

C. C. A.

1950

СССР

Disc. Far Soc № 980.

Обсуждение вопроса
Портнера о спектрах
показателей радиации.

с.с. СССР

CCl₂

Blanchard L-P.

1957

Le Goff P.

Canad. J. of Chemistry, 1957, ³⁵/₇₈₉ pp.

Mass spectrometric study of the
species Cs, SO, & CCl₂ produced in
primary heterogeneous reactions.

11-1102

$\text{CF}_4 / \text{D, I}(\text{CF}_3, \text{CF}_2, \text{CF}); \text{A.P.}(\text{CF}_3^+, \text{CF}_2^+, \text{CF}^+, \text{C}^+) /$ 1958

$\text{CCl}_4 / \text{D, I}(\text{CCl}_2, \text{CCl}), \text{A.P.}(\text{CCl}_2^+, \text{CCl}^+, \text{C})$

$\text{CBr}_4 / \text{D, I}(\text{CBr}_2, \text{CBr}), \text{A.P.}(\text{CBr}_2^+, \text{CBr}^+, \text{C}^+)$

Reed R.I., Snedden W.

Trans. Faraday Soc. 1958, 54, N 3,
301-307 (www)

Studies in electron impact methods.

PX., 1958, 63445

M.10

CCl2

CCl_2

Searcy A.W.

1958

J. Chem. Phys. 1958, 28, 1237

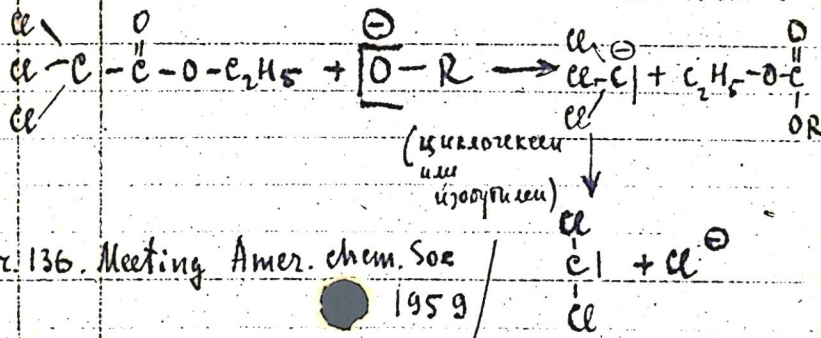
Paerey yna $\angle \text{Ccccl}$ no
on. c. g. p. w. d. u. d. e. n. $= 112, 4 \pm 3, 5^\circ$.

Cl₂

1959.

W. Parham u. E.E. Schweizer

Angew. Chem. 1960, 72, 1, 52



Abstr. 136. Meeting Amer. chem. Soc
1959

БФР-2470-VIII; IV-1109

H_2Se , D_2Se , Cl_2 , F_2O , ClO_2 , SCl_2O , NO_2 , 1959

NO_2^+ , NO_2^- , UO_2^{2+} , CF_2 , CCl_2 , CBr_2 , CI_2

(СИЛОВЫЕ ПОСТОЯННЫЕ)

Venkateswarlu K., Thirughanasambandam P.

Z.Phys.Chem.(DDR), 1959, 212, II 3-4, 138-144.

СИЛОВЫЕ ПОСТОЯННЫЕ НЕКОТОРЫХ СИММЕТРИЧНЫХ
НЕЛИНЕЙНЫХ СИСТЕМ ТИПА XU_2 .

РЖХ, 1960, № 12,
45646.

CCl_2

Cl_2

Prof. Dr. M. Schmeisser, Dipl.-Chem. H. Schröter

1960

Angew. Chem. 1960, 72, 10, 349

Darstellung des Dichlorcarbens CCl_2 aus CCl_4
und Kohlenstoff

Кратко описан способ получения, определенных мол. вес
84,62 или 84,70, темп. вел. 82,92

Кислородом воздуха окисляет в прозен.

① - анализ. получению $[\text{SiBr}_2]_x$ { Schmeisser, Schwarzmann
Z. Naturforsch. 11, 278 [1956]

CCl_2

Down A.Y.

1963

Spectrochim. acta, 1963, 19, 17, 1163

И.К. Смирнов
Харисово
Харисово фторидов
диоксидов



(см. CF₂)

9184 - IV

1963

H_2O , H_2Se , H_2S , CH_2 , D_2O , D_2Se , D_2S ,
 SCl_2 , F_2O , Cl_2O , ClO_2^- , UO_2^{2+} , NO_2^+ ,
 NO_2 , NO_2^- , CF_2 , CCl_2 , CBr_2 , Cl_2 (H - H₂O,
 G^O , S^O , Cp)

Venkateswarlu K., Tahanalakshmi R.
 Indian J. Pure Appl. Phys., 1963,
 1(11), 377-9

Urey-Bradley force, field and...

10

CA., 1964, 60, II 5,
 4823d
 EGTb Q. R.

CCl₂. Kine J. 1964
Divalent Carbon
Ronald Press, New York
1964.

Репросцизиурица ремиген
годана. CCl₂ и сагустан -

Свидетельство в пользу сингап.
росм. ден. соед. РСР₂.

1964

9671 - IV

CF_3^+ ; CCl_3^+ ; CF_2^+ ; CCl_2^+ ; CF^+ ;
 CCl^+ ; CF_2 ; CHCl_3^+ ; CHF_3^+ ; CHF_2^+ ; CHCl_2^+ ;
 CHF^+ ; CHCl^+ (Δ Hf)

Hobrock D. L., Kiser R. W.
J. Phys. Chem., 1964, 68, N 3, 575-79

Electron impact ...

M, J

ECTS Q. R.

CCl_2

Чаркин О.П.,

1964

Деткина М.Е.

вом.
спр-ра

М. Сперукт. Телми,
1964, 5, ~ 6, 924.

● (Сел. СФ₄) III
Сел. на об.

Подгруппа IV. Тип MX_2 (диамантная мод.)
вместе с состоянием sp^2 приводит к усло-
виеу строения с углом $X-M-X = 90^\circ$. Но наоб-
людается расхождение (USF_2 , SeF_2 , SiF_2 ,
 $SiCl_2 = 110 \pm 10^\circ$) в ячейках, которые, по-види-
мому, всемогут быть сформированы атомы
галогенов, которое существенно при
малых углах и малых межатомных
расстояниях $CH-X$ и не учитываемые
в теории вал. состояния. Поэтому
можно отметить, что угол $X-M-X$ будет
увеличиваться в ряду $C-Si-Ge-Sn-Pb$
по мере увеличения $CH-X$. Для $SnCl_2$,
 $SnBr_2$, SnF_2 , $PbCl_2$, $PbBr_2$, PbF_2 угол равен
в 90° .

СССР

Rajalakshmi K. V.

1964

средние
амплитуды
колебаний

Proc. Indian Acad. Sci.,
1964, A60, N1, 51.

Средние амплитуды ко-
лебаний. Непрерывные сим-
метричные молекулы и груп-
пы X_2 .

(см. H_2S)

Вр-2470a-IV

I967

CCl_2

Milligan D.E., Jacox M.E.



J.Chem.Phys., 47, 703.

Matrix-isolation study of the reaction of carbon atoms with chlorine. The electronic and vibrational spectra of the free radical CCl_2 .

И.К. Смирнов. Вестник ИГиЛ. 1967. № 1. С. 100-100. 1
 2000-3000 cm^{-1} спектры поглощения в инфракрасной области
 250-400 nm (5) 400-2400 cm^{-1} 1200 cm^{-1}

Иссл. фторизма X_2CN в присутствии Cl_2 в мар. Ar и N_2 при 140°
образ. CCl_2 . имеет реакцию $\text{C} + \text{Cl}_2$
Найдены две реакции $(\text{C} + \text{Cl}_2)$ $\text{C} + \text{Cl}_2$ 13 700 и 726
 $\angle \text{CClCl} \sim 90-110^\circ$ (Андреевский. Косоваткин)
В обл. 4400-5600 cm^{-1} напра. слабая связь похор. с
расщеплением $\sim 305 \text{ cm}^{-1}$ (Отношение с CF_2 похор. 2го CCl_2
Beiding vibration ранее и мн. синт. сел. сел. и
Форму надписей надл. связь ява. переходом $\text{X}-\text{A}$
наимен. вимонанном развигу угловено
Согласие с Уолшем, по дегермал. ност. в вод. дум.
возбужд. соот. асорт. с да. ност. дум.
Если 748 и 726 - андреевский / Если 721 - андреевский. $\rightarrow$ упр. упр.
 $\angle 43^\circ$ / Если 721 и 700 = $\nu_1 \rightarrow$ упр. сел.

Оттиск 168 1967

CCl_2

спектр;
м.н.;

сироение

9 Б93. Изучение реакции атомов углерода с хлором в матрице. Электронный и колебательные спектры свободного радикала CCl_2 . Milligan Dolphus E., Jasco Marilyn E. Matrix — isolation study of the reaction of carbon atoms with chlorine. The electronic and vibrational spectra of the free radical CCl_2 . «J. Chem. Phys.», 1967, 47, № 2, 703—707 (англ.)

Проведено исследование фотолиза N_3CN в присутствии Cl_2 в матрицах Ar и N_2 при 14°K . Исследование ИК-спектров соответствующих образцов показало появление двух полос поглощения 721 и 748 см^{-1} , которые были отнесены к вал. кол. свободного радикала CCl_2 , образующегося из Cl_2 и атомов углерода, являющихся продуктами фотолитич. распада N_3CN . В ИК-спектре обнару-

х. 1968. 9

жены также полосы 700 и 726 см^{-1} , которые отнесены к вал. кол. свободного радикала C^{13}Cl_2 . При повышении т-ры до 30° К радикал CCl_2 реагирует с молекулой Cl_2 , образуя CCl_4 с незначительной энергией активации. Полуэмпирич. оценка величины угла $\text{Cl}-\text{C}-\text{Cl}$ дает значение между 90 и 120°. Исследование электронного спектра поглощения радикала CCl_2 показывает наличие слабой системы полос в области 4400—5600 Å, которая вероятно связана с переходами между основной и первой возбужденной электронной конфигурацией радикала.

