

Ca H₂ T

4035 -

IV



Friedländer E., Kallman H.,
Lasareff W., Rosen B.

Z. Physik 1932, 76, 60-9
"The dissociation of ...

J, M

9082 - IV

A.P. ($C_2H_2^+$)

BP - 3264 - III

1935

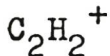
Tate J.T., Smith P.T., Vaughan A.L.

Phys.Rev. 1935, 48, 525-31

"A mass-spectrum-analysis of
the products of ionization by
electron impact in nitrogen,
acetylene, nitric oxide, cyanogen
and carbon monoxide".



C.A., 1935, 7174



514-IV

1953

Long F.A., Friedman L.

J. Amer. Chem. Soc. 1953, 75, N 12,
2837-2840 (ann.)

Mass spectra and appearance potentials of ketene monomer and dimer;
relation to structure of dimer

PX., 1955, 51235

10, 11

4036

-10

1955

A.P. (C₂H₂⁺, C₂H⁺, C₂⁺)

C₂H₂

Coats F.H., Anderson R.C.

J. Amer. Chem. Soc. 1955, II, N 4,
895-896

Electron impact data on ...

M. J

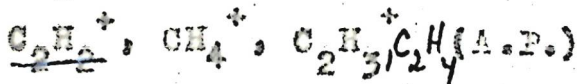
$(C_2H_2)^+_{\frac{1}{2}}$
состояние

Callomon J.H. Can. J. Phys. 34, 1046 (1956)

состояние невысвещенная квазистационарная

7208 - IV - BP

1959



Barker R., Hamill W.H., Williams R.
R.Jr.

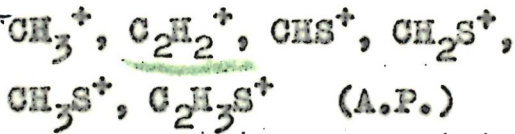
J. Phys. Chem., 1959, 63, N 6,
825-828

Ионно-молекулярные процессы...

M, J

9672 - IV

1962



Hobrock B.G., Kiser R.W.
J.Phys.Chem., 1962, 66(8), 1551-2

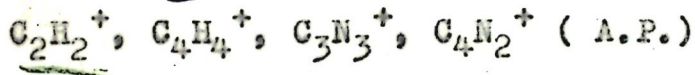
Electron ...

J.M

Not a M.

7942 - IV - BP

1963



Henglein A., Jacobs G., Muccini G.A.

Z.Naturforsch, 1963, 18a, 98-99

The reactions of normal...

J

SK⁺

Lindholm E, Szabo I,
P. Wilhelms.

1964

11-08-64
9430-11

Arkiv för Fysik 1964, 25,
417-420.

Рисование шероховатости
пока шероховатости, обра-
зующиеся в процессе
вращения с помощью
с помощью шероховатости
поверхности. Поверхность шероховатая

реакции уже известны.

Было сделано много
потребных работ;
Н.Чев и 15.5 ел. Работы масс-
спектрометрические. Дискути-
рование спектровых кон-
туров уже известно.

1965

И-341 - IV
С. 211

С. 211, 212, 213, 214, 215, 216, 217, 218, 219, 220, 221, 222, 223, 224, 225, 226, 227, 228, 229, 230, 231, 232, 233, 234, 235, 236, 237, 238, 239, 240, 241, 242, 243, 244, 245, 246, 247, 248, 249, 250, 251, 252, 253, 254, 255, 256, 257, 258, 259, 260, 261, 262, 263, 264, 265, 266, 267, 268, 269, 270, 271, 272, 273, 274, 275, 276, 277, 278, 279, 280, 281, 282, 283, 284, 285, 286, 287, 288, 289, 290, 291, 292, 293, 294, 295, 296, 297, 298, 299, 300, 301, 302, 303, 304, 305, 306, 307, 308, 309, 310, 311, 312, 313, 314, 315, 316, 317, 318, 319, 320, 321, 322, 323, 324, 325, 326, 327, 328, 329, 330, 331, 332, 333, 334, 335, 336, 337, 338, 339, 340, 341, 342, 343, 344, 345, 346, 347, 348, 349, 350, 351, 352, 353, 354, 355, 356, 357, 358, 359, 360, 361, 362, 363, 364, 365, 366, 367, 368, 369, 370, 371, 372, 373, 374, 375, 376, 377, 378, 379, 380, 381, 382, 383, 384, 385, 386, 387, 388, 389, 390, 391, 392, 393, 394, 395, 396, 397, 398, 399, 400, 401, 402, 403, 404, 405, 406, 407, 408, 409, 410, 411, 412, 413, 414, 415, 416, 417, 418, 419, 420, 421, 422, 423, 424, 425, 426, 427, 428, 429, 430, 431, 432, 433, 434, 435, 436, 437, 438, 439, 440, 441, 442, 443, 444, 445, 446, 447, 448, 449, 450, 451, 452, 453, 454, 455, 456, 457, 458, 459, 460, 461, 462, 463, 464, 465, 466, 467, 468, 469, 470, 471, 472, 473, 474, 475, 476, 477, 478, 479, 480, 481, 482, 483, 484, 485, 486, 487, 488, 489, 490, 491, 492, 493, 494, 495, 496, 497, 498, 499, 500, 501, 502, 503, 504, 505, 506, 507, 508, 509, 510, 511, 512, 513, 514, 515, 516, 517, 518, 519, 520, 521, 522, 523, 524, 525, 526, 527, 528, 529, 530, 531, 532, 533, 534, 535, 536, 537, 538, 539, 540, 541, 542, 543, 544, 545, 546, 547, 548, 549, 550, 551, 552, 553, 554, 555, 556, 557, 558, 559, 560, 561, 562, 563, 564, 565, 566, 567, 568, 569, 570, 571, 572, 573, 574, 575, 576, 577, 578, 579, 580, 581, 582, 583, 584, 585, 586, 587, 588, 589, 590, 591, 592, 593, 594, 595, 596, 597, 598, 599, 600, 601, 602, 603, 604, 605, 606, 607, 608, 609, 610, 611, 612, 613, 614, 615, 616, 617, 618, 619, 620, 621, 622, 623, 624, 625, 626, 627, 628, 629, 630, 631, 632, 633, 634, 635, 636, 637, 638, 639, 640, 641, 642, 643, 644, 645, 646, 647, 648, 649, 650, 651, 652, 653, 654, 655, 656, 657, 658, 659, 660, 661, 662, 663, 664, 665, 666, 667, 668, 669, 670, 671, 672, 673, 674, 675, 676, 677, 678, 679, 680, 681, 682, 683, 684, 685, 686, 687, 688, 689, 690, 691, 692, 693, 694, 695, 696, 697, 698, 699, 700, 701, 702, 703, 704, 705, 706, 707, 708, 709, 710, 711, 712, 713, 714, 715, 716, 717, 718, 719, 720, 721, 722, 723, 724, 725, 726, 727, 728, 729, 730, 731, 732, 733, 734, 735, 736, 737, 738, 739, 740, 741, 742, 743, 744, 745, 746, 747, 748, 749, 750, 751, 752, 753, 754, 755, 756, 757, 758, 759, 760, 761, 762, 763, 764, 765, 766, 767, 768, 769, 770, 771, 772, 773, 774, 775, 776, 777, 778, 779, 780, 781, 782, 783, 784, 785, 786, 787, 788, 789, 790, 791, 792, 793, 794, 795, 796, 797, 798, 799, 800, 801, 802, 803, 804, 805, 806, 807, 808, 809, 810, 811, 812, 813, 814, 815, 816, 817, 818, 819, 820, 821, 822, 823, 824, 825, 826, 827, 828, 829, 830, 831, 832, 833, 834, 835, 836, 837, 838, 839, 840, 841, 842, 843, 844, 845, 846, 847, 848, 849, 850, 851, 852, 853, 854, 855, 856, 857, 858, 859, 860, 861, 862, 863, 864, 865, 866, 867, 868, 869, 870, 871, 872, 873, 874, 875, 876, 877, 878, 879, 880, 881, 882, 883, 884, 885, 886, 887, 888, 889, 890, 891, 892, 893, 894, 895, 896, 897, 898, 899, 900, 901, 902, 903, 904, 905, 906, 907, 908, 909, 910, 911, 912, 913, 914, 915, 916, 917, 918, 919, 920, 921, 922, 923, 924, 925, 926, 927, 928, 929, 930, 931, 932, 933, 934, 935, 936, 937, 938, 939, 940, 941, 942, 943, 944, 945, 946, 947, 948, 949, 950, 951, 952, 953, 954, 955, 956, 957, 958, 959, 960, 961, 962, 963, 964, 965, 966, 967, 968, 969, 970, 971, 972, 973, 974, 975, 976, 977, 978, 979, 980, 981, 982, 983, 984, 985, 986, 987, 988, 989, 990, 991, 992, 993, 994, 995, 996, 997, 998, 999, 1000

