

CC20

AB₂ BAC

ClCO

H. B. Walsh

J. Chem

Soc 21, 2260-6

1953

Спектр многоатомных
молекул.

7877-IV

F³⁵C1C0 (A, B., C, X, Y, Z x-y, Lxyz¹⁹⁶¹)

Guarnieri A., Mirri A.M., Favero P.,

Grifone L.

Ricerca scient., 1961, parte, 2, 1, N 3,
358-361 (Умал.; риз. фр. умал. нел.)

Spettro a microonde del ...

СССР

PX., 1962, 22692

Ю

Есть оригинал.

ClCO

UK-amerip

Matrix isolation study of the reaction of Cl atoms with CO. The infrared spectrum of the free radical ClCO. Marilyn E. Jacox and Dolphus E. Milligan (Natl. Bur. of Stds., Washington, D.C.). *J. Chem. Phys.* 43(3), 866-70(1965)(Eng). Cl atoms have been produced by the photolysis of HCl, Cl₂, Cl₂CO, and (ClCO)₂ in a matrix at 14°K. These atoms react with CO with essentially zero activation energy, producing the previously unobserved free radical ClCO. The vibrational fundamentals of this species have been observed at 281, 570, and 1880 cm.⁻¹ Assuming that the ClCO valence angle is 120° or 135° and that the bond distances are similar to those observed for Cl₂CO, it is possible to estimate force constants and to calculate frequencies for Cl¹³CO in reasonable agreement with those observed for this species. The C:O bond is found to possess partial triple-bond character. The thermodynamic properties of ClCO have also been estimated. No ultraviolet absorptions have been observed for this species in the region between 2500 and 4500 Å.

RCIQ

1965

51

11-916W-chd



C.A. 1965-63.5
5121 et

ClCO

1965

D 1 B632. Обнаружение нового свободного радикала.—
New free radical observed. «Nat. Bur. Standards Techn.
News Bull.», 1965, 49, № 12, 204 (англ.)

Проведено исследование ряда св-в свободного радика-
ла ClCO, образующегося в р-ции хлорирования при
получении фосгена. В кач-ве источников Cl использо-
ваны HCl, Cl₂, Cl₂CO и (ClCO)₂. В кач-ве газа-носите-
ля использовался Ar или CO. Сняты ИК-спектры
ClCO. Вычислены термодинамич. параметры ClCO при
273—3000° K. При 273,16° K $c_p^0 = 10,61$, $(H^0 - H_0^0)/T =$
 $= 9,14$, $-(F^0 - H_0^0)/T = 53,42$, $S^0 = 62,55$ (Результаты
выражены в кал/моль·град). Г. Занков

по Jacob и Milligan-у. 1965.

20. 1967. 1

⊠

CCO

| BP - MRB16 - IV | 1968

(cm. no. 5, V_i,

~~see page 15~~)

Shirk J. S.,
Pimentel G. C.

J. Amer. Chem. Soc.,
1968, 90, 113,
3349-51

● (cm. HCO; III)

CCO

number 3589

1970

recomp
u di
comp &
comp

Hastie J.W. et al.

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

High temp chemistry...

1972

CSCO

CLOO

22 B221. Спектры электронного парамагнитного резонанса CICO и CLOO Adrian Frank J. Cochran Edward L. Bowers Vernon A. Electron spin resonance spectra of CICO and CLOO. «J. Chem. Phys.», 1972, 56, № 12, 6251—6255 (англ.)

При 4° К исследованы спектры ЭПР радикалов CICO (I) и CLOO (II), полученных взаимодействием атомарного Cl на CO и O₂ в поликрист. матрицах CO и Ag. Параметры спин-гамильтониана I: $g_z=1,9980$, $g_x=2,0061$, $g_y=2,0003$, $|A_z|=227$, $|A_x|=58$, $|A_y|=50$ МГц, $e^2qQ=76$ МГц, $\eta=0,25$ (e^2qQ — константа квадрупольного взаимодействия, η — параметр асимметрии градиента элект-

спектр

X. 1972. 22

рич. поля). Параметры спин-гамильтониана II: $g_z = 2,0100$, $g_x = 1,9987$, $g_y = 1,9915$, $|A_z| = 50$, $|A_x| = 9$, $|A_y| = 16$ Мгц, $e^2qQ = 105$ Мгц. В I и II гл. ось z направлена вдоль связи Cl, гл. ось x перпендикулярна к плоскости радикалов. По аналогии с изученными ранее радикалами FCIO и F^{13}ClO всем 3-м компонентам тензора A в I приписаны положит. знаки, на основании чего плотность неспаренного электрона на $3p$ -орбитали Cl в I оценена равной 0,42. В. Я. Рочев

60203.6670

Ch, Ph, TC, MGU

96200

CCO (Di) UK

1976

8787

Jacox Marilyn E. Matrix isolation study of the products of the interaction between metastable Ar and Kr atoms and chloroform. Photodecomposition of HCCl_2^+ and HCCl_2^- . "Chem. Phys.", 1976, 12, N 1, 51-63

0552 (англ.)