Г. Кузьянц

CCl_2

1964

168

68955d Matrix-isolation study of the reaction of carbon atoms with chlorine. The electronic and vibrational spectra of the free radical CCl_2 . Dolphus E. Milligan and Marilyn E. Jacox (Natl. Bur. of Stds., Washington, D.C.). ~~*J. Chem. Phys.*~~ 47(2), 703-7(1967)(Eng). Studies of the photolysis of N_2CN in the presence of Cl_2 in Ar and N_2 matrixes at 14°K . provide evidence for the formation of the free radical CCl_2 by the reaction of photolytically produced C atoms with Cl_2 . The two stretching fundamentals of CCl_2 appear at 721 and 748 cm^{-1} . The corresponding fundamentals of $^{13}\text{CCl}_2$ have also been observed. When the sample is warmed above about 30°K ., these features disappear, and CCl_4 features grow in intensity, indicating that CCl_2 can react with Cl_2 with little or no activation energy. The valence

C. A. 1964 - 17.14

angle of CCl_2 probably lies between 90 and 110° . A weak band system appearing between 4400 and $5600 \text{ \AA}$., with an av. band sepn. of 305 cm.^{-1} , may also be attributed to CCl_2 . Analogy with the electronic absorption spectrum of CF_2 suggests that CCl_2 possesses a ground singlet state and that this band system arises from a transition between the ground-state electronic configuration and the first excited electronic configuration of CCl_2 , involving an extensive progression in the upper-state bending vibration.

RCJQ

1968

CCl_2

3 Б178. Инфракрасный спектр дихлоркарбона в твердом аргоне. Andrews Lester. Infrared spectrum of dichlorocarbene in solid argon. «J. Chem. Phys.», 1968, 48, № 3, 979—982 (англ.)

Исследованы ИК-спектры радикала дихлоркарбона CCl_2 образующегося в результате вторичной р-ции атомов Li с радикалом CCl_3 в матрице из тв. аргона. Предложено отнесение частот для изотопопроизводных $C^{12}Cl_2^{35}$, $C^{12}Cl^{35}Cl^{37}$, $C^{13}Cl_2^{35}$ и $C^{13}Cl^{35}Cl^{37}$. Значения силовых коэф. связей C—Cl найдены равными 2,86 мдин/А и угла 0,27 мдин/А. Вычисленное значение угла Cl—C—Cl составляет $100 \pm 9^\circ$; связи C—Cl по своему характеру являются нормальными ординарными. Б. Рассадни

м.и.;
см. посм.;
сифурийуас

Л. 1969. 3

1968

CCl₂

12 Д330. ИК-спектр дихлоркарбена в матрице из Ar.
 Andrews Lester. Infrared spectrum of dichlorocarbene in solid argon. «J. Chem. Phys.», 1968, 48, № 3, 979—982 (англ.)

Показано, что реакция атомов лития с CCl₄ в аргоновой матрице при 15°K ведет к образованию радикала CCl₃, который, в свою очередь реагируя с атомами Li, дает дихлоркарбен CCl₂ в конц-ии, достаточной для спектроскопич. обнаружения. Изучен ИК-спектр поглощения (200—4000 см⁻¹) продуктов реакции. Образование CCl₂ подтверждено с помощью изотопного замещения по Cl и C и рассмотрением уменьшения поглощения CCl₂ с одновременным ростом интенсивности поглощения C₂Cl₄

касиин;
 структура;
 микроскоп
 мб;

ф. 1968-128

при нагревании образца. Отнесение частот вал. кол. $\text{C}-\text{Cl}$ для $\text{C}^{12}\text{Cl}_2^{35}$, $\text{C}^{12}\text{Cl}^{35}\text{Cl}^{37}$, $\text{C}^{13}\text{Cl}_2^{35}$ и $\text{C}^{13}\text{Cl}^{35}\text{Cl}^{37}$ опирается на расчет норм. координат. Найденные значения частот составляют: $\nu_3 = 745,7$ и $\nu_1 = 719,5 \text{ см}^{-1}$; частота необнаруженного деф. кол. ν_2 оценена $\sim 300 \text{ см}^{-1}$. Показано, что CCl_2 нелинеен, подобно CH_2 , а деформирован (как CF_2) с углом $\text{Cl}-\text{C}-\text{Cl} = 100 \pm 9^\circ$; отмечено удлинение связи $\text{C}-\text{Cl}$ по сравнению с CCl_4 . Величины валентных силовых констант получены равными $F_r = 2,86$ и $F_{rr} = 0,27 \text{ мдн/А}$. Сделан вывод, что вакантная p -орбиталь атома углерода в дихлоркарбене может образовывать π -связь с одним из атомов Cl . Библ. 17. С. Ф. Б.

1968

CCl₂D.
C

100168h Infrared spectrum of dichlorocarbene in solid argon. Lester Andrews (Univ. of Virginia, Charlottesville, Va.). *J. Chem. Phys.* 48(3), 979-82(1968)(Eng). The matrix reaction of Li atoms and CCl₄ produces the CCl₃ radical followed by secondary reaction of Li with CCl₃ to yield a sufficient concn. of dichlorocarbene for ir spectral study. Natural Cl isotopes, ¹³C and Br substitution, and loss of CCl₂ absorptions accompanied by growth of C₂Cl₄ absorptions on sample warming furnish convincing evidence that dichlorocarbene is isolated in the Ar matrix. Assignments of the C-Cl stretching vibrations for the ¹²C³⁵Cl₂, ¹²C-³⁵Cl³⁷Cl, ¹³C³⁵Cl₂, and ¹³C³⁵Cl³⁷Cl species are supported by normal coordinate calcs. For the most abundant isotopic species, $\nu_1 = 719.5$ and $\nu_3 = 745.7$ cm.⁻¹, and ν_2 , the weak bending mode, was not detected. The stretching force consts., $F_r = 2.86$ and $F_{rr} = 0.27$ millidyne/A. indicate that C-Cl single bonds are present in dichlorocarbene, making it unlikely that the electron deficiency of the C atom is relieved by π bonding with Cl. RCJQ

C.A. 1968. 68. 22

CCl₂

смерщ

изагр.

Kastie J. W.

1969

Kaupe R. H.

Margrave J. L.

J. Molec. Spectrosc. 29 12152

~~Тер. смерщ 4 да. Група гикарида 1747~~

~~Сравнение с групите халкоиди Si, Ge, Sn~~

Рв показва, че 3 В сф. CCl₂ домин
рано разсачено при 1200 и 2000 см⁻¹.
и 5-6000 см⁻¹ нине сф. 'B.

SO_2 - единица. из 18 ат. мол.-л, где паров
 извесно повышение трин. соф.
 имеют разницу $3\text{H} - {}^1\text{H} = 3855 \text{ см}^{-1}$.

По сравнению с софв. величинами
 для SiCl_2 GeCl_2 SnCl_2 , ввочна. из ред. II

7000	8581	8807
------	------	------

Аноду надл. смиров газ над V_2
 $\text{SiCl}_2 = 248 \pm 10$, $\text{GeCl}_2 = 162 \pm 5 \text{ см}^{-1}$, $\text{SnCl}_2 = 120 \pm 10 \text{ см}^{-1}$
 и позв. оценить по аналогии с $\text{CCl}_2 = 490 \pm 50$ и $\text{PbCl}_2 = 1000$

1969

GeCl₂

Y. K. Chien

Do

V₂

+3.

62629r Ultraviolet spectra and electronic structure of Group IVA dichlorides. Hastie, J. W.; Hauge, Robert H.; Margrave, John L. (Rice Univ., Houston, Tex.). *J. Mol. Spectrosc.* 1969, 29(2), 152-62 (Eng). An electronic absorption spectrum for GeCl₂ in the region 3301-3140 Å., is interpreted in terms of progressions of bending frequencies of lower (¹A₁) and upper (¹B₁) states. The $v'' = 0$ to $v' = 0$ transition should lie at $\sim 30,969 \text{ cm}^{-1}$ (3228.1 Å.). Measured ground and upper state bending frequencies are 162 cm^{-1} and 95 cm^{-1} , resp., with uncertainties of $\pm 5 \text{ cm}^{-1}$. A large change in bond angle is indicated by the very different bending frequencies for the 2 states. A region of continuous absorption with a max. intensity at $\sim 32,227 \text{ cm}^{-1}$ and a long wavelength limit of approx. 31,800 cm^{-1} , is probably due to dissocn. of GeCl₂ to GeCl + Cl, in which case an upper limit for this dissocn. energy would be 92

C.A. 1969

70.1

17

kcal./mole. For SnCl_2 and PbCl_2 vapors, regions of continuous absorption only were found and were interpreted as $^1A_1 \rightarrow ^1B_1$ transitions and also as disocn. phenomena. Similarly, only regions of continua were found for emission spectra of GeCl_2 and CCl_2 . Comparison of this data with the chemiluminescence spectra observed previously for GeCl_2 and SnCl_2 , and the results of semiempirical extended Hueckel calcns. lead to the assignment of both singlet and triplet excited levels of GeCl_2 and SnCl_2 and less definitely for SiCl_2 . Also, values for the ground state bending frequencies for each of the Group IVA dichloride species are indicated.

RCKP

CCl_2

Hastie J.W.,
Hauge R.H.,
Margrave J.L.

1969

checkup
usage.

J. Molec. Spectrosc.,
29, N2, 152

(Cell. GeCl_2) III.

CCl_2

отмечен 3589

1970

Hastie J. W. et al.

Annual review of
Phys Chem, 1970, 21,
475-498

High temp chemistry.

полетрис
и ди
спектр в
матрице

CCl_2

Jacox M. E.

1970

Milligan J. E.

cell. n.,
M. n.

J. Chem. Phys. 1970,
53(4), 2688-707



(Cell. CCl) III

CCl_2

Shirk J.S., Bess A.M. 1970
(private communication)

6 Garne Jacob M.E. ~

Milligan D.E., J.Ch.Ph.,
1970, 53, 17, 2688-701.

Иссл. фторесценции CCl_2 совместно
с флуоресценцией $\text{V}_2 \sim \text{ZnO}$ и др.

СССР

оттиски 2154

1971

А. К. Мамычев

Р. Г. Микаш

В. М. Нерехов

Вост. Урал. Наук

"СССР, 1971, 201 № 4,

901-904

список
продуктов
пиранида

CCl₂

XIV-3382

1971

2 Д1008. Флуоресценция CCl₂ при возбуждении лазером. Shirk James S. Laser excited fluorescence of CCl₂. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 7, 3608—3609 (англ.)
При возбуждении лазером на аргоне ($\lambda=5145$ Å) сфотографирован спектр флуоресценции CCl₂. Спектр представлен несколькими сериями полос с полуширинами около 20 Å. Всего в области 6150—8300 Å зарегистрировано 13 серий со средней величиной удаления друг от друга около 34 см⁻¹. Выполнен анализ спектра, определены силовые постоянные отдельных колебаний.
В. П. К.

см. п.

см. п.