Кураторов В. В.
Дел. 11 0000, 1000, 1001, 1002, 1003, 1004, 1005-1009

Масс-спектрометрическое исследование...

ИИ, 1965, 22 61



С. 211	2
Есть оригинал.	

$C_2H_2^+$

Brehm B.

1966

Z. Naturforsch., 21a, N3,
196

номинал
комиссии

Масс-спектрометриче-
ское изучение гетероми-
нерных молекул.

 (См. O_2^+) III

$C_2H_2^+$

1967

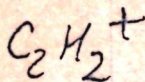
23 Б39. Роль преддиссоциации при распаде иона ацетилена. Fiquet-Fayard Florence. Importance des prédissociations dans la fragmentation de l'ion acétylène.

«J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1967, 64, № 2, 320—323 (франц.; рез. англ.)

Рассмотрение потенциальных поверхностей и электронных правил отбора показало, что $^2\Sigma_u^+$ -состояние молекулярного иона $C_2H_2^+$ должно преддиссоциировать через отталкивательное состояние $^4\Pi_u$. Эта преддиссоциация объясняет изотоп-эффект и величину потенциала появления C_2H^+ .

Резюме

x. 1967. 23



7987

Spec. Discuss.
Chem.

25595u Importance of predissociations in the fragmentation of the acetylene ion. Florence Fiquet-Fayard (Lab. Chim. Phys., Orsay, France). *J. Chim. Phys.* 64(2), 320-3(1967) (Fr). Consideration of potential surfaces and electronic selection rules shows the $^2\Sigma_u^+$ state of the mol. ion C_2H_2^+ to be predissocd. via the $^4\Pi_u$ repulsive state. This predissocn. allows for the interpretation of the isotope effects and the appearance potential of C_2H^+ .
P. B. Shallcross

C. A. 1967. V4. 6

$HC \equiv CH^+$

Spohr R.,
Pitt Kamer &

1967

Z. Naturforsch., 22a, ~ 5, 705.

Измерение кинетической энер-
гии фотонизированных и фак-
тора Франка-Кондона для
колебательных переходов
несложных молекулярных

исков.

(суд. №₂ + III)

$C_2H_2^+$

Chupra W. A.
Berkowitz J.
Ref aly K.

1969

A.P.

J. Chem. Phys., 1969, 50,
W5, 1838-41

BQ-2816-XIV

($C_{2H_3^+}$) III

$C_2H_2^+$

структ.

попав.

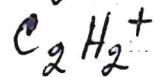
XIV-287 1971
Mollas F. M.
Sutherland T. A.

Mol. Phys. 1971, 21, VI
183-185

(Ser. $C_2H_2^+$) III

XIV-6086 1974

фотоио-
низация

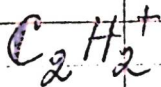


Изучение реакции катиона
но возбужденных ионов C_2H_2^+
с H_2 методами фотоиониза-
ции и конвейерного резонанса.

Buttrill S. E. Jr. Kim J. K.
"J. Chem. Phys." 1974, 61, N5,
2122-2128 (англ.)

т. 1975, №

(см C_2H_2^+ ; I)



кривые
иониз

*43-6500

1974

2 Д201. Эффективные кривые ионизации этилена электронным ударом. Maeda Kogoro, Suzuki Isao H., Koyama Yasuji. Ionization efficiency curves of ethylene by electron impact. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1974, 14, № 3, 273—283 (англ.)

С помощью моноэнергетич. электронного пучка в диапазоне электронных энергий 10—28 эВ получены эффективные ионизационные кривые для ионов $C_2H_4^+$, $C_2H_3^+$, $C_2H_2^+$, CH_2^+ , образующиеся в результате ионизации молекул C_2H_4 электронным ударом. Эти кривые представляют собой прямые линии с изломами, соответствующими потенциалами ионизации. Найденные значения этих потенциалов ионизации, а также потенциалов появления I_n ионов находятся в хорошем согласии с данными из экспериментов с фотоионизацией этилена. Определены также потенциалы появления следующих ионов: C_2H^+ ($I_n = 18,7$ эВ); C_2^+ (24,5 эВ); CH_3^+ (19,3 эВ); CH^+ (22,1 эВ); C^+ (24,4 эВ).
Б. Ф. Горднеев

Ф. 1975. №2

☒

(43)

(+5) A.P.

$C_2H_2^+$

Reinke D.

