

**Эмпирические правила расчета теплоемкости
C_p и энтальпии ΔH для малоизученных соединений**

ТЕПЛОЕМКОСТЬ

1) Правило Неймана-Коппа

$$C_p(A_n B_m C_k \dots) = n \cdot C_p(A) + m \cdot C_p(B) + k \cdot C_p(C) + \dots,$$

где - C_p(A), C_p(B) и т.д. – атомные составляющие теплоемкости.

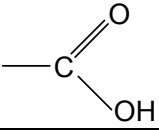
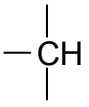
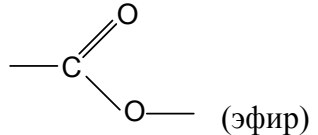

Элемент	C	H	B	Si	O	F	S	P
C _p , Дж/(моль·К)	7.53	9.62	11.30	15.90	16.74	20.92	22.59	23.01

Для остальных элементов 25,94 Дж/(моль К)

2) На основании атомно-групповых составляющих теплоемкостей при 20 °С

$$C_p(\text{вещество}) = \sum n \cdot C_p(\text{Атом/группа}),$$

где n – число групп в молекуле, имеющих данное значение C_p

Атом/группа	C _p , Дж/(моль·К)	Атом/группа	C _p , Дж/(моль·К)
-CH ₃	41.32	-OH	46.02
-CH ₂ -	26.44	-NH ₂	63.6
	79.91		22.68
 (эфир)	60,75	-Cl	35.98
 (кетон)	61,5	-NO ₂	64.02
-CN	58.16	-O-	35.02
C ₆ H ₅ -	127.61	-S-	44.35

ЭНТАЛЬПИЯ

Средние значения энергии (энтальпии) диссоциации связей при 25 град. С

Связь	Значение, кДж/моль	Связь	Значение, кДж/моль	Связь	Значение, кДж/моль
C-C	344	C-N	292	N-H	391
C=C	615	C-S	259	O-O	143
C≡C	812	C=O	725	O-H	463
C-H	415	C-O	350	S-H	339
H ₂	436.0	N ₂	945.4	O ₂	498.3
C(графит)	716,7				