с газом, найденными Игорем В. и В. З.
в кристалле $\nu_2 \approx 341$ см⁻¹ вогнута. см. н.ос.
о добу. н.ос. н.ос. Юри-Бродни
Бондано, 70 взаимодейств

Ф. 1972. 2Д

Cl-Cl в CCl_2 более. Сильнее
 чем взаимодействие $\text{C}-\text{Cl}$ (r_2) и
 полярность. Поле. Юри-Бродни. менее
 симметричны. Поле. Юри-Бродни. менее
 симметричны. Поле. Юри-Бродни. менее
 симметричны. Поле. Юри-Бродни. менее

Поле Юри-Бродни

$$r = 3,12 \text{ мдм} \text{Å}^{-1}$$

$$r_2 = 0,53$$

$$r_\alpha = 0,61$$

$$r_{2\alpha} = 0,42$$

Поле Юри-Бродни

$$K_{\text{C-Cl}} = 2,66 \text{ мдм} \text{Å}^{-1}$$

$$K_{\text{C-Cl}_2} = 0,21$$

$$F_{\text{C-Cl}} = 0,85$$

C_2Cl_4

$$2,66$$

$$0,11$$

$$0,60$$

Мани и др

Г. Ч. Рн,

1957.27.51

CCl₂

XIV-3382

1941

145789x Laser excited fluorescence of CCl₂. Shirk, James S. (Dep. Chem., Illinois Inst. Technol., Chicago, Ill.). *J. Chem. Phys.* 1971, 55(7), 3608-9 (Eng). In search of the CCl₂ bending mode, a progression of 13 bands from 6171 to 8263 Å with av. sepn. 341 cm⁻¹ was obsd. in the fluorescence spectrum of CCl₂ excited with 5145-Å laser light. The band at 6171 Å was assigned to the 0 → 4 transition. A normal coordinate anal. gave a good fit to obsd. frequencies; however, the interaction consts. were almost as large as the principal bending force const. The Cl-Cl interaction in CCl₂ is more significant than a stretch-bend interaction: a Urey-Bradley force field also gave good fit to the obsd. frequencies and is preferred over the generalized valence force field for CCl₂.

См. н.о.с.
лазерной
флуоресценции

C.A. 1941. 45.24

CCl_2

Margrave J. L.
Sharp K. G., Wilson P. W.

1972

Fortschritte der Chem.

Forschung, 1972, 26, 1

Inorg. and Algen. Chemistry.

Manuscript Chemistry IV B2/3.

СССР

Домовая 3145

1973

Михаил П. Т. Мавров
А. К., Негрешов Р. М.

И

Михаил П. Т. Мавров
Собес. по делу
Курдюков, 1973 стр 141
г. Москва

С.С. 2

Оммуеи 3145

1973

Сербанка Б.Т.

Туробур М.М.

А.Р.

Мамеуааа Т Вее.

Собес. по Хенууу

Капиетов. 1973, стр 134.

2. Моква

CCl⁺₂

1974

Andreros Yester,
Allen Ralph O., et al.
"J. Chem. Phys." 1974, 61,
#5, 2156-2157 (all)

Di

(all CCl⁺ III)

Q. 1975. NR

СССР

номер 3037

1974

2;

Нерезов В. И., Майсеев
А. К., Святицкий В. А.

(с. В. Крайнев) Изв. АН СССР, сер. хим.

1974, (4), 958

CCl_2
 CCl_3
(ν ;

Andrews L., Gzylowski J. M., [1975]
Allen R.O.,
J. Phys. Chem. 1975, 79(9), 904

$^4\text{Sp.}$
 CCl_3^+
 CCl_2^+
и.к. спектр молекул и радикалов
при пропускании радиации
 CCl_4 в жидком состоянии при 150K.

CA 1975, 82, 226, 1781459

CCl_2^+
 CCl_2
(Di)

Allen Ralph O. 1975

J. Phys Chem 1975,
79(9) 904-12 (Eng)

(see CCl_3 ; III)

50325.7629

Ch, Ph, TC

41125

C Cl₂

1975

* 4-8371

Tevault David E., Andrews Lester. Laser-
-induced fluorescence spectrum of argon
matrix-isolated dichlorocarbene. "J. Mol.
Spectrosc.", 1975, 54, N 1, 110-120

(англ.)

0330 пмк

299 305

2 2

ВНИИТИ

CCl_2

(ir)

1975

7 Д784. Спектр флуоресценции дихлоркарбена в аргоновой матрице при лазерном возбуждении. Tev ault David E., Andrews Lester. Laser-induced fluorescence spectrum of argon matrix-isolated dichlorocarbene. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 54, № 1, 110—120 (англ.)

Исследована люминесценция CCl_2 в аргоновой матрице в области 7000 Å при возбуждении лазерным излучением с длинами волн 5682 и 4545 Å. Образцы получены с помощью матричной реакции атомов щелочных металлов с растворенным в аргоне четыреххлористым углеродом при последующем охлаждении до 15° К. Полосы спектра приписаны переходам из общего возбужденного электронного состояния CCl_2 на прогрессии основного состояния в комбинациях ν_1 и ν_2 . Интерпретация полос подтверждена исследованиями с образцами, обогащенными изотопом ^{13}C .

Т. Н. Т.

Ф/1975 № 7

1975

 CCl_2

(Di)

66210t Laser-induced fluorescence spectrum of argon matrix-isolated dichlorocarbene. Tevault, David E.; Andrews, Lester (Chem. Dep., Univ. Virginia, Charlottesville, Va.). *J. Mol. Spectrosc.* 1975, 54(1), 110-20 (Eng). Dichlorocarbene was prepared for spectral investigation by the matrix reaction of alkali metal atoms with CCl_4 at high diln. in Ar followed by condensation onto a Cu wedge held at 15°K. When these samples were irradiated with laser lines of wavelengths between 5682 and 4545 Å, an intense red emission system peaking at ~7000 Å was obsd. The spectrum of this emission revealed at least 5 progressions in the ground state bending and stretching fundamentals. A revised value of the ground state bending mode for CCl_2 was obtained from higher-resoln. spectra by using more pure samples and various laser exciting frequencies. ^{13}C -enriched samples confirm the assignments of the bands to progressions in the ground state bending and sym. stretching modes of CCl_2 .

C.A 1975 82 N10

Bent

CCl₂

1976

Andrews Lester.

Appl. Spectrosc. Rev.

1976, 11, N1, 125-61

(КР-спектр)
(см. приложение)

(см. DF, IV)

CCl₂.

1976

Chem
P. G. G. G.

66:98408n Emission and excitation spectra of dichloromethylene in solid argon. Bondybey, V. E. (Bell Lab. Murray Hill, N. J.). *J. Mol. Spectrosc.* 1976, 64(2), 180-2 (Eng). Studies of the CCl₂ excitation spectra in solid Ar give values of 624 and 304 cm⁻¹ for the upper-state vibrational modes ν_1 and ν_2 , resp. The 000-000 band of the electronic transition occurs at 17,092 cm⁻¹. Vibrational relaxation in the upper state is fast compared with the 3.6- μ s emission lifetime, and only vibrationally relaxed emission is obsd.

C. A. 1977. 88.14

CCl_2

1976

Чаркин О.П. и др.

Иссл. геогр. хим. 1976,
21, №, 2022-3.

(раств.
эл. сур.)

(ан BeF_2) III

CCL₂

1976

CCLF

P8006 all. A. u gr.

CCLM

C FHC

рык. в БУХУТН
N3685-76 DE17

(расчет
зн. сцеп.)

(all Bet) III

CCl₂

ЖЗ - 18247

1974

10 Д435. Спектры испускания и возбуждения CCl₂ в твердом аргоне. Bondybeу V. E. Emission and excitation spectra of CCl₂ in solid argon. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 64, № 2, 180—183 (англ.)

С помощью перестраиваемого лазера на красителе изучены спектры испускания и возбуждения (12 000—19 500 см⁻¹) радикала CCl₂, полученного фотолизом молекул CH₂Cl₂ в матрице из Ar при 4,2° К. Выполнено отнесение наблюдавшихся полос. Частота полосы электронного перехода 0—0 найдена равной 17 092 см⁻¹; из колебательных прогрессий определены значения фунда-

В. М. М.

Ф. 1974 № 10

ментальных частот ν_1 и ν_2 в основном (722 и 333 см^{-1}) и возбужденном (626 и 309,5 см^{-1} соответственно) электронных состояниях. Найдены величины констант ангармоничности X_{11}^0 , X_{22}^0 и X_{12}^0 для обоих состояний. Уменьшение величин ν_1 и ν_2 в возбужденном состоянии объяснено ослаблением связи при возбуждении. Узость возбуждающей линии позволила осуществить индивидуальное возбуждение изотопич. модификации ^{35}Cl — ^{37}Cl . Доведено, что время колебательной релаксации значительно меньше излучательного времени жизни (3,6 мксек) и испускание идет только с нижнего колебательного уровня. Библ. 14.

С. Ф. Б.

CCl_2

1977

Bauschlicker c. w.
et al.

геометрич.
24-фазовый. J. Amer. Chem. Soc.
1977, 99, 7106-10.



ген. $\text{CH}_2(\pi)$

CCl₂

спектр
поглощ.
τ.

19

ж. N 7, 1978

1978

7 Б1051. Индуцированная лазером флуоресценция CFCI и CCl₂ в газовой фазе. Huie R. E., Long N. J. T., Thrush B. A. Laser induced fluorescence of CFCI and CCl₂ in the gas phase. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 51, № 2, 197—200 (англ.)

Изучена флуоресценция (Фл) свободных радикалов CFCI и CCl₂ в газовой фазе, возбуждаемая перестраиваемым лазером на красителе. Радикалы получали на разрядно-струевой установке по р-циям типа $O(^3P) + F_2C=CXY \rightarrow F_2CO + CXY$, где $F_2C=CXY = CF_2CFCI$ или CF_2CCl_2 . Лишь «хвост» спектра поглощения CFCI лежит выше коротковолнового предела лазера при 386 нм. Наблюдаемый спектр возбуждения Фл CFCI является континуумом с двумя максимумами с расщеплением 376 см⁻¹. Выше 390 нм Фл практически не наблюдается. В обоих максимумах поглощения (379,4 и 384,8 нм) излучательные времена жизни $\tau_0(CFCI^*)$ одинаковы и равны 644 ± 18 нсек, константа скорости k_q тушения CFCI* молекулами O₂ и N₂ равна $(3,3 \pm 0,7) \cdot 10^{12}$ см³/моль·сек. Спектр поглощения CCl₂ имеет вид континуума от <420 до >520 нм без колебательной структуры. При возбуждении CCl₂* светом 515, 484 и 445 нм величины $\tau_0 = 3,81 \pm 0,30$ мксек.