1974

Baumgärtel H, et. al.

"Ber. Bunsenges phys Chem"

1974, 78, N11, 1145-1147.

(see. phys. ann)

(see $C_2H_2F^+$; III)

50307.4800

Ch, TC, MGU

96559

$C_2H_2^+$

(A.P.; 5)

1974

*4-8280

Suzuki Isao H., Maeda Kogoro. Ionization efficiency curves and fragmentations of deuterated ethylenes by electron impact.

"Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.",
1974, 15, N 3, 281-290

0316 пик

(англ.)

292 294 3 0 0

ВИНИТИ

50217.8702
Ch, TC

40771 02

1975

* 4-8084

Chu San Yan, Goodman Lionel.

Geometries of acetylene ions.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1975, 97, N 1,
7-9

(англ.)



0237 7145

283 285 289

ВИНИТИ

50604.433

Ch, TC

J. Chem. Phys. 7, 63253

 $C_2H_2^+$

1975

4059

Figes H. P., Geerlings P., Van Alsenoy C. A self-consistent field molecular orbital theory with "intermediate neglect of differential overlap", based on the atomic valence state concept. "Bull. Soc. chim. belg.", 1975, 84, № 3, 145-158

(англ.)

358

358

370

0378 пик

ВИНИТИ

51210.9022

50701

1975

Ch, TC, MGU

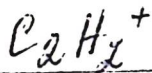
 $C_2H_2^+$ (A.P)

55-10831

Lohr W., Jochims H.W., Baumgärtel H.
Photoreaktionen kleiner organischer
Moleküle IV Absorptionsspektren, Photo-
ionen- und Resonanzphotoelektronenspek-
tren von Vinylbromid. "Ber. Bunsenges.
phys.Chem.", 1975, 79, N10, 901-906
(нем., рез.англ.)

480 483

5110519 пик ВИНТИ



W 4 - 15578 1976

Bischof P.

(9)

J. Amer. Chem Soc
1976, 98, 122, 6844-49

61229.7389
Fh, Ch, TC, MGU

34469

1976

C₂H₂ +

(A.P.)

43-15935

Selim Ezzat T.M.

Mass spectrometric ionization and
dissociation of ethane.

"Indian J. Pure and Appl. Phys.", 1976, 14,
N 7, 547-555 (англ.)

07.80 пек

746 746

ВИНИТИ

$C_2H_2^+$

ommu 5427 1977

Herbst E., et al.

memoria,
243

Astrophys. J.,
1977, 215, 503-10

$C_2H_2^+$

omneek 5779

1977

(H^+, γ)

Huntress W.T., Jr.

Astrophys. J. Suppl. Ser.,
1977, 33, (4), 495-514.

(see H^+ , III)

$C_2H_2^+$

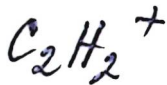
ommu eu 5627

1977

Raimondi Mario

(E; u.n.) "Mol. Phys.", 1977, 34, N3,
745-754 (ans.)

coll. $C_2H_2 - \underline{III}$



1974



11 Б90. Кривые эффективности ионизации ацетилена электронным ударом. Suzuki Isao H., Maeda Kogoro. Ionization efficiency curves of acetylene by electron impact. «Сицурё бунсэки, Mass Spectrosc.», 1977, 25, № 3, 223—232 (англ.)

Измерены кривые эффективности ионизации (КЭИ) ацетилена (I) электронным ударом с образованием ионов C_2H_2^+ , C_2H^+ , C_2^+ , CH_2^+ , CH^+ , C^+ , и H^+ в области энергий электронов $E=10,5-25$ эв с разрешением по E 0,05 эв. Из КЭИ отдельных ионов определена кривая эффективности полной ионизации (КЭПИ) I. На КЭПИ абсциссы части точек перегиба совпадают со значениями P_t ионизации I, определенными методом фотоэлектронной спектроскопии. Остальные точки перегиба

потенциалы.

У. 1978 N 11

(+1) $\boxtimes$

приписаны автоионизац. состояниям. Определен вклад автоионизац. состояний в КЭПИ, переходы в к-рые оптически запрещены, путем вычитания из КЭПИ дважды проинтегрированного фотоэлектронного спектра I. Проведена идентификация автоионизац. структуры на КЭПИ. Из КЭИ отдельных ионов определены Пт появления. Пт появления C_2H^+ совпадает с величиной, полученной из данных по фотоионизации I. Значения Пт появления др. ионов значительно отличаются от полученных ранее. На КЭИ для всех ионов кроме $C_2H_2^+$ обнаружена структура. Е. Николаев



H₂CC⁻

10mmen 10358

1980

Hinchliffe A.

nb. max.

factor,

receptor

J. Mol. Struct; 1980,

67, 101-105.



Khalil S.M.

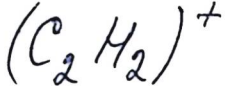
1980

Egypt. J. Chem., 1978,
(Pub. 1980), 21(6), 465-8.

расчет
молек.
структ.

~~15Hf~~





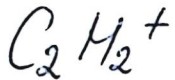
1981

Nomura Okio., et al.

J. Chem. Phys., 1981, 74,
N 12, 6830-6841.

спектр





1982

Bewz J. R., et al.

равновесн. J. Mol. Struct., 1982,
геллер, 86, N3 (Theochem, 1982,
A.P., Do, J. 3, N3) 205-215.

●
(см. $C_6H_6^+$; III)

$C_2H_2^+$

[Ин. 15321]

1982

6 Б119. Наблюдение деформационных колебаний в состоянии $X^2\pi_u$ -иона ацетилена с использованием фотоэлектронной спектроскопии с возбуждением He-I. Observation of bending modes in the $X^2\pi_u$ state of the acetylene ion using He(I) photoelectron spectrometry. Dehmer P. M., Dehmer J. L. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1982, 28, № 2, 145—147 (англ.)

ν_i, ν_j

С высоким разрешением (20 мэВ) измерена колебательная структура фотоэлектронного спектра (ФЭС, возбуждение He-I) ацетилена в области энергий ионизации, соотв-щих состоянию $X^2\pi_u$ иона $C_2H_2^+$. В ФЭС обнаружены новые структуры, отнесенные к возбуждению цис- и/или транс-деф. кол. в основном электронном состоянии иона. Соотв-щие энергии равны 0,087 и 0,036 эВ.

И. А. Тополь

X. 1983, 19, № 6

CaH_2^+

[Ommuck 13368]

1982

спектр,
кв. мех.
расчет

Hayashi T., Iwata S., et al.

J. Phys. B: Atom. and
Mol. Phys., 1982, 15, N1;
79-92

$C_2H_2^+$

1982

Kühnel W., Geef E.,
et al.

