

C₂YM5

D (CH_3J , $\text{C}_2\text{H}_5\text{J}$)

1442

1929

Iredale T., Wallace W.N.W.

Phil.Mag./7/, 8, 1093-9 (1929)

"Heats of dissóciation and

...

C.A., 1930, 4221

M, H₂O

C_2H_5

1441

E Chazy (CH₃J, CH₃Br, C₂H₅J, 1930
C₂H₅Br)

Iredale T., Mills A.G.

Nature 1930, 126, 604,

"Energies of the C-J and C-Br bonds"

C.A., 1931, 24⁹

Ka.

C₂H₅J

C_2H_5I

1933

Bull L.

Anales Soc. espan fis.

(2) Quim., 1933, 31, 115-21.

(cur. C_2H_5Cl ; III)

C_2H_5I

BP - 4972 - IV

1935

(Y)

Price W.C.

pp 365-66

4972

1936

C_2H_5J , C_2H_5Br (J), C_2H_5Cl

Price W.C.

J. Chem. Phys., 1936, 4, 547-51

The far ultraviolet...

J



C_2H_5

C_2H_5J .

Bp - 7433-IV

1940

(E_c)

Butler E. T.

Polanyi M.

"Nature"
1940, N 3691 p 129.

1457

1946

CH_3J ; $\text{C}_2\text{H}_5\text{J}$; (mol. crypotype)

Lorino Y., Kimura H., Hasegawa H.
 J. Chem. Soc. Japan., 1946, 57,
 115-116

Studies on the structure of gas
 molecules by ...

C2H5



CA., 1950, 44, 10413f

$C_2H_5J^+$

(7)

B92-3365-1

Marrison J. D. 1951.
"J. Chem. Phys."
1951, 19, N10, 1305-8.

325 1957
 $\text{CO}, \text{O}_2, \text{NO}, \text{Cl}_2, \text{Br}_2, \text{I}_2, \text{HCl}, \text{HBr}, \text{HI}, \text{H}_2\text{O}, \text{H}_2\text{S}, \text{I957}$
 $\text{CO}_2, \text{SO}_2, \text{CS}_2, \text{N}_2\text{O}, \text{NO}_2, \text{O}_3, \text{NH}_3, \text{CH}_4, \text{C}_2\text{H}_6, \text{CH}_3\text{Cl},$
 $\text{CH}_3\text{Br}, \text{CH}_3\text{I}, \text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}, \text{C}_2\text{H}_5\text{Br}, \text{C}_2\text{H}_5\text{I}, \text{CH}_2\text{Cl}_2, \text{CHCl}_3,$
 $\text{CCl}_4, \text{C}_2\text{H}_4, \text{C}_2\text{Cl}_3\text{H}, \text{C}_2\text{H}_2, \text{CH}_3\text{OH}, \text{C}_2\text{H}_5\text{OH} (\text{I})$

Watanabe K.,

J. Chem. Phys., 1957, 26, N 3, 542-547 (англ)

Потенциалы ионизаций некоторых молекул.

РЖХ, 1957, № 24,
76390

Всё гр. к.

$\text{Cl}_2, \text{Br}_2, \text{I}_2, \text{HCl}, \text{HBr}, \text{HI},$ (Z, D)

$\text{CH}_3\text{Cl}, \text{CH}_3\text{Br}, \text{CH}_3\text{I}, \text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}$

$\text{C}_2\text{H}_5\text{Br}, \text{C}_2\text{H}_5\text{I}, \text{CF}_4, \text{CClF}_3, \text{CCl}_2\text{F}_2,$

$\text{CCl}_3\text{F}, \text{CF}_4, \text{C}_2\text{F}_6$

Воробьев А.А., Калганов А.Ф.

Ж. физ. химии, 1957, 31, № 7, 1455-1458
(рез.англ.)

Энергетические соотношения при протекании
газов.

РЖХИ м., 1958, № 9,

2808I

C_2H_5

1428

1958

CH_3J , $\text{C}_2\text{H}_5\text{J}$, $\text{C}_2\text{H}_5\text{Br}$ (γ i)

Astoin M., Granier J., Cordier M.,

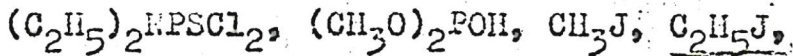
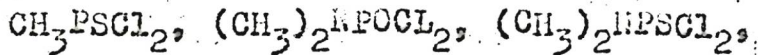
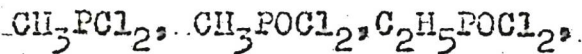
J. phys. et radium, 1958, 19,
N 4, 507-508 (opam)

PX., 1959, N 7,
22214

C_2H_5

2018

1958



(v i)

McIvor R.A., Hubley C.E., Grant G.A.,
Grey A.A.

Canad. J. Chem., 1958, 36, 11 5, 820-834

Инфракрасные спектры ...