При 437 нм $\tau_0(\text{CCl}_2^*) = 4,55 \pm 0,68$ мксек, т. е. с уменьшением длины волны возбуждающего света τ_0 возрастает, а не уменьшается, как это должно следовать из ν^3 -зависимости коэф. Эйнштейна A для спонтанного испускания света. Это повышение τ_0 приписано увеличению смешивания высших колебательных уровней электронно-возбужденного CCl_2^* с уровнями, для к-рых понижена вероятность излучательной дезактивации, как это имеет место для SO_2 и NO_2 . С ростом длины волны возбуждающего света k_q тушения CCl_2^* молекулами O_2 уменьшается от $2,3 \cdot 10^{13}$ до $1,5 \cdot 10^{13}$ см³/моль·сек. Сопоставление с лит. данными показывает, что в ряду CF_2 , CFCl , CCl_2 τ_0 возрастает в 60 раз. При этом изменение τ_0 в 10 раз обусловлено снижением коэф. Эйнштейна из-за его ν^3 -зависимости, а дальнейшее изменение в шесть раз — снижением момента электронного перехода по мере приближения возбужденного состояния 1B_1 (или $^1A''$) к основному состоянию 1A_1 (или $^1A'$). Сопоставление с лит. данными по значениям τ_0 в матрицах замороженных редких газов показывает, что $\tau_0(\text{газ})/\tau_0(\text{тв. Ar}) = 2,3; 1,9$ и $1,1$ для CF_2 , CFCl и CCl_2 соотв. Расчет на основе диэлектрич. св-в матрицы показывает, что это отношение должно быть близко к 2, как это и найдено для CF_2 и CFCl , но не для CCl_2 , для к-рого причины отклонения от значения 2 не ясны. Тем не менее полученные данные показывают, что безызлучательные процессы не дают значит. вклада в дезактивацию электронно-возбужденных дигалогенкарбенов в матрицах редких газов.

В. Е. Скурат

1977

CCl₂

12 Б66. Влияние неподеленной пары электронов на характер эллипсов силового поля и значения спектроскопических постоянных дигалогенидов элементов главной подгруппы IV группы и NO₂. Narayana K. L., Soudagar M. K. Lone pair electron contributions to the nature of force field ellipses and spectroscopic constants of dihalides of group IV a elements and NO₂. «Acta chim. Acad. sci. hung.», 1977, 94, № 2, 103—118 (англ.)

м.п;
сил. пост.

По выведенным и найденным ранее (Narayana K. L., Soudagar M. K., «J. Inorg. Nucl. Chem.», 1977, 39, 19) ф-лам с учетом вкладов неподеленных пар электронов для молекул $\text{CCl}_2^{35,37}$; $\text{SiCl}_2^{35,37}$; $\text{GeCl}_2^{35,37}$; $\text{SnCl}_2^{35,37}$; $\text{PbCl}_2^{35,37}$; $^{12,13}\text{CF}_2$; $^{28,30}\text{SiF}_2$; $^{72,74}\text{GeF}_2$; $^{119,120}\text{SnF}_2$ и $^{14,15}\text{NO}_2$ рассчитан т. н. «параметр смешивания» (ПС), представляющий собой простую ф-цию от параметров матрицы собственных вращений в общем выражении матрицы форм колебаний. В большинстве случаев, где получены мнимые значения ПС, подобные расчеты повторены при варьировании эксперим. значений частот

(+9) ☒

х, 1978, N12

колебаний ω_1 и ω_2 . Сформулированы три критерия для отбора ПС в отсутствии точного значения ω_1 для данного набора изотопозамещ. молекул. Путем изменения ПС для всех исследованных молекул построены эллипсы, соотв-щие зависимости силовой постоянной F_{11} от F_{12} . Исследован характер изменения эллипсов и силовых полей этих молекул при учете вкладов неподеленных пар электронов. Для положит. и отриц. значений ПС всех исследованных молекул вычислены значения постоянных корнolisова взаимодействия, средн. амплитуд колебаний и элементов матрицы распределения потенциальной энергии.

Ю. Н. Папченко



$^{13}\text{Cl}_2$

Rylov M. A.

1977

кв. метр.
расчет
электроны.
структ.

Zh. Fiz. Khim 1977,
51(3) 770 (Russ)

(see Be F, III)

1974

 CCl_2 SiCl_2 J_2

21K. L. Garfuss

88: 13888n Vibrational spectra and structure of dichloro= carbene and dichlorosilylene stabilized in an argon matrix. Svyatkin, V. A.; Mal'tsev, A. K.; Nefedov, O. M. (Inst. Org. Khim. im. Zelinskogo, Moscow, USSR). *Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Khim.* 1977, (10), 2236-42 (Russ). The isotopic structure of the ν_1 and ν_3 IR absorption bands of dichlorocarbene and dichlorosilylene, stabilized in an Ar matrix at 15-20K, was studied. The valence angles were detd., the force consts. were obtained, and the frequencies of the ν_1 , ν_2 , and ν_3 vibrations were calcd. for the CCl_2 and SiCl_2 particles with various isotopic compds.



(+1) $\boxtimes$

C.A., 1978, LL, N2

1977

CCl₂

3 Б227: Колебательные спектры и строение молекул CCl₂ и SiCl₂, стабилизированных в Ag-матрице. Святкин В. А., Мальцев А. К., Нефедов О. М. «Изв. АН СССР. Сер. хим.», 1977, № 10, 2236—2242

Частица CCl₂, полученная в газовой фазе путем пиролиза Cl₃CSiCl₃ и Cl₃CCl₃, и частица SiCl₂, полученная пиролизом Si₂Cl₆, стабилизированы в Ag-матрице при 15—20° К. В их ИК-спектрах зарегистрирована изотопная структура колебательных полос ν_1 и ν_3 . Произведен расчет силового поля и частот колебаний всех изотопных разновидностей молекул CCl₂ и SiCl₂. Отмечены закономерности изменения геометрии и силовых постоянных в молекулах дигалогенидов IVB группы. Автореферат

Дж. Сид. 11.

20, 1978, N3

1944

SiCl₂

V) 3 Б227. Колебательные спектры и строение молекул CCl_2 и SiCl_2 , стабилизированных в Ag-матрице. Святкин В. А., Мальцев А. К., Нефедов О. М. «Изв. АН СССР: Сер. хим.», 1977, № 10, 2236—2242

Частица CCl_2 , полученная в газовой фазе путем пиролиза $\text{Cl}_3\text{CSiCl}_3$ и $\text{Cl}_3\text{CCeCl}_3$, и частица SiCl_2 , полученная пиролизом Si_2Cl_6 , стабилизированы в Ag-матрице при 15—20° К. В их ИК-спектрах зарегистрирована изотопная структура колебательных полос ν_1 и ν_3 . Произведен расчет силового поля и частот колебаний всех изотопных разновидностей молекул CCl_2 и SiCl_2 . Отмечены закономерности изменения геометрии и силовых постоянных в молекулах дигалогенидов IVB группы. Автореферат.

Р. 1, с. 1. 17.

x, 1948, № 3

CSe_2

Святкин В.А., Мамыев Л.К.,
Кергзов Д.Н.,

Изв. АН СССР, Сер. Химия, 1977,
(в печати).

$$\angle \text{ElCCl} = 106 \pm 5^\circ$$

$$\nu_1 = 719,5 \quad \nu_2 = 326,5 \quad \nu_3 = 445,9.$$



SiCl_2 $\neq 102 \pm 5^\circ$ жкм.

Оценки газ таж 103 ± 4 (Мадагаскар)

$$V_1 = 512$$

$$V_2 = 202,2$$

$$V_3 = 501,2$$

расчет. V_3 .



Сл₂

1977

Святкин В. А.

2.

Автореферат к.х.н.

1977

C₂

Foyoda, Minoru et al.
Nippon Kagaku Kaishi
1977, (8), 1074-80 (Japan).

прекур.
еней

(ср. сс; III)

CCl_2

number 6616

1978

Ausloos P., Lias S. J.

AH^+

J. Amer. Chem. Soc.,

1978, 100(14), 4594-4595

Proton Affinity of CCl_2 .

CCl_2

Criegee

1978

90: 46242s Two chemiluminescence studies of the reaction barium + carbon tetrachloride $\rightarrow$ barium chloride + dichloromethylene($\tilde{A}$). Kiefer, Rudolf; Siegel, Augustin; Schultz, Arnulf (Fak. Phys., Univ. Freiburg, Freiburg/Br., Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1978, 59(2), 298-302 (Eng). The chemiluminescence spectrum of the reaction $\text{Ba} + \text{CCl}_4$ was analyzed as the $\tilde{A}-\tilde{X}$ emission of CCl_2 . Since the $\tilde{A}$ state is known to have a long lifetime (3.8 μs) it is possible to det. the angular distribution of the chemiluminescent species visually. In addn., the mean translational energy E_{trans} , of the product mols. can be estd. Within the exptl. accuracy the angular distribution is nearly isotropic and E_{trans} was estd. as 0.4 eV. The chemiluminescent cross section is approx. 3 orders of magnitude smaller than the main reaction channel leading to $\text{BaCl}(\text{X}) + \text{CCl}_2$.

C.A. 1979, 20, N6

~~CCl₂~~ CCl₂ hi W.-K., Rothstein S.M. 1978
~~CCl₃CCl~~

Chem. Phys. Lett., 1978,
57 (2), 211-13.

кв. мех.
расчет,
несетрени

(см. CCl₂ III)

Амтиса 6574

1978

CCl_2

$HCCl$

CH_3OCCl

расчет

геометрии

E_i ,

(+2)



x-1978, N24

24 Б61. Исследование методом МЧПДП/3 замещенных метиленов CCl_2 , $HCCl$ и $MeCCl$. Li W. K., Rothstein S. M. MINDO/3 study of substituted methylenes CCl_2 , $HCCl$, and $MeCCl$. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 57; № 2, 211—213 (англ.)