ΔH_f ,
геоэнерг.
структ.

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

●
(cell. C_2 ; II)

$C_2H_2^+$

Ommeck 14490

1982

96: 207895y Higher resolution photoionization study of acetylene near the threshold. Ono, Y.; Osuch, E. A.; Ng, C. Y. (Ames Lab., Iowa State Univ., Ames, IA 50011 USA). *J. Chem. Phys.* 1982, 76(8), 3905-7 (Eng). High resolu. (0.14 Å full width at half max.) photoionization efficiency data for $C_2H_2^+$ near the threshold (1059-1090 Å) were obtained using the mol. beam method. The positions of the autoionization features resolved on the $\nu_2 = 0$ vibrational step of $C_2H_2^+(X^2\Pi_u)$ were consistent with those calcd. from the 2 Rydberg equations $\nu_n = 93,770 - [R/(n - 0.95)^2]$ cm⁻¹, $\nu_n = 93,770 - [R/(n - 0.36)^2]$ cm⁻¹, where R and n are the Rydberg const. and the principal quantum no., resp.

фотоионизаци-
онный,
спектр

C. A. 1982, 96, N 24.

$C_2H_2^+$

[Dm. 14610]

1982

Д731. Исследования методом тройной дифференциальной фотоэлектронной спектроскопии не франк-кондоновского поведения при фотоионизации ацетилена. Triply differential photoelectron studies of non-Franck-Condon behavior in the photoionization of acetylene. Parr A. C., Ederer D. L., West J. B., Holland D. M. P., Dehmer J. L. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 9, 4349—4355 (англ.)

фотоионизация

При помощи фотоэлектронной спектроскопии с использованием синхротронного излучения в диапазоне энергий квантов 13—25 эВ получены спектральные зависимости констант угловой анизотропии β и отношений ветвления для трех колебательных состояний иона $x^2\Pi_u$ $C_2H_2^+$. Установлено, что в спектральной области до 16 эВ при фотоионизации происходит аномальное возбуждение деформационных колебаний $C_2H_2^+$. Для объяснения такого не франк-кондоновского распределе-

ор. 1983, 18, №1

ния авторы, в качестве наиболее вероятного, предлагают автоионизационный механизм. На основании сопоставления экспериментальных и теоретич. данных по фотоионизации C_2H_2 показано, что 2 автоионизационных перехода $2\sigma_u \rightarrow 1\pi_g/\pi^*$ и $3\sigma_g \rightarrow 3\sigma_u/\sigma^*$ в области 13—16 эВ наиболее интенсивны. Библ. 51. Ю. В. Чижев



$C_2H_2^{2+}$

1982

5Д127. Структура и стабильность дикатиона ацетилена. The structure and stability of the acetylene dication. Pople John A., Frisch Michael J., Raghavachari Krishnan, V. R. Schleyer Paul. «J. Comput. Chem.», 1982, 3, № 4, 468—470 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах гауссовых ф-ций вплоть до ОСТ-6-31**ГФ и с учетом корреляции электронов в четвертом порядке теории возмущений Меллера—Плессетта исследовано электронное строение дикатиона ацетилена $C_2H_2^{2+}$ (I) и продукта его депротонирования C_2H^+ (II). Показано, что основным состоянием I является $^3\Sigma_g^-$ с отщеплением по одному электрону от каждой π -МО ацетилена, которое линейно (C—H и C—C 1,113 и 1,308 Å). Синглетное состояние с двумя π -электронами $^1\Delta_g$ расположено на 26,2 ккал/моль выше. Для II основное состояние — $^2\Pi$, а состояние $^5\Sigma_g^-$ расположено на 3,1 ккал/моль выше, однако при линейном подходе дополнительного

расчет Σ -
компл., см.



Op. 1983, 18, 15

1) C_2H_2 , $C_2H_2^+$ (жесткий ионный)

протона с образованием II это состояние стабилизируется. Отмечено, что при переходе от C_2H_2 к $C_2H_2^+$ и к I длина связи CC возрастает (значения 1,185; 1,229 и 1,308 Å соответственно), что объяснено уменьшением π -связывания и увеличением отталкивания ядер. Показано, что реакция $I \rightarrow II$ экзотермична (9,8 ккал/моль), но характеризуется высоким барьером (65 ккал/моль). Энергии ионизации C_2H_2 и $C_2H_2^+$ оценены в 10,9 и 19,9 эВ (эксперим. значения 11,4 и 20,8). Также рассчитаны гармонич. колебательные частоты для I.

В. Л. Лебедев

2) C_2H^+ (структ.)



$C_2H_2^{2+}$

1982

№ 10 Б37. Структура и стабильность дикатиона ацетилена. The structure and stability of the acetylene dication. Pople John A., Frisch Michael J., Raghavachari Krishnan, Schleyer Paul v. R. «J. Comput. Chem.», 1982, 3, № 4, 468—470 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в гауссовом базисе проведено вычисление двухзарядного катиона $C_2H_2^{2+}$ (I). Рассмотрена линейная конфигурация I. Согласно результатам расчетов в базисе 6—31* (при оптимизации геометрии в том же базисе), низшее электронное состояние I является триплетным с двумя π -электронами ($^3\Sigma_g^-$), возникающее при удалении по 1 электрону с каждой из двух связывающих π -МО ац. I. Соотв-щие синглетное состояние ($^1\Delta_g$) лежит на 26 ккал/моль выше (базис 3—21). Р-ция депротонирования I с образованием HCC^+ является экзотермич., причем вычисленная с учетом энергии корреляции электронов и поправки на энергию нулевых колебаний величина ΔE составляет —9,8 ккал/моль (базис 6—31**, оптимизация геометрии в базисе 6—31*). Барьер активации реакции депротонирования равен ~65 ккал/моль.

Э. Герман

структура
и стабильность

X. 1983, 19,
N 10

$C_2 H_2^+$

1985

Wu C. Y. Robert,
Fudge D. L.

ϵ_i ;

J. Chem. Phys., 1985,
82, N10, 4495-4499.

(cor. $C_2 H_2$; III)

CaH_2

[om. 24915], 25377)

1986

поверхность
потеряв.
жизни,
стабильн.,
спектрск.
постепен.,
термод-
ф-ция

Беломен А. Б.,
Заворухин С. М. и др.

Инт. физ. сб., 1986,
26, № 6, 681-692.