C_2H_5

C2H5J

Bq - 4970 - IV

11960

7 Microwave spectrum of EtI. I. Takahiro Kasuya and Takeshi Oka (Univ. Tokyo). *J. Phys. Soc. Japan* 15, 296-303 (1960); *CA* 55, 16149i.—The following rotational consts. were obtained: $A = 29,106.2 \pm 0.5$ Mc./sec., $B = 2979.2 \pm 0.1$ Mc./sec., and $C = 2797.1 \pm 0.1$ Mc./sec., which led to the structure $d_{CI} = 2.139 \pm 0.005$ A. and $\angle CCI = 112^\circ 10' \pm 20'$, with the assumption of $d_{CO} = 1.54$ A. The calcn. of the 2nd-order quadrupole effects for a slightly asymmetric mol. with a plane of symmetry gave the asymmetry parameter $\eta = (q_{bb} - q_{cc})/q_{aa}$ of 0.205 ± 0.005 and $\xi = q_{ab}/q_{aa}$ of -0.57 ± 0.05 , as well as the coupling const. eqQ of -1771 ± 10 Mc./sec. along the C—I bond. The components of the elec. dipole moment were $\mu_a = 1.75 \pm 0.05$ D and $\mu_b = 0.25 \pm 0.1$ D. Centrifugal consts. were detd. as $D_K = 0.36 \pm 0.05$ Mc./sec., $D_{JK} = -0.151 \pm 0.005$ Mc./sec., and $D_J < 0.05$ Mc./sec.

Norman E. Pickering

C.A. 1961, 53, 19.
18306e

C_2H_5J

-м.в.

Вр-4970-15

1960

18B115. Микроволновый спектр йодистого этила. I. Kasuya Takahiro, Oka Takeshi. Microwave spectrum of ethyl iodide. I. «J. Phys. Soc. Japan», 1960, 15, № 2, 296—303 (англ.).—Исследован вращательный спектр молекулы C_2H_5J в области частот 5—30 кМгц. Измерены вращательные постоянные, по которым определено расстояние C—J $2,139 \pm 0,005$ А и угол CСJ $112^\circ 10' \pm 20'$ в предположении, что C—C 1,54 А. Теоретич. расчет квадрупольного эффекта второго порядка для слегка асимметричной молекулы с плоскостью симметрии позволили определить постоянные квадрупольного взаимодействия. Для связи C—J найдены $eQq = 1771 \pm 10$ Мгц и ионный характер 9%. По эффекту Штарка перехода $0_{00}—1_{01}$ определен дипольный момент $1,77 \pm 0,1$ D.

Г. Шипуло

жс. 1962.18

1960

11-01.55-дс

C₂H₅J
мв.

10B217. Микроволновый спектр йодистого этила.
 Ч. I. Kasuya Takahiro, Oka Takeshi. Microwave spectrum of ethyl iodide. I. «J. Phys. Soc. Japan», 1960, 15, № 2, 296—303 (англ.).—С помощью спектрометра со штарковской модуляцией в области 5—30 кМгц изучен микроволн. спектр йодистого этила C₂H₅J. Измерены вращательные и центробежные константы. Предполагается, что расстояние CC равно 1,54 Å, авторы нашли расстояние CI = $2,139 \pm 0,005$ Å и угол $\angle CCI = 112^\circ 10' \pm 20'$. Из расчета квадрупольного эффекта 2-го порядка для слабо асимметричных молекул с плоскостью симметрии определены параметр асимметрии и константа квадрупольной связи вдоль CI. Измерены компоненты электрич. дипольного момента, которые оказались равными $\mu_a = 1,75 \pm 0,05$ и $\mu_b = 0,25 \pm 0,1$ ед. Дебая.

см. н/об.

ф. 1961-10.

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{I}$ Roncin J. J. et al. 1962

спектр
поглощ. Spectrochim. Acta, 1962, 18,
N 7, 907.

Спектры поглощения неко-
торых органических ве-
ществ в жидком виде
и в растворах в гомогенной

№ - абласии.

(Сое. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Br}$)

C₂H₅-I

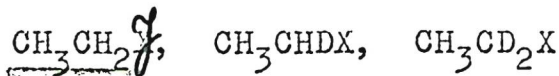
1390-7921-IV

1963

Hartley D.B., Benson S.W

"J. Chem Phys", 39, v1, 1963

спектр.
связи

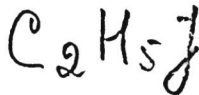


X - галоген (V_i)

Демиденкова И.В.
Тр. Гос. Ин-та Прикл. Химии, 1964,
№ 52, 157-8

Инфракрасные спектры. Этилгалогенидов
дейтерированных в метильных группах

J



СА., 1965, 63, N11,
14230g

C_2H_5J

| Bp- M 35- IV | 1964

Lielmers &
Morgan & P.