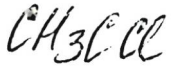
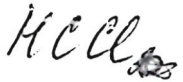
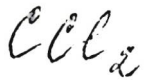
Методом ССП МО ЛКАО с оптимизацией геометрии рассчитаны низшее синглетное (S_0), нижнее триплетное (T_1) и первое возбужденное синглетное (S_1) состояния CCl_2 (I), $HCCl$ (II) и $MeCCl$ (III). Основным состоянием I и II, в согласии с эксперим. данными найден синглет S_0 , для III триплет T_1 лежит на 2 ккал/моль ниже S_0 . Расчет дал след. теплоты образования (ккал/моль): I, S_0 41,4 (эксперим. 66), T_1 51,2, S_1 80,6; II S_0 68,3, T_1 72,7, S_1 102,8; III S_1 50,4, T_1 48,5, S_1 74,0. Рассчитанные геометрии I—III хорошо согласуются с имею. имейся эксперим. данными. Для всех рассмотренных соединений длина связи C—Cl уменьшается в состояниях T_1 и S_1 , по сравнению с S_0 причем даже в последнем она короче на 0,06—0,1 Å, чем типичное значение для нормальных хлорзамещенных углеводородов. Укорочение связи

C—Cl в I—III интерпретировано авторами как указание на π -донорные свойства атома Cl по отношению к карбеновому атому C. Обнаружено, что в III заряды на атомах H, не лежащих в плоскости, содержащей

130h
ЛК

Оттиски 6574

1978



Электр.
строение



ор. 1978, № 2

12 Д176. Исследование методом МЧПДП/3 замещенных метиленов CCl_2 , HCCl и MeCCl . Li Wai-Kee, Rothstein Stuart M. MINDO/3 study of substituted methylenes CCl_2 , HCCl , and MeCCl . «Chem. Phys. Lett.», 1978, 57, № 2, 211—213 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении МЧПДП/3 исследовано электронное строение замещенных метиленов: CCl_2 (I), HCCl (II) и MeCCl (III), где $\text{Me} = \text{CH}_3$. Рассмотрены низшее синглетное S_0 и триплетное T_1 и первое возбужденное синглетное S_1 состояния. Проведена полная оптимизация геометрии, за исключением метильной группы в III. Приведены равновесная геометрия, теплоты образования, распределения электронной плотности. В согласии с эксперим. данными показано, что основными состояниями I и II являются синглетные, тогда как для III основное состояние предсказывается триплетным, что не согласуется с эксперим. данными для MeCF . Равновесная геометрия II очень хорошо согласуется с эксперим. данными. Укорочение длины связи $\text{C}-\text{Cl}$ в II (1,69 Å) по сравнению с типичным значением (1,78) объясняются значительным переносом π -электронной плотности с Cl на электронно-дефицитный карбеновый атом C.

В. Л. Лебедев

CCl_2 Mohan S., Manickavasagam R. 1978

Indian J. Pure and Appl. Phys.,
1978, 16, ~1, 55-57.

свст. пост.
центриров.
неканон.



(свст. CF_2) III

CCl₂

индуктивные эффекты.

24 Б32. Теоретическое изучение электронного спектра CCl₂. На Tae-Kyu, Gremlich H.-U., Bühner R. E. A theoretical study of the electronic spectrum of CCl₂. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 65, № 1, 16—18 (англ.)

1979

Выполнены неэмпирич. расчеты 8 низколежащих (4 синглетных и 4 триплетных) состояний молекулы дихлоркарбена CCl₂ (I) методом конфигурац. взаимодействия с учетом однократных и двукратных возбуждений валентных электронов и отбором конфигураций по теории возмущений. В расчетах применяли гауссов базис C (9s5p1d/4s2p1d), Cl (12s9p/6s5p). Найдено, что основным состоянием I является синглетное ¹A₁; низшее триплетное ³B₁ лежит выше на 0,83 эв, низшее возбужденное синглетное ¹B₁ — выше на 3,90 эв. Экстраполяция энергии дает для этих энергетич. разностей значения, состав., 0,74 и 3,82 эв. Дипольные моменты синглетных состояний I найдены равными 1,033 D(¹A₁) и 0,566 D(¹B₁). На основании полученных результатов дано отнесение полосы поглощения при 330 нм (3,76 эв), наблюдаемой при импульсном радилизе CCl₄, к переходу ¹A₁ → ¹B₁ в молекуле I.

КВ. Лекх,
1979

$\bar{\nu}_2 =$
a₃ 6690 cm⁻¹
A₁ 31455 cm⁻¹

2.1979, N 24

CCl₂

1073

ния

12 Д324. Теоретическое исследование электронного спектра молекулы CCl₂. На Тае-Кyu, Gremlich H.-U., Bühler R. E. A theoretical study of the electronic spectrum of CCl₂. «Chem. Phys. Lett.» 1979, 65, № 1, 16—18 (англ.)

С учетом конфигурационного взаимодействия рассчитаны ab initio параметры низколежащих состояний радикала CCl₂: ³B₁, ¹B₁, ³A₂, ¹A₂, ³A₁, ³B₂, ¹B₂. В области 240—340 нм методом импульсного фотолиза получена полоса поглощения радикала CCl₂, приписанная на основе расчетов системе переходов ¹A₁—¹B₁. В соответствии с результатами расчетов первое триплетное состояние ³B₁ лежит выше основного ¹A₁ на 0,83 эв. Библ. 18.
М. Т.

E_i; J_i



91979/112

CCl_2

Ref. max.
factor

1340
91: 131379X A theoretical study of the electronic spectrum of dichlorocarbene radical. Ha, Tae-Kyu; Gremlich, H. U.; Buehler, R. E. (Lab. Phys. Chem., Swiss Fed. Inst. Technol., Zurich, Switz.). *Chem. Phys. Lett.* 1979, 65(1), 16-18 (Eng). Ab initio CI calens. for some low-lying electronic states of the CCl_2 radical were carried out. The UV absorption band 330 nm obtained by the pulse radiolysis expt. is confirmed and assigned to the $^1A_1 \rightarrow ^1B_1$ transition. The calcd. transition energy is 3-8.4 nm. The 1st triplet state (3B_1) is 0.83 eV above the 1A_1 ground state.

Q.A.1949 G/N 16

CCl_2
 CFCl

2 Б181. Индуцируемые лазером спектры возбуждения флуоресценции радикалов CCl_2 и CFCl в газовой фазе. Tice J. J., Wamptter F. B., Rice W. W. Laser-induced fluorescence excitation spectra of CCl_2 and CFCl radicals in the gas phase. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 65, № 3, 425—428. (англ.)

Измерены индуцируемые лазером спектры возбуждения флуоресценции радикалов CCl_2 и CFCl в газовой фазе. Молекулы CCl_2 и CFCl получали при фотодиссоциации CCl_4 и CCl_3F под действием импульсного лазера на ArF (193,3 нм). Источником возбуждения спектров флуоресценции служил непрерывный перестраиваемый лазер на красителе. В области 490—560 нм спектра CCl_2 обнаружена прогрессия из шести полос со средним колебательным интервалом 307 см^{-1} . Эта прогрессия отнесена к деф. кол. ν_2 в верхнем электронном состоянии CCl_2 . Безстолкновительное время жизни флуоресценции CCl_2 оценено в 4,8 мкс. В случае

(+1) [X]

2.1680.112

1979
2506-112

С⁺Cl⁻, в спектрах возбуждения флуоресценции найдена система полос в области 360—390 нм со средним колебательным интервалом 392 см⁻¹, отнесенная к колебанию ν_2 в верхнем состоянии CFCl. Время жизни флуоресценции CFCl оценено в 800 псек. Полученные результаты, сравнены с матричными данными и отмечено их хорошее согласие. Скорость образования радикалов CCl₂ и CFCl согласуется с механизмом однофотонно-индуцируемой диссоциации. Слабое испускание, наблюдаемое при облучении систем только лазером на AgF, объяснено распадом электронно-возбужденных фрагментов CCl₂ или CFCl. При фотолизе CCl₄ и CClF₃ УФ-лазером в качестве продуктов найдены также молекулы CCl, CF и Cl₂.

С. Б. Осин

XIV-9052

1979

CCl₂
CFCl

2 Д720. Индуцированные лазером спектры возбуждения флуоресценции радикалов CCl₂ и CFCl в газовой фазе. Tice J. J., Wampler F. B., Rice W. W. Laser-induced fluorescence excitation spectra of CCl₂ and CFCl radicals in the gas phase. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 65, № 3, 425—428 (англ.).

Получены спектры возбуждения флуоресценции газообразных радикалов CCl₂ в области 490—560 нм и CFCl в области 360—390 нм. Радикалы получались в результате фотодиссоциации паров CCl₄ или CCl₃F в поле излучения эксимерного ArF-лазера ($\lambda=193,3$ нм). Спектры возбуждались перестраиваемым лазером на красителе. Проведен анализ колебательной структуры полос спектров. Отмечено согласие результатов работы с данными, полученными ранее для тех же радикалов, изолированных в матрицах инертных газов.

спектр
флуорес.(71) 

Ф.1980.12

Эррективнаа
потенуаа

1981

CCl_2

Rappe A. K., et al.

J. Phys. Chem., 1981,
85, N 12, 1662-1666.

( SiH_2 ; I)

CCl_2

1982

Tollenberger E.

Ber. Bunsenges. phys.

He;

Chem., 1982, 86, N3, 252-
- 261.

(ver. Cl_2 ; III)

CCl_2

1982

Sauer J., Černý R.,
Zahradník R.

Рачет
Спрук-
тур

Collect. Czech. Chem.
Commun., 1982, 47, 24,
1149-1168.

($\text{C}_{60}\text{SiH}_2$; III)

CCl_2^{2+}

1984

Leiter K., Stephan K.,
et al.

Al;

Plasma Chem. Plasma
Process. 1984, 4(4), 235-49.

(see CCl_3^{2+} ; III)

CCl_2^{2+}

1984

Leiter K.; Stephan K.,
et al.

Plasma Chem. and Plas-
ma Process., 1984, 4, N4,
235-249.

(cur. CCl_3^{2+} ; iii)

317

CCl_2

Om. 20270

1984

| 101: 180419d Laser-excitation spectrum of gas-phase dichlorocarbene (CCl_2). Predmore, David A.; Murray, Alice M.; Harmony, Marlin D. (Dep. Chem., Univ. Kansas, Lawrence, KS 66045 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1984, 110(2), 173-7 (Eng). The gas-phase laser-induced fluorescence-excitation spectrum of CCl_2 was obsd. at 498-534 nm. Sufficient resolu. was obtained to partially resolve the band structure arising from the sym. stretching and bending vibrations, which leads to vibrational parameters for these modes.

clap. boy;
clap. mp

c. A. 1984, 101, N 20

CCl_2

От. 20270

1984

4 Л472. Спектр лазерного возбуждения молекул CCl_2 в газовой фазе. Laser-excitation spectrum of gas-phase CCl_2 . Predmore David A., Murray Alice M., Harmony Marlin D. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 110, № 2, 173—177 (англ.)

Методом возбуждаемой лазером флуоресценции получен с высоким разрешением ($\sim 0,1 \text{ см}^{-1}$) спектр перехода $X^1A_1 - A^1B_1$ молекулы CCl_2 в газовой фазе. Молекулы CCl_2 генерировались путем пиролиза молекул $(\text{CH}_3)_3\text{SiCCl}_3$ в кварцевой кювете при t -ре $400-500^\circ \text{C}$. На основании колебательного анализа полученного спектра определены постоянные ω_{00} , ω_1^0 , ω_2^0 , x_{11}^0 , x_{12}^0 и x_{22}^0 молекулы CCl_2 в состоянии A^1B_1 . В. А. Е.