$C_2H_2^+$

DM. 23753 1986

104: 177074u Photoelectron spectroscopy and inferred femto-second intramolecular dynamics of ethyne radical ions ($1+$) ($C_2H_2^+$ and $C_2D_2^+$). Reutt, J. E.; Wang, L. S.; Pollard, J. E.; Trevor, D. J.; Lee, Y. T.; Shirley, D. A. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Chem. Phys.* 1986, 84(6), 3022-31 (Eng). The 584 Å photoelectron spectra of rotationally cold C_2H_2 and C_2D_2 were obtained with improved resolu., permitting the 1st 3 electronic states of the ions to be characterized in greater detail. Temp.-dependent studies led to a definitive assignment of the low intensity features in the $\tilde{A}^2\Pi_u$ state, yielding $\nu_1 = 837 \pm 12 \text{ cm}^{-1}$ for $C_2H_2^+$ and $\nu_1 = 702 \pm 12 \text{ cm}^{-1}$ for $C_2D_2^+$. The ν_6 origin of the Renner-Teller multiplet was identified. For $C_2D_2^+$, a Fermi resonance with this multiplet contributed intensity to the ν_1 mode, facilitating its evaluation at $2572 \pm 16 \text{ cm}^{-1}$. The C_{2v} geometry of the $\tilde{A}^2\Pi_u$ state was detd. from the 2 previously unobserved bending progressions, assigned to ν_1 and ν_{5B} , and evaluated at 492 ± 12 and $605 \pm 12 \text{ cm}^{-1}$ for $C_2H_2^+$ and 339 ± 12 and $516 \pm 12 \text{ cm}^{-1}$ for $C_2D_2^+$, resp. A more extensive vibrational progression than previously evident, comprised of irregular spectral features indicative of nonadiabatic effects, was obsd. for the $B^2\Sigma_u^+$ state. Autocorrelation functions were derived from the spectra for all 3 electronic states, and the 2 electronically excited states exhibit an ultrafast decay on a 10^{-14} s time scale. The $\tilde{A}^2\Pi_u$ state decays within 1 period of bending vibration, while the $B^2\Sigma_u^+$ state survives only 1.4 fs, corresponding to a single period of sym. stretching motion.

ν_4, ν_5 , см. ун.
помогн. энерг

ⓧⓂ

C.A. 1986, 104, N 20.

$C_2D_2^+$

$C_2H_2^+$

1986

18 Б1279. К вопросу об отнесении колебательных уровней ν_2 и ν_3 иона $C_2H_2^+$. On the assignment of the ν_2 and ν_3 vibrational levels of $C_2H_2^+$. Somasundaram K., Handy N. C. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 5, 2899—2900 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Методом СОП в станд. базисе Даниннга выполнена полная оптимизация геометрии молекулы этана C_2H_4 (I) и иона $C_2H_4^+$ (II) и рассчитаны частоты колебаний молекул I, II, C_2D_4 (III) и $C_2D_4^+$ (IV). Более точные данные по частотам колебаний для ионов получены путем масштабирования. Измеренные ранее эксперим. колебат. прогрессии в фотоэлектронных спектрах ионов II и IV объяснены на основе их плоской равновесной конфигурации. Ю. Н. Панченко

(м.п.)

X. 1986, 19, n 18

$C_2H_2^+$

(DM-26432) 1987

106: 185188r Infrared spectra of carbolons. II. The ν_3 band of acetylene ion ($C_2H_2^+$) ($^2\Pi_u$). Crofton, Mark W.; Jagod, Mary Frances; Reh fuss, Brent D.; Oka, Takeshi (Dep. Chem., Univ. Chicago, Chicago, IL 60637 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 86(6), 3755-6 (Eng). The IR spectrum of $C_2H_2^+$ ($^2\Pi_u$) was obtained by using a difference frequency laser system and the velocity modulation method using an a.c. discharge (6 kHz) of a $C_2H_2:H_2:He$ (1:20:700) gas mixt. at a total pressure of ≈ 7 torr. The lines of $C_2H_2^+$ were identified in the hydrocarbon ion transitions from their spectral pattern and different chem. behavior. The obsd. frequencies of $C_2H_2^+$ are listed. The strongest P and R branch lines were obsd. with a signal to noise ratio of ≈ 20 . As expected for a II transition, the Q branch lines are very weak. The mol. consts. of this cation were detd.

(lex cncmp)

C.A. 1987, 106, N22

$C_2H_2^+$

1987

~ 19 Б1121. Инфракрасный спектр катиона ацетиленового радикала $C_2H_2^+$. Теоретическое исследование методами ССП, МК ССП и КВ. The infrared spectrum of the acetylene radical cation $C_2H_2^+$. A theoretical study using SCF, MCSCF, and CI methods. Lee Timothy J., Rice Julia E., Schaefer III Henry F. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 5, 3051—3053 (англ.)

Методами ССП, КВОД и МК ССП в полном пространстве активных орбиталей с двухэкспонентным базисом и поляризац. ф-циями предсказаны геометрич. параметры, частоты колебаний и интенсивности ИК-спектров катионов $C_2H_2^+$ и C_2D_2 . В. Г. Соломоник

М-П.

(4) IX

Х. 1987, 19, № 19



(DM-26494)

1987

106: 164856s The infrared spectrum of the acetylene radical cation C_2H_2^+ . A theoretical study using SCF, MC-SCF, and CI methods. Lee, Timothy J.; Rice, Julia E.; Schaefer, Henry F., III (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 86(5), 3051-3 (Eng). A theor. study of the IR spectrum of the acetylene radical monocation using SCF, MCSCF, and CI methods showed that the best opportunity for observing the high-resoln. IR spectrum of C_2H_2^+ probably lies with the σ_u asym. C-H stretching frequency. Both the SCF and CI levels of theory suggest that this fundamental has a high IR intensity, ~ 400 km/mol.

meopen -
pacem,
UK cranky

C. A. 1987, 106, N 20.

$C_2H_2^+$ om. 30490 1988

Jacore M.E.

Ti, J. Phys. and Chem. Ref
Di; Data, 1988, 17, N2, 357.

CaH_2^+

(om. 29064)

1988

Oka T.F.R.S.,

Phil. Trans. Roy. Soc.

London, 1988, A324,

N 1578, 81-94.

crump,
M.N.

Infrared

● Spectroscopy of
carbo-ions.

HCCH^+

1989

12 Д166. К стабильности катион-радикала винилидена. On the stability of the vinylidene radical cation / Baker J. // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 159, № 5—6.— С. 447—451.— Англ.

Проведены неэмпирич. расчеты катионов ацетилен HCCH^+ , винилидена CCH_2^+ и переходного состояния для изомеризации. Проводилась полная оптимизация геометрии в рамках метода УМП/6-311 ГФ. Расчеты подтверждают сделанный по данным активированной столкновениями масс-спектрометрии вывод о существовании метастабильных газофазных катионов винилидена. Предыдущие менее точные расчеты давали нулевой барьер для изомеризации в катион ацетилена. Ошибка состояла в пренебрежении низколежащими возбужденными состояниями. Данные расчеты приводят к барьеру 45 кДж/моль для состояния 2-B1 и к нулевому барьеру для состояния 2-A1.