(V.)

"Nature", 1964, N 4937,

(Y)

202

1106-7.

M 1520

1965

V: ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{X}$, CH_2X

X = Cl, Br, I)

McDevitt N.T., Rozek A.L.,
Bentley F.F., Davidson A.D.

J.Chem.Phys., 1965, 42, N 4, 1173-1182

Infrared-absorption spectra of
chlorobromo- and iodoalkanes in the
400-to -100 μ region

~~PX., 1966, 2042~~ J

PX., 1966, 95200

C_2HCl

M2006

1965

CH_3J , $\text{C}_2\text{H}_5\text{J}$ (v)

Shaufel R.F., Goodman L.,

Trans. Faraday Soc., 1965, ~~61, No 4, 597-609~~

61, No 4, 597-609

Far ultraviolet absorption by....

J

RJXim, 1965

C₂H₅I

1966

320

Observation of $\Delta J = 3$ forbidden transition in ethyl iodide by the use of double resonance. Takeshi Oka (Natl. Res. Council, Ottawa, Can.). *J. Chem. Phys.* 45(2), 752-3(1966)(Eng). In EtI, the forbidden $\Delta J = \pm 3$ transitions are allowed weakly. The microwave double-resonance technique was used for the observation of these transitions. The 3-level scheme, observed frequencies, and calcd. intensities of the transitions are given.

W. W. Brown

C. A. 1966. 65. 10
14673 ab

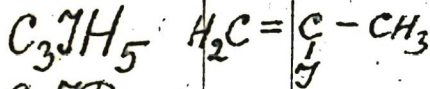
C₂H₅-Y

mepru
cb. esu

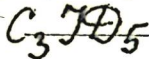
1968
Williams Y.M., et al.

J. Chem. Phys., 1968,
49, ~ 10, 4467.

(C₂H₅⁺)I



1969



check mp

91922m Infrared spectra and normal coordinate treatment of 2-iodopropene-d₀ and -d₅. Meyer, Rolf; Hunziker, Heinrich; Guenthard, Hans H. (Swiss Fed. Inst. Technol., Zurich, Switz.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1969, 25(1), 295-9 (Eng). Spectra for H₂C:CI Me in the range 4000-170 cm.⁻¹ and for D₂C:CI CD₂ in the range 4000-120 cm.⁻¹ are shown. The assignment of fundamentals presented has been obtained by comparison with the spectra of the homologous chloro and bromo compds., and from normal coordinate calcns. Tentative assignments of binary combination bands are given by simple comparison with sums and differences of observed fundamental frequencies. The C-I stretching force const. is $(1.800 \pm 0.085) \times 10^5$ dynes/cm. The calcd. normal frequencies and approx. descriptions of the calcd. modes are given.

JDJN

C. A. 1969. 70. 20

1969

Служ
25

Л. В. Сидорова

9 Д404. Дальнейший анализ микроволнового спектра винилиодида. Moloney Michael J. Further analysis of the vinyl iodide microwave spectrum. «J. Chem. Phys.», 1969, 50, № 5, 1981—1984 (англ.)

Проведено более точное измерение недиагонального элемента тензора квадрупольного взаимодействия χ_{ab} и инерциального дефекта Δ . Отмечено, что пренебрежение Δ влечет за собой заметные ошибки в определении структурных параметров молекул. Значение Δ согласуется с вычисленным по данным ИК-спектроскопии значением в приближении метода Гершбаха и Лори (РЖФиз, 1965, 1Д62). Установлено: $\chi_{ab} = -710 \pm 25$ Мгц; $\Delta = 0,24 \pm 0,08$ ат. ед. $\text{\AA}^2$. Г. П.

ф. 1969. 95

C₂H₃I

1969

22 Б280. Дальнейший анализ микроволнового спектра винилйодида. Moloney Michael J. Further analysis of the vinyl iodide microwave spectrum. «J. Chem. Phys.», 1969, 50, № 5, 1981—1984 (англ.)

Вновь анализированы лит. данные по МВ-спектру винилйодида, (см. РЖХим, 1955, № 14, 42404). Определены вращательные постоянные $A = (53,3 \pm 0,4) \cdot 10^4$, $B = 3258,72 \pm 0,03$, $C = 3066,66 \pm 0,03$ Мгц и дефект инерции $\Delta = 0,24 \pm 0,08$ ат. ед. массы A^2 . Из квадрупольной СТС двух вращательных переходов вычислены постоянные квадрупольной связи $\chi_{aa} = 1654,3 \pm 1$, $\chi_{bb} = 768,8 \pm 1$, $\chi_{ab} = -710 \pm 25$ Мгц. Путем диагонализации тензора χ найдены его главные значения $\chi_{aa} = -1847$ и $\chi_{\beta\beta} = 962$ Мгц.