спектр, м.п.

Ф. 1985, 18, № 4.

CCl_2

Ом. 20 270

1984

4 Б4382. Спектр лазерного возбуждения CCl_2 в газовой фазе. Laser-excitation spectrum of gas-phase CCl_2 . Predmore David A., Murray Alice M., Harmony Marlin D. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 110, № 2, 173—177 (англ.)

С использованием импульсного перестраиваемого лазера на красителе (спектральная ширина 1 или $0,1 \text{ см}^{-1}$) в области 498—534 нм исследовали спектр возбуждения флуоресценции свободных радикалов CCl_2 , к-рые получали пиролизом паров $(\text{CH}_3)_3\text{SiCCl}_3$ при т-рах 400—550° С. Обнаружены полосы с максимумами при ~500, 508, 516, 524,5 и 533 нм перехода CCl_2 ($X^1A_1 - A^1B_1$) с частично разрешенной структурой, обусловленной симм. валентными и деформационными колебаниями (переходы $(\nu_1, \nu_2, 0) \leftarrow (0, 0, 0)$, где $\nu_1 = 1-4$, $\nu_2 = 0-6$). Определены колебат. параметры возбужденного электронного состояния (см^{-1}): ω_{00} 16920; ω_1^0 639; ω_2^0 305,4; x_{11}^0 —3,4; x_{12}^0 —1,8; x_{22}^0 0 и проведено их сопоставление с взятыми из лит-ры результатами теор. расчетов и с эксперим. результатами, полученными методом изоляции CCl_2 в тв. матрице.

В. Е. Скурат

$\nu_i, \text{м.п.}$

Х. 1985, 19, N 4.

CCl_2^+

1985

CCl_2^{2+}

Guenat C., Maquie F.,
et al.

recomp., Int. J. Mass Spectrom.
and Ion Process, 1985,

собр. кн.

63, N 2-3, 265-272.

(see CCl_4^{2+} ; III)

CCl_2
 CCl_2^+

Дм 21569

1985

20 Б1066. Неэмпирическое исследование электронного спектра дихлоркарбена CCl_2 . An ab initio study of the electronic spectrum of dichlorocarbene CCl_2 . Nguyen Minh Tho, Kerins Mary C., Hegarty Anthony F., Fitzpatrick Noel J. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 117, № 3, 295—300 (англ.)

Проведен расчет основного и ряда возбужденных электронных состояний молекулы CCl_2 . Геометрич. параметры и колебательные частоты основного состояния 1A_1 и низшего синглетного возбужденного состояния 1B_1 определены при расчете методом ССП в базисе 3—21ГФ*. Отмечено значит. изменение геометрии молекулы при переходе из состояния 1A_1 в состояние 1B_1 (межъядерное расстояние C—Cl уменьшается на 0,04 Å, угол ClCCl увеличивается на 19°). Энергии состояний 1A_1 и 1B_1 при равновесной геометрич. конфигурации состояния 1A_1 рассчитаны методами ССП, конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратно возбужденных конфи-

геометр.,
структура,
 ϵ_i, γ

х. 1985, 19, №20

гураций и по теории возмущений Меллера — Плессета 2-, 3- и 4-го порядков. Использованы базисы 3-21ГФ*, 6-31ГФ**, 6-31ГФ** и базисы Хузинаги — Даннига, дополненные одной и двумя поляризац. *d*-ф-циями на С и Cl. Для вертикальной энергии перехода ${}^1A_1 \rightarrow {}^1B_1$ получена оценка 1,95 эВ (эксперим. значение 2,10 эВ). С помощью теории возмущений в базисе 6-31ГФ** рассчитаны энергии синглетных и триплетных состояний CCl_2 и дублетных состояний CCl_2^+ . А. А. Сафонов



CCl_2

[Om. 21569]

1985

103: 61623x An ab initio study of the electronic spectrum of dichlorocarbene CCl_2 . Nguyen Minh Tho; Kerins, Mary C.; Hegarty, Anthony F.; Fitzpatrick, Noel J. (Dep. Chem., Univ. Coll., Dublin, Ire.). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 117(3), 295-300 (Eng). The lower-lying electronic states of dichlorocarbene were studied by ab initio methods at different levels of accuracy. For the $^1B_1 \leftarrow ^1A_1$ transition, the calcd. transition energy (1.95 eV) is in good agreement with the gas-phase value of 2.10 eV. The discrepancy with a previous ab initio CI study is discussed. The vibrational frequencies of CCl_2 in both 1A_1 and 1B_1 states were calcd. and compared with expt. The 1st 4 triplet and 4 cationic states were also examd.

ab initio
param

muatuek m-
co cmolek.

$^1A_1, ^1B_1, ^4mpu-$
nuema

C. A. 1985, 103, N 8.

CCl_2

(M. 22.328.)

1985

Rademann K., Fochims H.-W.,
Baumgärtel H.,

g. *J. Phys. Chem.*, 1985, 89,
N 16, 3459-3464.



CCl_2

1986

/ 20 Б4457. Образование радикалов $\text{CCl}_2(\bar{A}^1B_1)$ при фотолизе CCl_4 и CBrCl_3 под действием вакуумного УФ-излучения. $\text{CCl}_2(\bar{A}^1B_1)$ radical formation in VUV photolyses of CCl_4 and CBrCl_3 . Toshio Ibuki, Takahashi Norio, Hiraya Atsunari, Shobatake Kosuke. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 10, 5717—5722 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

спектр, $\bar{A}^1B_1$

При облучении CCl_4 и CBrCl_3 при давл. 10—140 мТорр светом 104,8 и 106,7 нм и 121,6 нм резонансных ламп, содержащих Ag или смесь 2% H_2 с 98% He соотв., наблюдали диффузную эмиссионную полосу в обл. 410—570 нм, к-рая приписана переходу $\text{CCl}_2(\bar{A}^1B_1 \rightarrow \bar{X}^1A_1)$ на основе измерений пороговых энергий ее возбуждения при использовании монохроматизированного синхротронного излучения. Затухание Фл $\text{CCl}_2(\bar{A}^1B_1)$ происходит с двумя характеристич. временами $2,17 \pm 0,26$ и $4,0 \pm 0,12$ мкс. Зависимость соотношения амплитуд этих двух компонент спада Фл от давл. указывает на наличие индуцированной столкновениями интеркомбинац. конверсии $^1B_1 \rightarrow ^3B_1$. Впервые измерены сечения поглощения света для CBrCl_3 в

(7) X

X. 1987, 19, N 20

CBrCl_3

(спектр)

обл. 106—200 нм и произведено предположит. отождествление ~~ридберговских~~ переходов. В. Е. Скурат

Cl₂

10m. 27760 "a"

1987

Carter E. A., Goddard W. A. III,

суммар-
иринем.
процент.,
теорет.
процент.

J. Phys. Chem., 1987,
91, N 18, 4651-4652.



Cl_2

(DM. 29833)

1987

Jug R., Schulz F.,

открытия
теор. рас-
чет.

J. Comput. Chem., 1987,
8, n^o 7, 1040-1050.

СССР Юм. 27.553 1987

Зюбима Т. С., Царкин О. П.,
Зюбин А. С.,

струк-
туро
и
стабильн.

Ж. Неорган. химии,
1987, 32, N 11, 2616-
● -2624.

1988
C₆₀ Carter Emily A.,
Goddard W. A. III.

ссылка - J. Chem. Phys. 1988,
принят. 88(3), 1752-63.
расценен.

(C₆₀ ● CH₂ ; III)

CCl_2

[om. 30490] 1988

Jacox M. E.,

Ti, Vi;

J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 336.

CCl_2^-

(DM-31024)

1988

Murray K.K., Leopold A.G.
et al.,

фотомэлектр.
спект

J. Chem. Phys. 1988, 89,
N 9, 5442-5453.

Photoelectron spectroscopy of
the halocar  bene anions

HCF^- , HCl^- , HCB_2^- , HCl^- ,
 CF_2^- , and CCl_2^- .

CCl_2

[Am. 33133]

1989

cremp,
cmprk-
mya

Choe Jong-In, Tanner S.R;
et al.,

J. Mol. Spectrosc. 1989,
138, N 2, 319-321.

Laser - Excitation spectrum
and structure of CCl_2 in a

Free - Jet Expansion from
a Heated Nozzle.

CCl_2

1989

13Б1166. Спектр лазерного возбуждения и структура CCl_2 при расширении в свободную струю из нагретого сопла. Laser-excitation spectrum and structure of CCl_2 in a free-jet expansion from a heated nozzle / Choe J. I., Tanner S. R., Harmony M. D. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 138, № 2.— С. 319—331.— Англ.

В области 497—533 нм измерен спектр лазерного возбуждения Фл (переход $\tilde{A}^1B_1(v_1v_20) \rightarrow \tilde{X}^1A_1(000)$; $v_1, v_2 = 0-4$) молекул CCl_2 охлажденных в сверхзвуковой струе. Радикалы CCl_2 получались пиролизом (500°C , нагретое сопло) $(\text{CH}_3)_3\text{SiCCl}_3$. Начало перехода

М.П.

Х. 1990, N 13

при $\nu_0 = 16912,85 \text{ см}^{-1}$. Значения колебат. постоянных
 состояния $\tilde{A}^1B_1$ (в см^{-1}): $\omega_1^0 = 643,628$, $\omega_2^0 = 307,977$,
 $x_{11}^0 = -4,02$, $x_{12}^0 = -2,137$, $x_{22}^0 = -0,308$. Из анализа
 вращат. структуры определены значения $A - \bar{B}$ для
 отдельных колебат. уровней (молекула рассматривалась
 как волчок, близкий к симм.). Среднее значение
 $(A - \bar{B})''_{000} = 1,805 \text{ см}^{-1}$; для состояния $\tilde{A}^1B_1 -$
 $-(A - \bar{B})'_{000} = 3,660 \text{ см}^{-1}$, параметры колебательно-вращат.
 взаимодействия — $\bar{\alpha}_1 = 0,105$, $\bar{\alpha}_2 = -0,142 \text{ см}^{-1}$.
 Рассчитаны геометр. параметры молекулы: состояние
 $\tilde{X} - R = 1,75 \pm 0,05 \text{ А}$, $\theta = 116 \pm 2^\circ$; состояние $\tilde{A} - R =$
 $= 1,78 \pm 0,05 \text{ А}$, $\theta = 136 \pm 2^\circ$.