Г. К.

М.А.

ср. 1989, № 12

$C_2H_2^+$

om. 3/431/

1989

Balaban A.T., De Mare' G.R.,
et al.,

ab initio
pacrem

J. Mol. Struct. Theochem.,
1989, 183, 103-119.



$C_2H_2^{2+}$

om. 3/43/

1989

Balaban A.T., De Mare' G.R.,
et al.,

ab initio
pacem

J. Mol. Struct. Theochem.,
1989, 183, 103-119.



H_2CCH^+

(Om 33131)

1989

Frenking B.,

Int. J. Mass Spectrom.
and Ion Process. 1989, 95,
N1, 109-118.

Theory and experiment in
accord: The vinylidene

radical cation.



$H-C\equiv C-H$ (Om. 33598)

1989

Martin P. S., Yates K.,
et al.,

Can. J. Chem. 1989, 67,
N12, 2178-2187

A theoretical study of adiabatic proton transfer to simple substituted acetylenes in

their ground and excited
states.



$C_2H_2^+$ [Om. 33 361] 1989.

$(\tilde{A}, \tilde{B})$ Norwood K., Ng C.Y.,

crump J. Chem. Phys. 1989,
91, N5, 2898-2900

A state-selected study
of the unimolecular de-

composition of $\text{CaH}_2^+(A, B)$
using the photolon-photoelectron
Coincidence method.

HCClH⁺

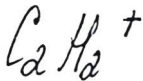
1989

Oka T.

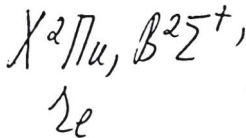
UK
cukky

Proc. NATO Adv. Study
Inst., Vimeiro, 30 March -
10 Apr, 1987 Dordrecht etc,
1988, ● © 353-77

(Cu. H₃⁺, III)



1990



113: 46802t Ionic geometries of acetylene in the $X^2\Pi_u$ and $B^2\Sigma_u^+$ ionic states. Chau, Foo Tim (Dep. Appl. Biol. Chem. Technol., Hong Kong Polytech., Hung Hom, Hong Kong). *Chem. Phys. Lett.* 1990, 169(1-2), 43-8 (Eng). Franck-Condon analyses are applied to the high-resoln. photoelectron spectra of C_2H_2 and C_2D_2 . From the first photoelectron bands, the CH and CC bond lengths are resp. 1.076 and 1.250 Å for $C_2H_2^+$ and 1.080 and 1.247 Å for $C_2D_2^+$ in the $X^2\Pi_u$ state. Results obtained are compared with those by previous workers. As for the third photoelectron bands, simulated spectra of acetylenes agree well with obsd. ones. The CH and CC bond lengths thus deduced for the $B^2\Sigma_u^+$ state have values of resp. 1.271 and 1.191 Å for $C_2H_2^+$ and 1.276 and 1.178 Å for $C_2D_2^+$. The long CH bond length obtained for the acetylene ions is discussed.

(4) $\boxtimes$ C.A. 1990, 113, N6

$C_2H_2^+$

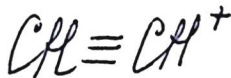
1990

12 Д102. Теоретическое изучение уровней вращательно-колебательной энергии для валентных мод $C_2H_2^+(X^2\Pi_u)$. A theoretical study of the rotation-vibration energy levels for the stretching modes in $C_2H_2^+(X^2\Pi_u)$ / Крамер, В. Р., Спирко В., Роос В. О. // J. Mol. Spectrosc.— 1990.— 141, № 1.— С. 43—48.— Англ.

М.П.
Рассчитана трехмерная поверхность потенц. энергии, используемая для описания вал. кол. атомов иона $C_2H_2^+$ в основном электронном состоянии. Использовался метод ССП в полном активном пространстве с учетом конфигурации. взаимодействия. Рассчитаны значения уровней вращательно-колебательной энергии иона, согласующиеся с доступными данными эксперимента.

В. А. Морозов

Ф. 1990, № 12



1990

/ 112: 205139e Classical and nonclassical forms of the vinyl cation: a coupled cluster study. Liang, Congxin; Hamilton, Tracy P.; Schaefer, Henry F., III (Cent. Computational Quantum Chem., Univ. Georgia, Athens, GA 30602 USA). *J. Chem. Phys.* 1990, 92(6), 3653-8 (Eng). The energy difference between the classical and nonclassical forms of the vinyl cation is studied using the single and double excitation CI (CISD) and coupled cluster methods (CCSD and CCSDT-1). The basis sets employed range from double ζ to those including f functions on carbon and d functions on hydrogen. It is shown that the theor. energy differences are very sensitive to the inclusion of higher-order polarization functions and the inclusion of triple excitations in the correlated wave functions. The results are compared with other theor. studies in the literature and with the very recent exptl. work of Crofton, Jagod, Rehfuss, and Oka. The most reliable single theor. treatment involves the CCSDT-1 method with basis set C(10s5p2d 1f/4s3p2d 1f), H(5s2p/3s2p), and predicts 3.3 kcal/mol for the classical/nonclassical energy difference. Basis set extension is expected to increase this sepn. to about 4.0 kcal/mol, still less than the exptl. value, >6 kcal/mol.

pccm

c.A. 1990, 112, N 22

$C_2H_2^+$

1990

113: 31197a A theoretical study of the rotation-vibration energy levels for the stretching modes in acetylene ion ($C_2H_2^+$)($X^2\Pi_u$). Kraemer, W. P.; Spirko, V.; Roos, B. O. (Max-Planck-Inst. Phys. Astrophys., D-8046 Garching, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1990, 141(1), 43-8 (Eng). The 3-dimensional potential energy surface for the stretching motions of the $X^2\Pi_u$ electronic ground state of the $C_2H_2^+$ ion is calcd. at the complete active space (CAS) SCF and multi-ref. CI (MR-CI) level of theory using extended Gaussian basis sets of the general contraction type. A model Hamiltonian for pure stretching motions is applied to calc. the rovibrational energy levels. The results are in close agreement with the few available exptl. data. The predicted values can therefore be expected to be reliable.