М. Р. Алиев

X. 1969. 22

C_2H_5I

Winter F.
Hummel, D. O.

XIV-2346/1969

ИК-спектр

Spectrochim. acta, A25,
N 2, 425

(corr. C_2H_5Cl) III

C_2H_5I

Kinuwaki S.
Kozuka M.

1970

Bull. Chem. Soc. Jap.,
43 (12), 3933.

сери
номеру.

8694-111X

(C_2H_5F) III

1971.

C_2H_5I (78) Durig, James.;
et al.

(vi) "J. Chem. Phys.", 1971,
54, n2, 460-70.

● (cell. C_2H_5Cl ; III).

C_2F_5I

Bp-4306-XIV

1972

geomet.
conf.

Bauer S. H. et al.

J. Phys. Chem.

1972, 46, 3099-3108

C₂H₅J

1973

Vi

Barnes Austin J. et al.

"J. Chem. Soc. Faraday Trans.,"

1973, Part 2, 69, N5, 738-749.

● (cm . CH₃F; III)

40306.8435

 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{I}$

1973

Ch, TE, Ph

41125

1846

И.Р. Савицкий; С.С. Лоб. и др.

Crowder G.A.

Infrared spectra and vibrational analysis of ethyl iodide and some deuterated derivatives. "J. Mol. Spectrosc.", 1973, 48, N 3, 467-474

(англ.)

0057 0000

045 046

50

ВИНИТИ

оттиск 1846

1973

 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{J}$

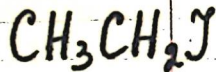
15 Б298. Инфракрасные спектры и колебательный анализ этилйодида и некоторых его дейтеропроизводных. Growder G. A. Infrared spectra and vibrational analysis of ethyl iodide and some deuterated derivatives. «J. Mol. Spectrosc.», 1973, 48, № 3, 467—474 (англ.)

и.к. спектр

Измерены ИК-спектры $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{J}$ (I), $\text{CH}_3\text{CD}_2\text{J}$ (II), $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{J}$ (III) и $\text{CD}_3\text{CD}_2\text{J}$ (IV) (жидкости) в области 4000—400 см^{-1} . Проведен анализ нормальных координат I—IV и вычислены силовые постоянные в валентно-силовом поле, состоящем из 28 параметров. В качестве нулевого приближения использованы силовые постоянные этилхлорида (V) и йодацетонитрила. Среднее отклонение вычисленных частот I—IV от экспериментальных после вариации не превышает 5 см^{-1} , максим. отклонение — 21 см^{-1} . Окончательные силовые постоянные I—IV отличаются от соотв-щих величин в V, что обусловлено несколько различной природой связей в группах CH_2Cl и CH_2J . Колебания I—IV, как показал расчет, в значит. степени смешаны. На основании результатов расчета, изотопич. сдвигов и аналогии с V предложено отнесение колебаний I—IV (симметрия C_s).

Е. Разумова

21974 №15



1974

(40)

Lombardi E., et al.
J. Chem. Phys. 1974,
61, N3, 894-901.

(as. C_2H_6 ; III)

C_2H_5I

Salahud D. R.

1974

фотом.
спектр.

"Chem. Spectroscopy and Photochem
Vacuum-Ultraviolet"
Dordrecht - Boston, 1974, 191-195
(англ.)

● (англ. C_2H_5I ; III)

C_2H_5I

1974.

Вовна В.И., Лопаткин С.Н.;
и др.

[7]

"Оптика и спектроскопия"
1974, 36 (1), 173-78.

(см. H_2O ; I)

50129.3049

Ch, Ph, TC

966/15 09 1975
 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{I}$ (и к скар) 4-8045

Durig J.R., Thompson J.W., Thyagesan V.,
Witt J.D. Vibrational spectra of methyl
iodides. "J. Mol. Struct.", 1975,
24, N 1, 41-58

(англ.)

XIV-6220

261 263 2 8 3: 0291 пик ВИНТИ

51127.1995

Ex-C, TC, Ch

 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{I}$

31603

1975

3463

McKean D.C., Saur O., Travert J., Lavalley J.C. Isolated CH stretching frequencies, CH bond lengths and strengths in ethyl and isopropyl halides.

"Spectrochim. acta", 1975, A 31, N 11,

1713-1719

(англ.)

0437 гик

480 482

4 8 9

ВИНИТИ

71227.2580

43929

1976

Ch, Ph, TC, C

 CH_3CH_2I

[CFT] 5903

Dellepiane G., Piseri L., Bosi P.

Improved determination of Barrier heights from self-consistent harmonic approximation. "Spectrosc. Lett.", 1976, 9, N 12, 981-884 (англ.)

0002 пак

839.848

1. 0231

ВИНИТИ

70413.3761
Ex-C, Ph, Ch,
TC, MGU

переселен
56701

1977

C₂F₅I

X-17998

Comes F.J., Pionteck S. Photodissocia-
tion of perfluoroaethyliodide. "Ber.
Bunsenges. phys. Chem.", 1977, 81, N 2,
219-221 (англ.)