В. М. Ковба

CCl_2

1989

111: 204446v Pyrolysis jet spectroscopy: rotationally resolved electronic spectrum of dichlorocarbene. Clouthier, Dennis J.; Karolczak, Jerzy (Dep. Chem., Univ. Kentucky, Lexington, KY 40506 USA). *J. Phys. Chem.* 1989, 93(22), 7542-4 (Eng). The rotationally resolved, gas-phase vibronic spectrum of dichlorocarbene was recorded by using the technique of pyrolysis jet spectroscopy. Well-resolved rotational lines of the various isotopomers were obsd., corresponding to a rotational temp. of 3-5 K. The transition is ${}^1B_1 \leftarrow {}^1A_1$ with a ground-state bond length of 1.71 Å and a bond angle of 109.36°.

Электронный
спектр,
вращатель

2 в осн. сост. <

С.А. 1989, 111, № 22

CCl_2

DM 33519

1989

19 Б1253. Миллиметровый и субмиллиметровый спектр дихлоркарбена CCl_2 : Определение электронной структуры из постоянных ядерного квадрупольного взаимодействия. The millimeter and submillimeter-wave spectrum of dichlorocarbene CCl_2 : Electronic structure estimated from the nuclear quadrupole coupling constants / Fujitake M., Hirota E. // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 6.— С. 3426—3430.— Англ.

На микроволновом спектрометре с модуляцией источника в областях частот 238—250 ГГц и 338—360 ГГц с точностью около 30 кГц измерен впервые вращат. спектр дихлоркарбена, $C^{35}Cl_2$, в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектра выполнен с использованием гамильтониана Уотсона в А-редукции с учетом квартичного и секстичного центробежного искажения и ^{35}Cl -ядерного квадрупольного взаимодействия. Определены вращат. постоянные в МГц $A=50229,425(65)$, $B=3695,3440(31)$, $C=3438,3633(32)$ и постоянные квадрупольного взаимодействия в МГц $\chi_{aa}=-22,61(132)$, $\chi_{bb}=17,40(85)$, $\chi_{bb}-\chi_{cc}=12,19(38)$. Из вращат. постоянных вычислены структурные параметры $r_0(C-Cl)=1,7157(28)$ А, $\theta_0(ClCCl)=109,2(3)^\circ$. Оценен ионный и π -характер C—Cl связи.

С. Н. Мурзин

М.Н.

X.1990, N19

CCl_2

Om 31890

1989

111: 67083h Photoabsorption spectrum and dichloromethylene ($\text{CCl}_2(\text{A}^1\text{B}_1)$) radical formation in the VUV excitation of hexachloroethane. Ihuki, Toshio; Hiraya, Atsunari; Shobatake, Kosuke (Inst. Chem. Res., Kyoto Univ., Uji, Japan 611). *Chem. Phys. Lett.* 1989, 157(6), 521-4 (Eng). The photoabsorption cross section and fluorescence excitation spectra of C_2Cl_6 were investigated at 105-200 nm using synchrotron as a light source. The absorption bands obsd. were assigned as the Rydberg excitations. The fluorescence yield starts at about 160 nm and increases to $\phi = 0.18$ at 111.5 nm. The emitting species is $\text{CCl}_2(\text{A}^1\text{B}_1 \rightarrow \text{X}^1\text{A}_1)$; its radiative lifetime is $1.83 \pm 0.02 \mu\text{s}$.

($\text{A}^1\text{B}_1 - \text{X}^1\text{A}_1$)
propose.

C.A. 1989, 111, N 8

CCl₂

от 31890

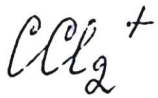
1989

11 Л343. Спектр фотопоглощения и образование радикалов $\text{CCl}_2(A^1B_1)$ при ВУФ-возбуждении C_2Cl_6 . Photoabsorption spectrum and $\text{CCl}_2(A^1B_1)$ radical formation in the VUV excitation of C_2Cl_6 / Ibuki Toshio, Hiraya Atsunari, Shobatake Kosuke // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 157, № 6.— С 521—524.— Англ.

Получены спектры возбуждения флуоресценции и сечения фотопоглощения молекулы C_2Cl_6 в области 105—200 нм с возбуждением синхротронным излучением. Наблюдаемые в спектре поглощения полосы отнесены переходами в ридберговские состояния. Квантовый выход флуоресценции растет от порога при 160 нм до значения 0,18 при 111,5 нм. Показано, что флуоресценция обусловлена переходом $A^1B_1 \rightarrow X^1A_1$ радикала CCl_2 . Радиационное время жизни верхнего состояния радикала составляет $1,83 \pm 0,02$ мкс. Определены также пороговые энергии образования радикала CCl_2 при различных каналах распада C_2Cl_6 . Е. П. Смирнов

л.л.

ф. 1989, № 11



1989

Leiter K., Scheier P.
et al.

поперечн.
сечение
ионизации

Int. J. Mass Spectrom.
Ion Processes 1989,
87(2), 209-24.

(ср. CF_2Cl^+ ; III)

CCL⁺

(DM 84365)

1990

Greenebele M.,

Mol. Phys. 1990, 69, N 3,
475-496.

Numerical potential functions for ● diatomic mo-

lecerles. The f -potentials of
 CF^+ and CCl^+ .

: CCl₂

1990

Shin Seung Koo,
Goddard III W. A. et al.

u.n. J. Phys. Chem. 1990. 94,
N18, C. 6963-6969.

(Ccl. ● : CHCl; III)

CCl_2

1990

Tokue Ikuo, Honda
Tomohisa, et al.

$(A_1' - \tilde{X} A_1')$ Chem. Phys. 1990,
140 (1), 157-65.

(cur. Cl_2 ; III)

CCl₂

4035 968

1991

114: 129633k Structure and energetics of the lowest 1A_1 and 1B_1 states of dichlorocarbene. Kim, Seung Joon; Hamilton, Tracy P.; Schaefer, Henry F., III (Cent. Comput. Quantum Chem., Univ. Georgia, Athens, GA 30602 USA). *J. Chem. Phys.* 1991, 94(3), 2063-7 (Eng). A recent partial structural anal. of spectroscopic measures by J. I. Choe et al. (1989) led to the conclusion that the first excited electronic state (1B_1 state) of CCl₂ has a longer bond distance than does the 1A_1 ground state. This is consistent with typical Franck-Condon pictures of diat. potential curves and with exptl. results for the analogous CF₂ system. However, the earlier theor. study of M. T. Nguyen et al. (1985) came to the qual. opposite conclusion, predicting the 1B_1 bond distance to be shorter by 0.044 Å, which agrees with the anal. of rotationally resolved spectra by D. J. Clouthier and J. Karolczak (1989). In this research high level ab initio quantum mech. methods are used to clarify this question. The most reliable values predicted here for the CCl₂ bond distances are $r_0 = 1.713$ Å (1A_1) and $r_0 = 1.657$ Å (1B_1). Large basis sets and high levels of electron correlation are required for excellent agreement with expt. in both structures and energies. The differences between CF₂ and CCl₂ in the behavior of the C-X bond length upon excitation is discussed. It is also argued that most closed shell carbenes are not two configuration problems.

2, <

pacien

C.A. 1991, 114, N14

CCl_2

1991

115: 192928w Laser-induced fluorescence excitation spectrum of dichlorocarbene (CCl_2) cooled in the supersonic jet. Chen, Yang; Lu, Qingzheng; Wang, Dongqing; Shen, Liusi; Wang, Hongfei; Zhang, Yunwu; Yu, Shuqin; Ma, Xingxiao (Dep. Mod. Chem., Univ. Sci. Technol. China, Hefei, Peop. Rep. China 230026). *Wuli Xuebao* 1991, 40(6), 885-90 (Ch). Laser-induced fluorescence excitation spectrum of gas-phase dichlorocarbene cooled in the supersonic jet was obsd. at 497-517 nm. The K -structure of the $(\nu_1, \nu_2, 0) - (0, 0, 0)$ vibrational bands was resolved. About 80 subbands were assigned. $\nu_1' = 643.5 \text{ cm}^{-1}$, $\nu_2' = 308.0 \text{ cm}^{-1}$ and the anharmonic consts. and $(a' - B') = 3.67 \text{ cm}^{-1}$, $(A'' - B'') = 1.80 \text{ cm}^{-1}$ were obtained from the anal. of spectra.

M.N.



C.A. 1991, 115, N18

СССР

DM 35872

1991

19 Б1333. Изучение вращательно разрешенного электронного спектра дихлоркарбена, полученного пиролизом, в сверхзвуковой струе. A pyrolysis jet spectroscopic study of the rotationally resolved electronic spectrum of dichlorocarbene / Clouthier D. J., Karolczak J. // J. Chem. Phys.— 1991.— 94, № 1.— С. 1—10.— Англ.

Дихлоркарбен (I) генерировали при пиролизе триметил(трихлорметил)силана в аргоне при давл. 1—3 атм и т-ре 500°С. Методом лазерной спектроскопии в сверхзвуковой струе изучен вращательно разрешенный колебательно-электронный спектр I. Полоса при 17255,67 см⁻¹ отнесена к электронному переходу $\tilde{A}^1B_1 - \tilde{X}^1A_1$. Наблюдаемые колебат. частоты в основном и возбужденном состояниях близки к соотв-щим лит. данным, полученным методом матричной изоляции. Возбужденный I имеет угол ClCCl, равный 131,4°, и длину связи CCl, равную 1,652 А. Дипольный момент перехода перпендикулярен плоскости молекулы. Основное состояние дихлоркарбена синглетно. Н. В. Чуканов

спектр

X. 1991, n 19

Cl_2^-

(DM-36436)

1991

Butsev G. L., Ziegler T.

Can. J. Chem. 1991, 69,
993-999.

сфрыкappa
Ne

$\frac{\text{Cl}_2}{(\text{Ar})}$

The structure of the Cl_n^-
($n=1-4$) anions and electro-
nic affi  nities of the

corresponding neutrals.

CCl_2

Gutsev B. L., 1991
Liegler T.

полупр.,
электрох.
свойства

J. Phys. Chem. 1991.
95, N 19. С. 7220-
-7228.

● (см. СН; III)

CCl₂

1991

2. 20 Б1091. Структура и энергетика низших 1A_1 - и 1B_1 -состояний дихлоркарбена. Structure and energetics of the lowest 1A_1 and 1B_1 states of dichlorocarbene / Kim Seung-Joon, Hamilton Tracy P., Schaefer Henry F. // J. Chem. Phys.— 1991.— 94, № 3.— С. 2063—2067. — Англ.

