,1,2,2-TETRA-P-TOLYLETHANE (S)	(S)	390.540	17.21	A(264)				
C30H5602	1,6-CYCLOTRIACONTANEDIONE (S)	(S)	448.748	-232.7	C(1272)				
C30H60	CYCLOTRIACONTANE	(S)	420.780	-212.2	C(1272)				
C31H56	13-PHENYLPENTACOSANE	(S)	428.758	-164.7	A(1121)				
C31H62	13-CYCLOHEXYLPENTACOSANE	(L)	434.806	-189.9	A(1121)				
C31H64	11-DECYLHENEICOSANE	(L)	436.822	-201.7	A(1121)	259.6	M(429)	31.26	-22.911
C32H3003	DIBENZYLACETIC ANHYDRIDE (GLASSY)	(U,S)	462.560	-102.2	C(744)				
C32H36N402	METHYLPYROPORPHYRINATE (XV) (S)	(S)	508.640	-83.4	C(1415)				
C32H38N4	ETIOPORPHYRIN	(S)	478.656	9.8	C(1415)				

CXXXV

Formula	Name	State	Mol Wt	ΔH_f^{298} (kcal/mole)	Source	S_{298}^0 (cal/mole °K)	Source	ΔG_f^{298} (kcal/mole)	Log Kp
C32H6402	HEXADECYL PALMITATE	(S)	480.832	-318.6	C(744)				
C32H66	DOTRIACONTANE	(S)	450.848	-231.8	A(1121)	203.5	M(1113)	27.59	-20.227
C32H66	DOTRIACONTANE	(L)	450.848	-205.4	A(1113)	280.0	M(1113)	31.19	-22.859
C33H38N402	MONOMETHYL-GAMMA-PHYLLOPORPHYRINATE (S)	(S)	522.666	-81.8	C(1415)				
C33H42N402	5-(4-ACETYL-3,5-DIMETHYL-2-PYRRYLMETHYL)-2-[5-(4-ACETYL-3,5-DIMETHYL-2-PYRRYLMETHYL)-4-ETHYL-3-METHYL-2-PYRRYLMETHYLENE]-4-ETHYL-3-METHYLISOPYRROLE (S)	(S)	526.698	-61.8	C(1414)				
C33H68	TRITRIACONTANE	(S)	464.874			209.8	M(1107)		
C34H34N404	PROTOPORPHYRIN	(S)	562.644	-115.3	C(1415)				
C34H36N403	MONOMETHYLPHYLLERYTHRINATE (S)	(S)	548.660	-77.9	C(1415)				
C34H36N403	MONOMETHYLPYROPHEOPORPHORIDE (S)	(S)	548.660	-79.5	C(1415)				
C34H36N404	DIMETHYLVERDOPORPHYRINATE	(S)	564.660	-138.5	C(1415)				
C34H36N405	MONOMETHYL-18-PHEOPURPURINATE (S)	(S)	580.660	-225.0	C(1415)				
C34H38N402	MONOMETHYL-DESOXY-PHYLLOERYTHRINATE (S)	(S)	534.676	-33.3	C(1415)				
C34H38N404	DIMETHYL RHODOPORPHYRINATE-XV (S)	(S)	566.676	-116.7	C(1415)				
C34H38N404	DIMETHYL RHODOPORPHYRINATE-(XXI) (S)	(S)	566.676	-118.4	C(1415)				
C35H38N405	DIMETHYLCHLOROPORPHYRIN-E5-ATE SAMPLE (A) (S)	(S)	594.686	-172.5	C(1415)				
C35H38N405	DIMETHYLCHLOROPORPHYRIN-E5-ATE SAMPLE (B) (S)	(S)	594.686	-197.6	C(1415)				
C35H40N404	DIMETHYLCHLOROPORPHYRIN-E4-ATE (S)	(S)	580.702	-148.5	C(1415)				
C35H40N404	DIMETHYLCHLORIN-E4-ATE	(S)	580.702	-139.2	C(1415)				
C36H2402	3,9-DI-2-TOLUOYLPERYLENE	(S)	488.552	9.1	C(843)				
C36H38N404	DIMETHYLPROTOPORPHYRINATE	(S)	590.696	-116.9	C(1415)				

CXXXVI

Formula	Name	State	Mol Wt	$\Delta H_f^{\circ}_{298}$ (kcal/mole)	Source	S°_{298} (cal/mole °K)	Source	$\Delta G_f^{\circ}_{298}$ (kcal/mole)	Log Kp
C36H38N4O5	DIMETHYLPHEOPORPHYRIN-A5-ATE	(S)	606.696	-158.7	C(1415)				
C36H38N4O5	METHYLPHEOPORPHORBID SAMPLE (A)	(S)	606.696	-153.8	C(1415)				
C36H38N4O5	METHYLPHEOPORPHORBID SAMPLE (B)	(S)	606.696	-147.2	C(1415)				
C36H40N4O6	TRIMETHYLCHLORIN-P6-ATE	(S)	624.712	-286.4	C(1415)				
C36H42N4O4	DIMETHYLMESOPORPHYRINATE(IX)	(S)	594.728	-190.3	C(1415)				
C36H46N4	OCTAETHYLPORPHYRIN	(S)	534.760	-33.5	C(1415)				
C37H40N4O7	DIMETHYLPHEOPURPURIN-7	(S)	652.722	-239.2	C(1415)				
C37H42N4O6	TRIMETHYLCHLORIN-E6-ATE	(S)	638.738	-215.4	C(1415)				
C37H42N4O6	TRIMETHYLCHLOROPORPHYRIN-E6-ATE	(S)	638.738	-224.3	C(1415)				
C39H74O6	1,2,3-PROPANETRIYL TRILAURATE	(S)	638.982	-484.6	C(744)				
C40H46N4O8	TETRAMETHYLPORPHYRINATE	(S)	710.800	-341.8	C(1415)				
C42H28	TETRAPHENYLNAPHTHACENE	(S)	532.644	134.4	C(378)				
C45H86O6	1,2,3-PROPANETRIYL TRIMYRISTATE	(L)	723.138	-514.0	C(744)	297.8	M(216)	-140.56	103.027
C47H88O5	1,2,3-PROPANETRIYL DIBRASSIDATE	(S)	733.174	-467.3	C(744)				
C47H88O5	1,2,3-PROPANETRIYL DIERUCATE	(S)	733.174	-441.3	C(744)				
C48H38O12	MANNITOL HEXABENZOATE	(S)	806.784	-449.6	C(744)				
C48H54N4O16	OCTAMETHYL-ISO-UROPORPHYRIN (II)	(S)	942.944	-612.7	C(1415)				
C51H98O6	1,2,3-PROPANETRYL TRIPALMITATE	(S)	807.294			331.6	M(216)		
C57H110O6	1,2,3-PROPANETRYL TRISTEARATE	(S)	891.450			366.8	M(216)		
C69H128O6	1,2,3-PROPANETRIYL TRIBRASSIDATE	(S)	1053.714	-624.2	C(744)				
C69H128O6	1,2,3-PROPANETRIYL TRIERUCATE	(S)	1053.714	-595.3	C(744)				