0852 кк

834 836

ВИНИТИ

$C_2H_5^Y$

1977

Spence David
J. Chem. Phys 1977, 66,
NL, 669-674 (ann.)

(Ei)

coll. HCl - III

C₂H₅-J omniuek 6065 1978

Baker N. L., et al.

J. Mol. Spectrosc., 1978.

69, 211-224.

The First s-Rydberg
Transition...

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{J}$

1979

23 Б229. Параметр ферми-резонансного взаимодействия в метилиодиде, метилиодиде- d_3 и этилиодиде. Nagel V. B., Binner R., Fruwert J. Fermiresonanz-Parameter von Methyljodid, Methyljodid- d_3 und Äthyljodid. «Z. phys. Chem.» (DDR), 1979, 260, № 2, 376—382 (нем.)

Спектр
и к. поглощ.

Изучена область симм. вал. кол. ν_1 групп CH_3 и CD_3 в спектрах ИК-поглощения CH_3J , CD_3J и $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{J}$ в газ. и жидк. состоянии, а также в р-рах в CCl_4 , C_2Cl_4 и CHCl_3 . Переход от газа к жидкости и смена р-рителей приводят к изменению условий ферми-резонансного взаимодействия ν_1 с обертоном $2\nu_5$ асимм. деф. кол. групп CH_3 и CD_3 . Из полученных данных рассчитаны значения невозмущенных частот, их интенсивности и параметр ферми-резонансного взаимодействия W_{ni} . Уточнены значения частот колебаний $\nu_3 + \nu_5 + \nu_6$ и $2\nu_5$, попадающих в область ферми-резонансного дублета.

А. В. Бобров



2.1979, №23

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{I}$

$\text{I}^{\text{a}}; \text{M. n}; \text{No}$

ВФ-ХИ-9310

Ф 1980 № 9

9 Д456. Микроволновый спектр йодистого этила. Исследование внутреннего вращения. Microwave spectrum of ethyl iodide. Internal rotation analysis. Boucher D., Dubrulle A., Demaison J. «Z. Naturforsch.», 1980, A35, № 4, 442—446 (англ.)

Исследован микроволновый спектр $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{I}$ (I) в области 5—80 Гц. Исследования проводились на штатковом спектрометре с частотой модуляции 25 кГц в 8-м кювете при давл. $\sim 5 \cdot 10^{-3}$ мм рт. ст. и t -ре — 50°C . Идентифицированы R_{01} - и bQ -переходы для первого возбужденного состояния крутильного колебания метильной группы. Расщепление линий $Q_{1,-1}^b$ в возбужденном состоянии указывает на проявление кориолисова взаимодействия между крутильным колебанием $\nu_{18}(a'') = 259 \text{ см}^{-1}$ и плоскостным деформационным колебанием $\text{CCJ } \nu_{11}(a') = 258 \text{ см}^{-1}$. По величине расщепления первого возбужденного уровня крутильного колебания оценена высота барьера (V_3) заторможенного внутреннего вращения метильной группы в I, она оказалась равной 3,62 ккал/моль, что хорошо согласуется с данными, полученными на основе анализа спектра КР I, а также со значениями V_3 для других этилгалогенидов.

В. В. Белякова

1782
С 5953
эм/мш

C₂H₅I

сттис 9653

1980

1) 19 Б250. Микроволновый спектр этилиодида. Анализ эффекта внутреннего вращения. Boucher D., Dubrulle A., Demaison J. Microwave spectrum of ethyl iodide: internal rotation analysis. «Z. Naturforsch.», 1980, A 35, № 4, 442—446 (англ.)

Измерен в области частот от 5 до 80 Гц МВ-спектр этилиодида в двух первых возбужденных состояниях.

М. В. Скляр,
М. И.

X. 1980 N 19

торсионных колебаний метильной группы и плоских CCl колебаний. Анализ спектра выполнен с учетом заторможенного внутреннего вращения и кориолисова взаимодействия между двумя колебательными модами. Вращательные постоянные в возбужденных колебательных состояниях двух мод, соотв., равны (в Мгц): $A = 29515(41)$ и $28596(40)$, $B = 2976,74(7)$ и $2969,52(4)$, $C = 2791,59(6)$ и $2790,81(5)$. Вместе с данными для основного колебательного состояния [D. Boucher, A. Dubgulle, J. Demainson, J. Mol. Spectrosc. (в печати)] полученные результаты использованы для определения высоты барьера заторможенного вращения $V_3 = 3623(150)$ кал/моль. Определена ориентация метильной группы относительно остова молекулы.