Методами ССП МО и конфигурац. вз-вия с учетом 1- и 2-кратных возбуждений оптимизированы геометрии низших синглетных состояний CCl₂ (I) — 1A_1 и 1B_1 . Используются двухэкспонентный поляризованный и трехэкспонентный дважды поляризованный базисы, а в методе ССП — также [7s6p2d1f/6s4p2d1f]. Методом ССП рассчитаны гармонич. колебат. частоты и ИК-интенсивности обоих состояний. Наиболее точные длины связи CCl, предсказываемые авторами, составляют 1,713 (1A_1) и 1,657 Å (1B_1). Расчетная адиабатич. разность энергий 1A_1 и 1B_1 17 300 см⁻¹ хорошо согласуется с эксперим. величиной 16 920 см⁻¹. Обсуждается различное поведение длин связей I и CF₂ при возбуждении.

В. Я. Беспалов

М.П.

X. 1991, N 20

CCl₂

(DM 35 504)

1991

спектр
примесей,
 ν_1, ν_2 ,
распредел.
по частотам.

C.A. 1991, 114, N 24

114:236258s Laser-induced fluorescence excitation spectrum of dichloromethylene (CCl₂) cooled in a supersonic free jet. Lu, Qingzheng; Chen, Yang; Wang, Dongqing; Zhang, Yunwu; Yu, Shuqin; Chen, Congxiang; Koshi, Mitsuo; Matsui, Hiroyuki; Koda, Seiichiro; Ma, Xingxiao (Dep. Mod. Chem., Univ. Sci. Technol. China, Hefei, Peop. Rep. China 230026). *Chem. Phys. Lett.* 1991, 178(5-6), 517-22 (Eng). Laser-induced fluorescence (LIF) excitation spectrum of gas-phase dichlorocarbene (CCl₂) cooled in a supersonic free jet has been obsd. in the wavelength range of 497-517 nm. The K-structure was clearly resolved. About 80 subbands were assigned to $(\nu_1, \nu_2, 0) \leftarrow (0, 0, 0)$ vibronic transitions. The vibrational frequencies of $\nu'_1 = 643.5$ cm⁻¹, $\nu''_2 = 308.0$ cm⁻¹ and their anharmonic consts. were obtained. Furthermore, the rotational data $A'-B' = 3.67$ cm⁻¹, $A''-B'' = 1.80$ cm⁻¹ were deduced from the spectral anal.

$\text{CCl}_2(\text{Do})$ 1991
Paulino J. A.; Squires R. R.,

$\Delta_f H^\circ_{298}$ J. Amer. Chem. Soc. 1991.
113, N 15. C. 5573-5580.

(see CF_2 ; 1)

CCl₂

М. 36922

1992

7 5 Б1129. Эмиссионный спектр CCl₂ в газовой фазе /Chen Yang, Lu Qing-zheng, Ma Xing-xiao, Cui Zhi-feng, Zhao Xian-zhang, Lu Tong-xing //Wuli xuebao = Acta phys. sin. .—1992 .—41 ,№ 10 .—С. 1582—1589 .—Кит. ;рез. англ.

В зоне разряда постоянного тока в парах CCl₄ наблюдали эмиссионный спектр в области 520—630 нм, приписанный переходу CCl₂(A→X). Произведено отождествление ~400 полос переходов $(\nu'_1, \nu'_2, 0) \rightarrow (\nu''_1, \nu''_2, 0)$ молекул ³⁵Cl—C—³⁵Cl и ³⁵Cl—C—³⁷Cl и составлены таблицы Деландра. Определены колебат. частоты ν_1, ν_2 и их изотопные сдвиги.

В. Е. Скурат

М.П.

X. 1994, N 5

CCl₂

Om. 36 922

1992

(A-X)

118: 201405q Emission spectrum of gas-phase carbon dichloride (CCl₂). Chen, Yang; Lu, Qingzheng; Ma, Xingxiao; Cui, Zhifeng; Zhao, Xianzhang; Lu, Tongxing (Dep. Mod. Chem., Univ. Sci. Technol. China, Hefei, Peop. Rep. China 230026). *Wuli Xuebao* 1992, 41(10), 1582-9 (Ch). In d.c. discharge of CCl₄ vapor, the emission spectrum from 520 to 630 nm was obsd. and identified as the A → X transition of CCl₂ radical. About 400 bands were assigned to ($\nu_1, \nu, 0$) → ($\nu''_1, \nu''_2, 0$) progressions of ³⁵Cl-C-³⁵Cl and ³⁵Cl-C-³⁷Cl, and tabulated to Deslandres tables. Spectral anal. gave out the vibrational frequencies ν_1, ν_2 and their isotopic shifts in which the data of gas-phase CCl₂ in ground state were not found yet in literatures.

C. A. 1993, 118, N20

CCl_2

1992

Irikura Karl K.,
Goddard W.A., (III). et al.

et al. J. Amer. Chem. Soc. 1992,
114, n. l. c. 48-51.

(car. ● CH_2 ; III)

CCl_2

1992

Russo Nino, Sicìlia E,
et al.

конспект,
1992

J. Chem. Phys. 1992,
97, N 7. C. 5031.

комбам.
1992 смк

( CH_2 ; III)

Cl₂

1993

Loeb A., Frenking B.,

низшие
сериум-
и
трипл-
состоян,
теорет-
расчет

Bull. Chem. Soc. Jpn.,
1993, 66 (11), 3153-65

(см. NF_2^+ ; III)

CCl_2

(Dm 38.994)

1997

молекула,
стр-ра,
координат.
застопк,
 $\Delta_f H$

Byeong-seo Cheong*,
and Han-Book Cho,
J. Phys. Chem., A 1997,
101, 7901-06.

CCl_2

(OM. 39136)

1997

Josefundo R. Pileto Jr., et al.,

Ap. y. Chem. Soc., Faraday Trans.,
1997, 93 (10), 1881-1883.
Absolute proton affinity
and basicity of the
carbenes CH_2 , CF_2 , CCl_2 ,

$C(OH)_2$, $FCOH$, CPh_2 and
of isopropylidene.

CCl_2^-

Lugez, C. h.; et al., ¹⁹⁹⁸

лек в
матрице

J. Chem. Phys. 1998,
109 (17), 7147-56

(all. CCl^+ , III), ●

131:134914 Structure and Energetics of Group 14 (IV-
A) Halides: A Compara

Density Functional-Pseudopotential Study. Escalante,
Sigfrido; Vargas,

Rubicelia; Vela, Alberto (Departamento de Quimica
Inorganica Posgrado Fac de Quimica, Universidad Nacional
Autonoma de Mexico, Mexico D.F. 04510, M J. Phys. Chem.
A, 103(28), 5590-5601 (English) The complete set of MX₂
and MX₄ (M = C, Si, Ge, Sn, Pb and X = F, Cl, Br, group
14 halides are studied with d. functional theory and
quasirelativis effective core potentials. To analyze
the role of d. inhomogeneities and asymptotic behavior
of the Kohn-Sham effective potential in these mols.,
following exchange-correlation energy functionals are
tested: local, semi (generalized gradient), and hybrid

C. A. 1999, 131

functionals. For comparison, Hartree- results are also presented. Fully optimized geometries are in very good agreement with exptl. available data and with other high-level theor. cal The energy differences assocd. with the dissocn. and disproportionation reactions are reported. Zero-point corrections and at. spin-orbit effects included in these reaction energies. The dissocn. energies predicted at Hartree-Fock level are underestimated, the local energy differences are overestimated, and both the semilocal and hybrid approaches provide the b ests. for these reaction energies. The disproportionation energies, whic commonly used to explore the relative stability of different at. valences a behavior that departs from that commonly known for reactions involving single atom: the local and semilocal disproportionation energies have ver similar values and follow the same trends.

CCl_2

[On. 40107]

1999

ab initio
reorient,
konstant-
ta cmo m,
 ΔfH
(paper)

Martin Schwartz[†] and
Paul Marshall[†]

J. Phys. Chem. A 1999
103, 7800 - 7906

CCl_2^-

(DM-40099)

1999

Rebecca L. Schwartz,
Gustavo E. Davico et al.

J. Phys. Chem.; 1999,
A103, 8213-21.

Singlet-Triplet Splittings
in $\text{C}X_2$ ($X = \text{F, Cl, Br, I}$)

Dihalocarbenes via Negative
Ion Photoelectron Spectroscopy

CCl_2

$[0m. 402578'']$

2000

Edmond P. F. Lee, et al.,

Chem. Phys. Lett. 2000,
326, 143-150.

The lowest triplet gap • singlet -
in $\text{CCl}_2, \text{CH}_2$.

and Co.

F: CCl₂

P: 3

2000

132:214053 Spectroscopic constants of the X(1A₁), a(3B₁), and A(1B₁) stat of CF₂, CCl₂, and CBr₂ and heats of formation of selected halocarbenes: a initio quantum chemical study.

Sendt, Karina; Bacskey, George B.

School of Chemistry, University of Sydney

Sydney 2006, Australia J. Chem. Phys., 112(5), 2227-2238 (English) 2000 The geometries, rotational consts., harmonic force consts. and frequencies, dissocn. and term energies of CF₂, CCl₂, and CBr₂ in their r X(1A₁), a(3B₁) and A(1B₁) states, computed by complete active space SCF (CASSCF), complete active space 2nd-order perturbation (CASPT2), and coup cluster [CCSD(T)] methods and cc-pVTZ basis sets, are reported.

For CCl₂ and CBr₂ the barr to linearity are characterized. The computed spectroscopic consts. are i good agreement with the available exptl. data. The



C.A 2000, 132

atomization energies hence heats of formation at 0 and 298 K of these mols. and of CHF, CHCl, CFC1, all in their lowest singlet ground states were computed by the CCSD method using basis sets ranging from cc-pVDZ to aug-cc-pVQZ, cc-pCVQZ and G3large, enabling the extrapolation of the energies to a complete basis s (CBS) limit and the inclusion of core-valence correlation (with the excep of CBr2). Scalar relativistic corrections, computed by CASPT2, were take into account. The final CBS results (in kJ mol⁻¹) are .DELTA.fH2980(CHF) 147 .+-. 4, .DELTA.fH2980(CHCl) = 320 .+-. 4, .DELTA.fH2980(CFC1) = 29 .+ 4, .DELTA.fH2980(CCl2) = 229 .+-. 4, and .DELTA.fH2980(CBr2) = 337 .+-. 8 The GAUSSIAN-3 (G3) heats of formation of these mols. are within 2 kJ mol of the CBS values, representing significant improvement over the GAUSSIAN predictions which differ from the CBS results by up to ~10 kJ mol⁻¹. Similarly, the G3 triplet/singlet energy sepns. are in agreement with tho obtained at the CCSD(T)/cc-pVQZ level of theory including core-valence correlation corrections, as well as expt.