$X^2\Pi_u$, *main*

C.A. 1990, 113, 44

$C_2H_2^+$

1991

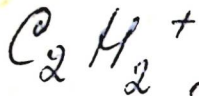
Д 16 Б1164. Фотоэлектронная спектроскопия из состояния $\tilde{A}^1A_u$ ацетилена. Деформационные колебания $C_2H_2^+$ в состоянии $\tilde{X}^2\Pi_u$. Photoelectron spectroscopy from the $\tilde{A}^1A_u$ state of acetylene: The bending vibrations of $C_2H_2^+$ $\tilde{X}^2\Pi_u$ / Pratt S. T., Dehmer P. M., Dehmer J. L. // J. Chem. Phys.— 1991.— 95, № 9.— С. 6238—6248.— Англ.

Методом резонансно усиленной многофотонной (1+1) ионизации (МФИ) измерены фотоэлектронные спектры (ФЭС) ацетилена из возбужденного электронного состояния $\tilde{A}^1A_u$ с изогнутой транс-конфигурацией. Для возбуждения перехода $\tilde{A}^1A_u \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ и последующей ионизации использовалось удвоенное по частоте (209—220 нм) излучение импульсного перестраиваемого лазера на красителе. Т. к. основное электронное состояние катиона $C_2H_2^+$ ($\tilde{X}^2\Pi_u$) соответ-

М.А.

Х. 1992, N 16

ствуёт линейной конфигурации, в ФЭС наблюдалась развитая прогрессия полос колебат. структуры связанная с транс-деформац. колебанием V_4^+ иона. Состояние $\tilde{X}^2\Pi_u C_2H_2^+$ расщеплено за счет эффекта Реннера—Теллера вдоль транс-деформац. координаты. Анализ колебат. структуры ФЭС позволил определить параметры этого взаимодействия. В результате сопоставления полученных данных с результатами выполненных ранее исследований ФЭС C_2H_2 (возбуждение He-I или МФИ) сделано переотнесение цис- и транс-деформац. колебаний катиона. Библ. 38.



1991

Zajman D., Vager Z.,
et al.

u. n. J. Chem. Phys. 1991. 94,
No. 6. 6377-6387.

(cur. ● C_2H^+ ; III)

$C_2H_2^{2+}$

1992

117: 198980v A combined experimental and theoretical investigation of 1,2-ethenediylum ($C_2H_2^{2+}$) electronic-state energies. Andrews, S. R.; Harris, F. M.; Parry, D. E. (Dep. Chem., Univ. Coll. Swansea, Swansea, UK SA2 8PP). *Chem. Phys.* 1992, 166(1-2), 69-76 (Eng). Double-charge-transfer spectroscopy was used to investigate low-lying electronic states of $C_2H_2^{2+}$. The projectile ion used was OH^+ ; because of spin conservation in the double-electron-capture reaction which is central to this type of spectroscopy, it was expected that triplet states of the dication would be populated. Three peaks in the spectrum were obsd. corresponding to vertical double-ionization energies of 32.7 ± 0.3 , 37.9 ± 0.4 , and 39.6 ± 0.5 eV. By comparing these with calcd. data, the energies were identified with the ground $^3\Sigma_g^-$ state, the $^3\Pi_u$ state, and the $^3\Pi_g$ state, resp. Incorporating the present data with previously detd. singlet-state data, and with computed values, provided a comprehensive electronic-state distribution for $C_2H_2^{2+}$ up to 13 eV above the ground state. Vertical double-ionization energies, calcd. in the present investigation by using a modified multiple-scattering-X α method, were in accurate agreement with this distribution.

моп. пачт
и жене. гак.
y

C. A. 1992, 117, N 20

HCCH⁺

1992

(B)

116: 244132z The vibrational spectra of molecular ions isolated in solid neon: acetylene cation (HCCH⁺) and acetylide anion (HCC⁻). Forney, Daniel; Jacox, Marilyn E.; Thompson, Warren E. (Mol. Phys. Div., Natl. Inst. Stand. Technol., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1992, 153(1-2), 680-91 (Eng). When a Ne:C₂H₂ sample is codeposited at approx. 5 K with a beam of neon atoms that was excited in a microwave discharge, a sharp, prominent absorption assigned to ν_3 of HCCH⁺ appears at 3137.6 cm⁻¹, very close to the previously reported gas-phase band center. Expts. on carbon-13 and deuterium substituted samples support this assignment and permit the identification of all of the IR-active CH- and CD-stretching fundamentals of the isotopically substituted acetylene cations, as well as the detn. of the stretching and stretching-interaction force consts. The absorption of the carbon-13 substituted acetylene cations were also identified in the analogous argon-matrix expts., but exhibit a matrix shift of approx. 30 cm⁻¹, possibly because of the larger polarizability of argon. The ν_3 absorption of H¹³C¹³CH⁺ isolated in a neon matrix is split by interaction with a combination band, probably $\nu_2 + \nu_4 + \nu_5$ (Σ_u^+). The CC-stretching fundamental of HCC⁻ was tentatively identified at 1773.0 cm⁻¹, and the band origin of the A²II_u-X² Σ_g^+ transition of C₂⁻ near 4155 cm⁻¹, in neon-matrix expts.

(+2)

C. A. 1992, 116, N 24

$C_2H_2^+$

1992

118: 69153z Infrared spectroscopy of carbo-ions. VI. C-H stretching vibration of the acetylene ion(1+) $C_2H_2^+$ and isotopic species. Jagod, Mary Frances; Rosslein, Matthias; Gabrys, Charles M.; Rehfuss, Brent D.; Scappini, Flavio; Crofton, Mark W.; Oka, Takeshi (Dep. Chem., Univ. Chicago, Chicago, IL 60637-1403 USA). *J. Chem. Phys.* 1992, 97(10), 7111-23 (Eng). The IR spectra of the band of the ν_{CH} asym. H stretching vibration in the 3 isotopic acetylene ions $C_2H_2^+$ (ν_1), $^{13}C_2H_2^+$ (ν_2), and $DCCH^+$ (ν_3) were obsd. and analyzed. The high resolar IR spectra were recorded using a difference-frequency laser spectrometer as the tunable coherent IR source probing an a.c. glow discharge. Velocity modulation, noise subtraction, and unidirectional multipassing of the IR beam through the discharge cell provided high sensitivity. $C_2H_2^+$ was produced in a gas mixt. of H_2 , He, and either CH_4 or C_2H_2 with a total pressure of ≈ 7 torr in multiple-inlet-outlet air-, H_2O -, and liq.-N-cooled discharge tubes; C_2H_2 freezing precluded its use in liq.-N-cooled discharges. Complicated by a strong perturbation whose max. occurred at $N' = 15$ for F_1 and $N' = 14$ for F_2 , the assignment of the spectrum of normal $C_2H_2^+$ was made possible by (1) fortuitous discharge conditions which provided unambiguous discrimination of $C_2H_2^+$ lines from among concurrent CH_3^+ and $C_2H_3^+$ lines, and (2) fitting the ground state combination differences. Velocity modulation, noise subtraction, and unidirectional multipassing