С. Н. Мурзин

C_2H_5I

1980

94:55241a Microwave spectrum of ethyl iodide. Nuclear quadrupole interaction and centrifugal distortion analysis. Boucher, D.; Dubrulle, A.; Demaison, J. (Lab. Spectrosc. Hertzienne, Univ. Lille I, F 59655 Villeneuve d'Ascq, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 84(2), 375-87 (Eng). The microwave spectrum of EtI was reinvestigated between 4 and 80 GHz. A total of 181 ground-state transitions with $J \leq 26$ and $F \leq 57/2$ were analyzed using numerical diagonalization of the quadrupole Hamiltonian. The following rotational and quadrupole coupling const. were detd. (in MHz): $A' = 29\,116.321$; $B' = 2979.5639$; $C' = 2786.4520$; $\chi_{aa} = -1478.111$; $\chi_{bb} = 564.464$; $\chi_{cc} = 913.648$, and $\chi_{ab} = 96.38$. The quadrupole coupling const. were transformed to their principal axis system. All the quartic centrifugal distortion const. were significantly detd., the std. deviation of the fit being only $\sigma = 31$ kHz.

u.n.

C.A. 1981:94, N8

1980

C₂H₅I

8 Д492. Микроволновый спектр этилиодида. Анализ постоянных ядерного квадрупольного взаимодействия и центробежного искажения. Microwave spectrum of ethyl iodide. Nuclear quadrupole interaction and centrifugal distortion analysis. Boucher D., Dubrulle A.; Demaison J. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 84, № 2, 375—387 (англ.)

м.-в. спектр

Ф. 198 / N 8

$C_2H_5J^+$

1980

6 Б121. Распределения по кинетическим энергиям, высвобождаемым при диссоциации ионов $C_2H_5J^+$ с определенной внутренней энергией. Baer Thomas, Buchler Ueli, Klots Cornelius E. Kinetic energy release distributions for the dissociation of internal energy selected $C_2H_5J^+$ ions. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1980, 77, № 7—8, 739—743 (англ.; рез. франц.)

диссоциация
ионов

Методом спектроскопии фотоэлектрон — фотоионных совпадений измерены распределения по кинетич. энергиям ионов $C_2H_5^+$, образующихся при диссоциации молек. ионов $C_2H_5J^+$ с определенной внутренней энергией. Измерения выполнены для нескольких значений энергии $h\nu$ фотонов, превышающих пороговую энергию процесса. Распределения получены из спектров времен пролета ионов $C_2H_5^+$, измеренных при фиксированной энергии ионизирующих фотонов. Полученные результаты сопоставлены с результатами расчета соотв-щих распределений, выполненного в предположении о наличии статистич. распределения энергии молек. иона по различным степе-

α. 1981. N 6

ням свободы. Получено хорошее совпадение измеренных и рассчитанных распределений вплоть до значений $h\nu$, превышающих пороговое значение на 2,5 эВ. В частности, в измеренных распределениях присутствует пик при малых значениях высвобождаемой кинетич. энергии, предсказываемый теорией и соотв-щий наличию центробежного барьера на кривой P_t энергии. Анализ полученных результатов свидетельствует также, что значит. часть атомов иода, образующихся при диссоциации, находится в состоянии $^2P_{1/2}$.

Е. Николаев

C_2H_5I

М. П.

Отмечено 11252

1980

15 Б267 Микроволновый спектр этилиодида. Анализ π -эффекта квадрупольного взаимодействия и центробежного искажения. Boucher D., Dubrulle A., Demaison J. Microwave spectrum of ethyl iodide. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 84, № 2, 375—387 (англ.)
Измерен в области частот 4—80 ГГц МВ-спектр этилиодида в основном колебательном состоянии. Уточнена и идентифицирована ядерная квадрупольная СТС спектра. Обработка спектра выполнена методом численной диагонализации гамильтониана с учетом ядерного квадрупольного взаимодействия и эффекта квартичного центробежного искажения. Величины вращательных постоянных равны (МГц): $A=29116,32103(788)$, $B=2979,56389(77)$, $C=2796,45201(90)$ и постоянные центробежного искажения (в кГц) — $D_F=1,1655(24)$, $D_{FK}=-11,9521(84)$, $D_K=260,287(745)$, $\delta J=$

Х. 1984. № 15

$=0,113329$ (156). Вычисленные из расщепления МВ-переходов постоянные квадрупольного взаимодействия по отношению к главным осям инерции молекулы равны (МГц) $\chi_{aa} = -1478,111$ (68), $\chi_{bb} = 564,464$ (76), $\chi_{cc} = 913,648$ (73), $\chi_{ab} = 896,38$ (47). По отношению к собственным главным осям постоянные квадрупольного взаимодействия $\chi_{zz} = -1815,693$ (210), $\chi_{xx} = 902,046$ (138), $\chi_{yy} = 913,648$ (73) МГц, а угол между главной a -осью инерции и квадрупольной z -осью равен $20^\circ 637$. Стандартное отклонение расчетных данных по порядку величины совпадает с точностью измерений.