527 528

ВИНИТИ

Cl CO

1978

Allamandola L. Y.
et al

Rev. Sci. Instrum. 1978,
49(7), 913-18

(Di)
спектр в
матрице



см. CF₃ -I!!

CCCO

numbru 6646 1978.

bazquez J. L., et al.

cul.
noct.

Theor. chim. acta

1978, 49, 1-11



O=Cc1ccccc1 | number 8383 | 1979

Oberhammer A
et al

молекула.
молекула,
дв. концы.
кв. сек.
факт

J. Mol. Struct.
1979, 55, 283-94

1979

 CCCO^+ FCO^+

(A.P.)

(41) 

7 Б99. Фрагментация COCl_2^+ и COF_2^+ изучение ионов методом фотоэлектрон-фотоионных совпадений. Johnson K. M., Powis I., Danby C. J. The fragmentation of COCl_2^+ and COF_2^+ ions studied by the photoelectron-photoion coincidence technique. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1979, 32, № 1, 1—14 (англ.)

Методом фотоэлектрон-фотоионных совпадений исследованы процессы фрагментации $\text{COCl}_2^+ \rightarrow \text{ClCO}^+ + \text{Cl}$ (1) и $\text{COF}_2^+ \rightarrow \text{FCO}^+ + \text{F}$ (2). Особенности конструкции энергоанализатора электронов и времяпролетного масс-анализатора позволили изучить распад молек. ионов с фиксированной внутренней энергией. По относит. площади пиков времяпролетного спектра определено распределение кинетич. энергии, высвобождаемой при фрагментации. Для р-ции 1 в фотоэлектронном спект-

X. 1980. N 7

ре зафиксировано 6⁻ полос. Порог появления ионов ClCO⁺(¹Σ⁺) соответствует $11,2 \pm 0,2$ эВ. Для полос X, B и C распределение кинетич. энергии близко к максвелловскому с максимумом 0,2—0,3 эВ. Для р-ции 2 порог появления FCO⁺ равен $14,3 \pm 0,2$ эВ, при этом у полосы B необычное гауссово распределение кинетич. энергии с максимумом 1,0—1,2 эВ. В обоих р-циях средн. выделяющаяся кинетич. энергия на 50—80% выше, чем предсказывает теория. Обсуждены возможные причины этого явления. М. Туркина

Гитисек 9711

1980

Minchliffe A.,

J. Mol. Spect., 1980,
64, 117-122.

CCO
Электр.
структурные
константы
сверхтонк-
башня.

(All. FCO; III)

СССР

сейсмическ 11705 1980

Thyagarajan G., Subbedar
M. K.

сез. постр., Indian J. Pure and
ΔΗατομиз. Appl. Phys., 1980, 18,
392-395.

CCO

[Om. 20765]

1984

Birdett J.K., Lawrence N.J.,
et al.,

Inorg. chem., 1984, 23,
N 16, 2419-2428

Электронно-
оптический,
структурный
анализ
с помощью
модельных.

CCO

Am

31319

1988

спытка
и до пых
на. СОСНОДН.

/110: 179768w The structure and dissociation energetics of low-lying states of the chloroformyl radical, ClCO. Francisco, J. S.; Goldstein, A. N. (Dep. Chem., Wayne State Univ., Detroit, MI 48202 USA). *Chem. Phys.* 1988, 128(2-3), 367-72 (Eng). Essential features of the potential surface for the lowest $^2A'$, $^2\Sigma^+$ and $^2\Pi A''$ electronic states of the chloroformyl radical, ClCO, were characterized. The $^2A'$ is the lowest state and it is distinctly bent. The structures and vibrational frequencies are presented for the low-lying electronic states of ClCO. Unrestricted 2nd-order Møller Plesset/6-31G* vibrational frequencies and intensities for the $^2A'$ state are in reasonable agreement with the vibrational spectrum given by M. E. Jacox and D. E. Milligen, (1965) with the exception of the ν_3 mode, which is reinterpreted in the light of the present calcs. The reaction $CO(^1\Sigma^+) + Cl(^2P)$ leading to $ClCO(X^2A')$, and the reaction $CO(^3\Pi) + Cl(^2P)$, leading to $ClCO(B^2\Pi A'')$, are all barrierless processes.