UK calcms,
P₃, sp. area-
my,

2(C-H), 2(C-C)

C.A. 1993, 118, N 8

of the IR beam through the discharge cell provided high sensitivity. The av. bond lengths $r_1(\text{CH}) = 1.077(5) \text{ \AA}$ and $r_1(\text{CC}) = 1.257(8) \text{ \AA}$ were calcd. from the spectroscopic consts. detd. from nonlinear least-squares fitting. C_2H_2^+ was produced in a gas mixt. of H_2 , He, and either CH_4 or C_2H_2 , with a total pressure of ≈ 7 Torr in multiple-inlet-outlet air-, water-, and liq.-nitrogen-cooled discharge tubes; C_2H_2 freezing precluded its use in liq.-N₂-cooled discharges. Complicated by a strong perturbation whose max. occurred at $N' = 15$ for F_1 and $N' = 14$ for F_2 , the assignment of the spectrum of normal C_2H_2^+ was made possible by (1) fortuitous discharge conditions which provided unambiguous discrimination of C_2H_2^+ lines from among concurrent CH_3^+ and C_2H_3^+ lines, and (2) fitting the ground state combination differences. Sufficiently high N' transitions were obsd. where A doubling was evident. The av. bond lengths $r_1(\text{CH}) = 1.077(5) \text{ \AA}$ and $r_1(\text{CC}) = 1.257(8) \text{ \AA}$ were calcd. from the spectroscopic consts. detd. from nonlinear least-squares fitting. Vibration-rotation interactions, the Renner-Teller interaction of perturbing states, plasma chem., and the relevance of the work in astrophysics are discussed.

$C_2H_2^+$

1993

120: 65116h Zero-kinetic-energy photoelectron spectroscopy from the A 1A_u state of acetylene: Renner-Teller interactions in the trans-bending vibration of ethyne radical ion($1+$) $C_2H_2^+$ X 2H_u . Pratt, S. T.; Dehmer, P. M.; Dehmer, J. L. (Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA). *J. Chem. Phys.* 1993, 99(9), 6233-44 (Eng). Double-resonance excitation via the A 1A_u state is used to record zero-kinetic-energy photoelectron spectra of acetylene. The anal. of these spectra leads to an improved value of $91,952 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$ for the adiabatic ionization potential to the $C_2H_2^+$ X 2H_u ionic ground state. Because the A 1A_u intermediate state has a trans-bent geometry, transitions from it readily populate the trans-bending vibration of the ground state ion, leading to new information about this mode and its Renner-Teller interactions. The relative intensities of the Renner-Teller components and of the rotational structure within each component also provide information on the dynamics of the photolionization process.

(promoted -
J. Chem. Phys.
C. A. 1994, 120, 9)

C. A. 1994, 120, N6

$C_2H_2^+$

1995

122: 197522p Ab initio investigation of the Renner-Teller effect in the $X^2\Pi_u$ electronic state of $C_2H_2^+$. Peric, Miljenko; Peyerimhoff, Sigrid D. (Inst. Physikalische Theoretische Chemie, Univ. Bonn, D-53115 Bonn, Germany). *J. Chem. Phys.* 1995, 102(9), 3685-94 (Eng). Results of an ab-initio investigation of the vibronic structure of the $X^2\Pi_u$ electronic state of $C_2H_2^+$ are presented. Calcns. are performed using a variational approach for handling the Renner-Teller effect in tetraat. mols. [Peric, et al., *Mol. Phys.* 55, 1129, (1985)]. In these computations, both the ab-initio potential surfaces and those derived on the basis of exptl. findings are employed. The results of the calcns. strongly support the recent anal. of the $C_2H_2^+$ spectrum [Pratt, et al., *J. Chem. Phys.* 99, 6233, (1993)], and predict a no. of yet unobserved features in the energy range between 0 and 3000 cm^{-1} .

Renner-Teller
approx. to
 $X^2\Pi_u$ coord.,
ab initio
calculation

C.A. 1995, 122, N 16

CaH₂⁺

[Dm. 39432]

1998

Miljenko Peric, et al.,

J. Chem. Phys., 1998,

Vol. 109, N 8, 3086, 3087...

F: C2H2+

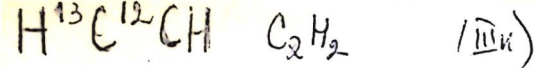
P: 3

1999

131:4872 Ab initio study of the electronic spectrum of C2H2+: investigation of structure and spectra involving low-lying doublet electronic states. [Erratum to document cited in CA129:202568]. Peric, Miljenko; Ostojic, Bojana; Engels, Bernd (Institut fur Physikalisc und Theoretische Chemie, Universitat Bonn, Bonn D-53115, Germany). J. Chem. Phys., 110(17), 8844 (English) 1999 American Institute of Physics. CODEN: JCPSA6. ISSN: 0021-9606. DOCUMENT TYPE: Journal CA Section: 22 (Physical Organic Chemistry) Section cross-reference(s): 73 The last but one sentence in Sec. III B should read: "It represents the bridged D2h-symmetry structure with a C-C bond length of 1.36 ...

C.A. Lord

and the distance of the hydrogen atoms from the inversion center, $MH = 1.06 \text{ \AA}$, corresponding to C-H distances of $1.26 \text{ \AA}$ and H-C-C bond angles of 57° . In Sec. IIIC the harmonic frequencies for the sym. C-H and C-C stretching in the $B \ 2\Gamma_u^+$ state of $C_2H_2^+$ are erroneously printed (2500 and 1370 cm^{-1}). The correct values are 1802 and 2530 cm^{-1} , resp., as given in Table III. □



2002

High-Resolution Fourier Transform Infrared Spectrum of the $\nu_1 + \nu_3$ Band System of $\text{H}^{13}\text{C}^{12}\text{CH}$

Supplementary Material

Actions

[Download Article](#)

Tommi Lantta, Markus Metsala, Olavi Vaittinen and Lauri Halonen

Journal of Molecular Spectroscopy

Volume 216, Issue 2, December 2002, Pages 505-507

A high-resolution vibration-rotation overtone spectrum of $\text{H}^{13}\text{C}^{12}\text{CH}$ has been recorded with a Fourier transform infrared spectrometer in the wavenumber region 6400 to 6700 cm^{-1} . The main band, assigned as the C-H stretching combination band $\nu_1 + \nu_3$, and some overtone and hot bands have been rotationally analyzed. Altogether eight parallel bands have been observed. The vibrational labels have been deduced on the basis of the assignments of the fundamental ν_3 antisymmetric C-H stretching band system.