С. Н. Мурзин

C_2H_5I

1980

Parker D. H., et al.

Chem. Phys. 1980; 45, 141,
27-37

спектр
микро
волн

см. CH_3I - III

C_2H_5J

(ommurca 10124) 1980.

Ramada K., et al.

u.k. Panay
cuckit,
mos. cyper.

Spectrosc. Lett.,
1980, 13 (6), 373-380.

$C_2H_5Y^+$

номер 122757 1981

Goss S.P., et al.

спектр

гетерогенный,

Di

гетерогенный
спектр

J. Chem. Phys., 1981,
75(4), 1820-28.

CH₃CH₂I

1981

19 B241. Микроволновый спектр этилиодида. Nii-
de Y., Ohkoshi I., Takano M. Microwave spect-
rum of ethyl iodide. «Mem. Nat. Def. Akad.», 1981,
21, № 2, 33—44 (англ.)

Измерен в области частот 11—31 ГГц МВ-спектр
этилийодида, CH₃CH₂I, в основном колебательном со-
стоянии. Анализ спектра выполнен в приближении мо-
дели полужесткого асимм. волчка с учетом квартич-
ного центробежного искажения и квадрупольного
взаимодействия в двухуровневом приближении. Опре-
делены вращательные постоянные (в МГц) $A =$
 $= 29117.212$ (68), $B = 2979.549$ (4), $C = 2796.477$ (5) и
элементы тензора квадрупольного взаимодействия в
двухуровневом приближении (МГц) $\chi_{aa} = -1477.63$ (22),
 $\chi_{bb} = 563.85$ (22), $\chi_{cc} = 913.78$ (31), $|\chi_{ab}| = 894.39$ (24).

М. П., Кошар,
Стружкова

Х. 1982, 19, № 12.

Полученные значения постоянных квадрупольного взаимодействия хорошо согласуются с величинами, определенными ранее методом прямой диагонализации. При ряде допущений вычислены структурные параметры $r(\text{C—I}) = 2,160 \text{ \AA}$, $\angle \text{CSH}(\text{метилен}) = 112,75^\circ$, $\angle \text{CSCl} = 111,30^\circ$. С. Н. Мурзин

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{I}$

1982

Borian D.F.,

Schick G. Alan.,

et al.

J. Chem. Phys., 1982,

76, N 10, 4828-4833.

(comp. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl}$; III)

расчёт
интервал-
субм.

C_2H_5I

1983

Ohno K., Imal K.,
et al.

Электрон.
спектр.

J. Phys. Chem., 1983,
87, N 22, 4346-4348.

(см. $C_2H_5NH_2$; III)

C_2H_5I

1984

Dewar Michael J. S.,
Healy Eamonn F.,
et al.

$\Delta_f H, I, M$

структ.,

теор. расчёт.

J. Comput. Chem.

1984, 5(4), 358-62.

(сер. Мол.-лы, содерж. J, (Jel), III)

C_2H_5I

1985

Santharam V.,
Sobhanadri Y.

Pacrem Pramana Y. Phys., 1985,
M; 24, N5, 737-741.

($\bullet$ CF_3I ; III)

C₂H₅I

OM 29133

1988

/ 109: 13823q Microwave spectrum, r_e structure, dipole moment, and nuclear quadrupole coupling constant tensor of ethyl iodide. Inagusa, Toshihiro; Fujitake, Masaharu; Hayashi, Michiro (Fac. Sci., Hiroshima Univ., Hiroshima, Japan 730). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 128(2), 453-68 (Eng). Microwave spectra of EtI and its 6 isotopic species were measured. A least-squares anal. of the obsd. frequencies gave rotational, quartic centrifugal distortion consts., and the components of the nuclear quadrupole coupling const. tensor for all the 7 isotopic species. The r_e structure was established from the moments of inertia calcd. from the obsd. rotational consts. The nuclear quadrupole coupling const. tensor in the inertial principal axes system could be transformed into that in its own principal axes system which gave the following conclusions. The tensor is roughly cylindrically sym. around the z axis which is slightly deviated by about 56° from the C-I internuclear line. From the Stark effect measurements of several low J transitions for the 3 isotopic species, the dipole moments were detd. For the normal species, $\mu_a = 1.884(3)$ D, $\mu_b = 0.598(10)$ D, and $\mu_{total} = 1.976(5)$ D and the dipole moment makes an angle of 2°9' with the C-I bond.

(148 creep)

C. A. 1988, 109, N2.

СМЗ СМЗ

ДМ. 24133

1988

9 Л162. Микроволновый спектр, r_s -структура, дипольный момент и тензор ядерного квадрупольного взаимодействия этилйодида. Microwave spectrum, r_s structure, dipole moment, and nuclear quadrupole coupling constant tensor of ethyl iodide. Inagusa Toshiihiro, Fujitake Masaharu, Hayashi Michiro. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 128, № 2, 456—468 (англ.)