C.A. 1989, 110, N 20

CCO

Om. 31005

1988

конспект
лекций.
Микроф.
состав,
структ.

Francisco J.S., Goldstein
A.N.,

Chem. Phys. 1988, 128,

N2-3, 367-372.

The structure ● and disso-
ciation energetics of low-

Using states of the Chloro-
formyl radical CClO .

ClCO

Om 31319

1988

10 Б1144. Структура и энергетика диссоциаций низлежащих состояний хлорформильного радикала ClCO. The structure and dissociation energetics of low-lying states of the chloroformyl radical, ClCO / Francisco J. S., Goldstein A. N. // Chem. Phys.— 1988.— 128, № 2—3.— С. 367—372.— Англ.

Неограниченным методом Хартри — Фока и по теории возмущений Мёллера — Плессета рассчитаны равновесные геометрич. конфигурации молекулы ClCO в электронных состояниях X^2A' , $A^2\Sigma^+$ и $B^2\Pi(A'')$, оценены гармонич. частоты и интенсивности колебат. переходов. Результаты позволили несколько изменить интерпретацию эксперим. колебат. спектра. Найдено, что р-ции CO ($^1\Sigma^+$, $^3\Pi$) + Cl(2P), ведущие к образованию ClCO в указанных состояниях, являются безбарьерными. Результаты использованы для обсуждения ряда атмосферных процессов. Б. В. Павлов — Вереvкин

М.А.

X. 1989, N 10

CCO

от 31.319 1988

Э 4 Д58. Структура и энергетика диссоциации хлорформильного радикала, ClCO , в низколежащих состояниях. The structure and dissociation energetics of low-lying states of the chloroformyl radical, ClCO / Francisco J. S., Goldstein A. N. // Chem. Phys.— 1988.— 128, № 2—3.— С. 367—372.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах 3-21ГФ и 6-31ГФ* с учетом корреляции электронов во втором порядке теории возмущений Меллера — Плессета и спинным проектированием волн. ф-ции неограниченного метода Хартри — Фока исследовано электронное строение радикала ClCO в низколежащих состояниях $\tilde{X}^2A'$, $X^2\Sigma^+$ и $\tilde{B}^2PA''$. Приведены равновесная геометрия, частоты и интенсивности колебаний. Показано, что низшим является состояние $^2A'$ с валентным углом $128,9^\circ$ и длинами связей 1,175 и 1,792 Å. Полученные результаты согласуются с имеющимися эксперим. данными. Показано, что реакции $\text{CO}(^1\Sigma^+) + \text{Cl}(^2P) \rightarrow \text{ClCO}(\tilde{X}^2A')$ и $\text{CO}(^2\Pi) + \text{Cl}(^2P) \rightarrow \text{ClCO}(\tilde{B}^2PA'')$ протекают без барьеров.

В. Л. Лебедев

М.Л.

Х. 1989, № 8

COCl

1988

Khabashkeski V. N.,
Maltsev A. K. et al.

J. Anal. and Appl.
Pyrol., 1988, 13, N 1-2,
135-140.
(ex. CCl_3 ; III)

CCO

1989

Burkholder J. B.

Orlando J. J. et al.

High Resolut. Fourier Trans-
form. Spectrosc.: Sum. Pap.

High Resolut. Fourier Trans-
form. Spectrosc. Top. Meet.,

Santa Fe, N. M., Feb. 13-15, 1989.-
Washington, 1989, C. 94-97.

COCl

1989

Dasgupta Siddharth,
Goddard William A., III.

Chem.
Process.

J. Chem. Phys. 1989,
90 (12), 7207-15.

(Chem. H_2CO ; III)

$OCCl^+$

[om. 35862] 1991

Peterson K.A., Mayrhofer R.C.
et al.,

u.n. J. Chem. Phys. 1991, 94,
N1, 431-441.

Spectroscopic properties of OCS
and $OCCl^+$ by ● Møller-Plesset

perturbation theory and configuration interaction.

CCO

1992

№ 11 Д84. Неэмпирическое исследование структуры, колебательных частот и интенсивностей ван-дер-ваальсова радикала хлорформила. An ab initio study of the structure, vibrational frequencies and intensities of the chloroformyl van der Waals radical / Francisco J. S., Abersold N. J. // J. Chem. Phys.— 1992.— 96, № 2.— С. 1134—1136.— Англ.