Изучен микроволн. спектр этилйодида и 6 его изотопич. модификаций. Измерения проведены в области 8200—36 000 МГц с помощью спектрометра со штарковской модуляцией. Для изученных переходов обнаружена разрешенная сверхтонкая структура, обусловленная эффектами ядерного квадрупольного взаимодействия. Определены вращательные постоянные, постоянные центробежного искажения и тензора ядерного квадрупольного взаимодействия. По вращательным постоянным рассчитана r_s -структура. По измерению эффекта Штарка для нескольких вращательных переходов определены компоненты дипольного момента: $\mu_a = 1,884$ (3), $\mu_b = 0,598$ (10), $\mu_{total} = 1,976$ (5) ед. Дебая.

Е. А. Ж.

М.П.

ср. 1988, 18, 49

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{J}$

ОМ. 29133

1988

Э 18 Б1378. Микроволновый спектр, r_s структура, дипольный момент и тензор постоянных ядерного квадрупольного взаимодействия этилиодида. Microwave spectrum, r_s structure, dipole moment, and nuclear quadrupole coupling constant tensor of ethyl iodide. In *Angusa T., Fujitake M., Hayashi M.* «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 128, № 2, 456—468 (англ.)

На штарковском микроволновом (МВ) спектрометре в обл. частот 8,2—36,0 ГГц измерены вращат. спектры семи изотопич. образцов этилиодида, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{J}$ (I), $^{13}\text{CH}_3\text{CH}_2\text{J}$, $\text{CH}_3^{13}\text{CH}_2\text{J}$, $\text{CH}_3\text{CD}_2\text{J}$, $s\text{-CH}_2\text{DCH}_2\text{J}$, $\alpha\text{-CH}_2\text{D-CH}_2\text{J}$ и $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{J}$, в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектров выполнен в приближении модели асимм. волчка с учетом квартичного центробежного искажения и J-ядерного квадрупольного взаимодействия. Для I определены вращат. постоянные в МГц $A = 29116,332(40)$, $B = 2979,566(5)$, $C = 2796,451(5)$, постоянные квадрупольного взаимодействия в МГц

М.П.

Х. 1988, 19, N 18

$\chi_{aa} = -1478,06(39)$, $\eta_a \chi_{aa} = -348,95(32)$, $|\chi_{ab}| =$
 $= 895,75(121)$ и полный дипольный момент $\mu =$
 $= 1,976(5)D$. Из полученных МВ-данных определена
 замещенная r_s -структура этилиодида. Показано, что
 тензор квадрупольного взаимодействия близок к ци-
 линдрич. симметрии вокруг z -оси, слегка отклоненной
 от $C-J$ связи.

С. Н. Мурзин



C_2H_5I

1988

Zhu O., Cao J. R., et al.

Chem. Phys. Lett.,

D₀; 1988, 144, N5-6, 486 -
- 492.

(see CH_3I ; III)

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{I}$

[ON 33527]

1990

Magashi et al., Fujitake et al.,
et al.,

empirical

J. Mol. Struct. 1990,
216, 9-26.

C₂H₅Y

1998

(90)

130: 196390x Thermodynamic parameters of ethyl radical and rate constants of its formation from ethyl iodide. Skorobogatov, G. A.; Dymov, B. P.; Pogosyan, Yu. I.; Chuikov-Ru, E. P. (Chemical Research Institute, Saint-Petersburg State University, St. Petersburg, Russia). *Russ. J. Org. Chem.* 1998, 34(4), 481-491 (Eng), MAIK Nauka/Interperiodica Publishing. Equil. consts. and rate consts. of reactions $\text{EtI} = \text{Et}^\bullet + \text{I}^\bullet$, $\text{I}^\bullet + \text{EtI} = \text{Et}^\bullet + \text{I}_2$ were measured in the range 300-700 K employing the method of quasistationary isothermal pyrolysis. The mol. parameters of $\text{Et}^\bullet$ free radical were calcd. by quantum chem. ab initio procedure. The calcn. results were used for estg. the thermodyn. functions of the $\text{Et}^\bullet$ free radical. Combined exptl. and calcd. data provided the following values (kJ mol^{-1}) of dissocn. energy $E_0(\text{Et}-\text{I})$ 223 ± 1 , $E_{298}(\text{Et}-\text{I})$ 226 ± 1 and enthalpy of formation $\Delta_f H_0^\circ(\text{Et}^\bullet)$ 125 ± 2 , $\Delta_f H_{298}^\circ(\text{Et}^\bullet)$ 114 ± 2 .

(H)



C₂H₅($\Delta_f H^\circ$)



C.A. 1999, 130, N15