Структура, колебательные частоты и ИК-интенсивности рассчитаны для ван-дер-ваальсова радикала CCO неэмпирич. методами. Расчеты проводились с использованием валентно-расщепленного базиса, дополненного диффузными ф-циями и несколькими наборами поляризованных ф-ций. Наиболее точная оптимизованная геометрия получена в рамках метода Меллера—Плессета 2-го порядка (МП2) в базисе 6-31+ГФ (3 df). Определены длины связей CCl и CO, равные соответст-

М.А.

Ф. 1992, N 11-12

венно 2,865 и 1,135 Å. Хартри-фоковский предел дипольного момента, рассчитанного неограниченным методом Хартри—Фока, составляет 0,06 ед. Дебая. В рамках метода МП2 дипольный момент равен 0,30 ед. Дебая. Наиболее точные частоты гармонич. колебаний определены методом МП2 в базисе 6-31+ГФ (3 d). Отмечено, что колебательные частоты более чувствительны к корреляционным поправкам, чем к эффектам базиса. ИК-интенсивности зависят от обоих этих эффектов.

1992

13 Б1140. Инфракрасные спектры и неэмпирический расчет матрично-изолированного ClCO. Infrared spectra of matrix isolated ClCO and ab initio calculation /Schnöckel Hansgeorg, Eberlein Robert A., Plitt Harald S. //J. Chem. Phys. — 1992. — 97, № 1. — С. 4—7. — Англ.

Атомы, получаемые нагревом газообразного хлора в алундовом пиролизере до 1200°C , соосаждали со смесью $\text{CO}-\text{Ar}$. Использовали образцы, обогащенные ^{13}C и ^{18}O . В ИК-спектрах полученных матриц наблюдались полосы молекул ClCO, Cl_2CO и $(\text{ClCO})_2$ (последнее — предположительно). Для ClCO и его изотопных аналогов получены все основные частоты колебаний, что позволило определить шесть силовых постоянных. Одновременно проведен неэмпирич. расчет ClCO и его результаты сопоставлены с экспериментом. Расчетные частоты колебаний выше измеренных значений от 4 (вал. кол. $\text{C}-\text{O}$) до 11% (вал. кол. $\text{C}-\text{Cl}$ и деф. кол.). Молекула ClCO может играть существенную роль в химии стратосферы как резервуар активного хлора, поскольку энтальпия ее диссоциации всего $7,7 \pm 0,6$ ккал/моль.

Л. В. Серебренников

42

Х. 1993, №13

ClCO
 Cl_2CO
 $(\text{ClCO})_2$

М.П.

ClCO

1992

117: 78981z Infrared spectra of matrix-isolated chlorooxomethyl (ClCO) and ab initio calculation. Schnöckel, Hansgeorg; Eberlein, Robert A.; Plitt, Harald S. (Inst. Anorg. Chem., Univ. Muenchen, D-8000 Munich, Germany). *J. Chem. Phys.* 1992, 97(1), 4-7 (Eng). Cl atoms and CO mols. were trapped in a solid Ar matrix at 16 K. The formation of ClCO was followed via its IR spectrum. The vibrational frequencies of $^{35}\text{Cl}^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ were obsd. at 1876.7, 570.1, and 1316 cm^{-1} . Expts. with different CO isotopomers were performed in order to confirm the assignment of the absorptions and to characterize the force field. The results extend and correct earlier data of M. E. Jacox and D. E. Milligan (1965). With the help of quantum chem. calcs. (UHF, MP2), the optimized ClCO bond angle was obtained to be 129.2° . The computed bond lengths were detd. to be 1.159 for C-O and 1.807 for C-Cl. Based on force const. calcs., the C-Cl bond in ClCO was found to be extremely weak compared to that in Cl₂CO.

UK & nam-
 muse,
 смрухмрх.
 ларамрх,
 & (C-Cl)
 C.A. 1992, 117, 148

1995

F: ClCO

P: 3

5B128. эмпирическое исследование электронного спектра хлорформильного радикала ClCO. Ab initio investigation of the electronic spectrum of the chloroformyl radical ClCO / Krossner Th., Zulicke L., Staikova M., Peyerimhoff S. D. // Chem. Phys. Lett. - 1995. - 241, N 5 - 6. - С. 511-515. - Англ.

эмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 12s8p1d/9s4p1d, сгруппированном в 5s4p1d/4s2p1d, с учетом КВ по отношению к нескольким исходным конфигурациям рассчитаны равновесная геометрия и электронный спектр радикала ClCO. Обнаружено, что в спектре имеются три низколежащих дублетных состояния в области 3,2; 3,4 и 3,7 эВ, а первые кватертные и ридберговы состояния находятся в области 6,3-7,5 эВ. Полученные результаты сопоставлены с данными для CO и FCO.

Р. Ж. Х. NS, 1996

CCCO

1995

123: 155393n Ab initio investigation of the electronic spectrum of the chloroformyl radical ClCO. Krossner, Th.; Zuelicke, L.; Staikova, M.; Peyerimhoff, S. D. (Institut fuer physikalische und theoretische Chemie, Universitaet Potsdam, Am Neuen Palais 10, D-14469 Potsdam, Germany). *Chem. Phys. Lett.* 1995, 241(5,6), 511-15 (Eng). An ab initio MRD-CI study is carried out to obtain a theor. prediction of the vertical electronic spectrum of the chloroformyl radical ClCO up to energies of approx. 9 eV, including Rydberg s and p states. Furthermore, an estn. of the oscillator strengths for doublet transitions is given. The spectrum is characterized by three low-lying doublet states at 3.2, 3.4 and 3.7 eV, whereas the first quartet states as well as the first members of the Rydberg series are located in the energy region between 6.3 and 7.5 eV. Parallels are drawn with corresponding theor. data obtained for the formyl and fluoroformyl radicals.

in. chem.,
ab initio
param

C.A. 1995, 123, N12

CCO

1995

5 Б128. Неэмпирическое исследование электронного спектра хлорформильного радикала CICO. Ab initio investigation of the electronic spectrum of the chloroformyl radical CICO / Krossner Th., Zülicke L., Staikova M., Peyerimhoff S. D. // Chem. Phys. Lett. — 1995. — 241, № 5 - 6. — С. 511—515. — Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе $12s8p1d/9s4p1d$, сгруппированном в $5s4p1d/4s2p1d$, с учетом КВ по отношению к нескольким исходным конфигурациям рассчитаны равновесная геометрия и электронный спектр радикала CICO. Обнаружено, что в спектре имеются три низколежащих дублетных состояния в области 3,2; 3,4 и 3,7 эВ, а первые квартетные и ридберговские состояния находятся в области 6,3—7,5 эВ. Полученные результаты сопоставлены с данными для HCO и FCO.

Н. Л.

М.А.

X. 1996, N5

Om 40112

1999

F: ClCO

P: 3

131:327772 Energetics and Structures of the
Carbonyl Chloride Radical, Ox Chloride, and Their
Cations. Chien, Siu-Hung; Lau, Kai-Chung; Li,
Wai-Kee C. Y. Department of Chemistry, The Chinese
University of Hong Kong Shatin Hong Kong
J. Phys. Chem. A, 103(39), 7918-7922
(English) 1999 An ab initio study on the
structures and energetics of the carbonyl chloride
radical and its dimer, oxalyl chloride, along with
their cations carried out using the Gaussian-2 (G2)

and Gaussian-3 (G3) models of their structural results obtained include optimized geometries of ClCO, ClCO+, anti, syn, and gauche conformers of (ClCO)₂ and the transition structure connecting the anti and gauche conformers, and (ClCO)₂+. The energetic r reported include the heats of formation for ClCO, various (ClCO)₂ conform transition structures, ClCO+, and (ClCO)₂+, as well as the adiabatic and vertical ionization energies of ClCO and (ClCO)₂. The G3 results obtained in very good agreement with the available exptl. data. In some cases, wh exptl. data are unavailable or imprecise, the G3 results should be reliable ests. Among the three exptl. .DELTA.Hof298 values for ClCO found in the literature, the one most recently reported (-21.8 .+- 2.5 kJ mol⁻¹) has best agreement with the G3 result (-19.4 kJ mol⁻¹). For oxalyl chloride, located a gauche conformer and a TS linking the anti and gauche conformer the MP2(Full)/6-311+G(3df,2p) level, in qual. agreement with the exptl. findings. Also, both exptl. and computational results agree that both th and gauche conformers lie in very flat potential min. Based on the limit of systems studied in this work, the G3 model yields results which are in agreement with the exptl.

CCO

[Um. 40692]

2001

Shih-Kao Chen et al.,

Chem. Phys. Lett.,

2001, 333, 365-370

Detection of CCO with time-
resolved Fourier-trans-
form infrared absorption

spectroscopy.



66

(Dm 41789)

2003

Ally L. Wong, W. S. Tam
et al.,

J. Chem. Phys., 2003,
119, N6, 3234-3239
rotational and hypofine

analyst to the near infra-
red ${}^3P_4 - X^3P_4$ transitions
of Co^{II} and Co^{III}