



C₂H₂ v. ΔH_{comb} 11-8442

1906

Mixter

4. Am. J. Sci. 22, 13 (1906)

Circ. 500

m



MV (op)

0

IV-2110

1930.



Hedfeld K., Mecke R.

Z. Physik 1930, 64, 151-61

"Rotation of cillation spectrum

...

J

1930

4003 - 12

(C_2H_2 , C_2H_4)

Mecke R.

Z. Physik 1930, 64, 173-90

"Rotation, oscillation spectrum

...

J

V-682

I (C_2H_2)

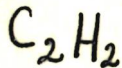
1930

Thornton W.H.

Phil. Mag. 1930, 10, 1052-63

"Comparison of molecular
ionizing potentials in on
alternating electric wind"

C.A., 1931, 877



Bp - 2505 - III
Bp - 9081 - IV

1932

J. T. Tate ; P. T. Smith

(7)

"Phys. Rev.", 1932, 39, 270-7.

4020 - 10

1933

C₂H₂ ()

Sutherland G.B.B.M.

Phys. Rev. 1933, 43, 883-6

"The infra-red absorption ...

J

2105-11

W. (C_2H_2 , C_2D_2)

1934

Glockler G., Davis H.M.

Phys. Rev. 1934, 46, 535

"The acetylene bond ...

J

4379 - IV

1934

✓ (C_2HD , C_2H_2)

Hertzberg G., Fataat F., Spinks J.W.T.

Nature 1934, 133, 951

"Bands of "heavy" ...

C_2H_2

C_2H_2 (d)

2115-IV

1934

Jonesco a.

Compt. rend. 1934, 199, 710-13

"Absorption spectrum of acetylene
in the region 2350 - 2000 Å."

W

C.A., 1935, 479

4010-10

1934

C₂H₂, C₂H₄ (D, E)

Price W.C.

Phys. Rev. 1934, 45, 843-4

"The ultra-violet ...

J, M



C₂H₂

| Bqo-4140-IV | 1934

Savard J.

(D, J.)

"Physica", 1934, 1, 821-3.

"Ionization potentials
and...

ω (C_2H_2) 7620-11

1935

Duncan A.B.F.

J.Chem.Physics 1935, 3, 384-5

"The vibrations of polyatomic
molecules in excited electronic
states"

C.A., 1935, 5743⁶

4011 - IV - B^{SP}

1935

C₂H₂ (J, D), C₂H₄ (J)

Price W.C.,

Phys. Rev. 1935, 47, 444-52

"The absorption spectra of ...

J, M

IV-2107

1936

C₂H₂ (C-H, C-C)

C₂HD (Kombi. Molek.)

Herzberg G., Patat F., Verleger H.

Z. Physik 1936, 102, 1-22

"Rotation vibrations in the ...

2103-IV

1937

(C_2H_2 , C_2H_6 , CH_4)

Glockler G., Wall F.T.

J.Chem.Phys. 1937, 5, 813-17

"Bond force constants ...

J

1938

4029 -

$\sqrt{v_i}$

C₂H₂ ($\sqrt{v_i}$)

Woo S.-C., Liu T.K., Chu T.C., Chin W.

J.Chem.Phys. 1938, 6, 240-6

"The near-ultraviolet bands

...

7943 - IV

1940

C(H₂)

HC:CH (сила связи

C:C)

Henkin H., Burton M.

J.Chem.Phys. 1940, 8, 297-300

"Bond strength and ...

Be

C₂H₂

1946

r (AsH_3 , B_2H_6 , C_2H_2 , C_2H_6 , CH_4 , Cl_2 , P_2O , Cl_2O ,
 GeH_4 , SiH_4 , N_2 , NH_3 , PH_3 , H_2S , H_2Se)

Gordy W.

Phys. Rev. 1946, 69, 130-I.

"A relation between characteristic bond constants and electronegatives of the bonded atoms".

Ch. A., 1946, 2365¹

10

всё г. к.

2404-IV

1948

7. D. H. (C₂H₂, C₂H₄, C₂H₆, CH₄)

Glockler C.

J. Chem. Phys. 1948, 16, 842-4

"Carbon-carbon and ...

M. J.

391-IV

I (Kr, Ar, Xe, N₂, CO₂, C₂H₂, CH₄, CD₄, C₂H₆)

1948

Honig R.E.

J.Chem.Phys. 1948, 16, 105-12.

"Ionization potentials of some hydrocarbon series".

Ch.A., 1948, 2856g

to

The govern.
Z.C.

1948

4005 - IV

C₂H₂ (B₀₀₀)

Nordin N.M., Haslam R.N.H.
Can.J.Research 1948, 26A,
279-291

The vibrational ...

J

10

4144

1948

C_2H_6 , C_2H_2 (Do)

Valatin

J.Chem.Phys., 1948, 16, 1018-
1024

The thermochemistry of organic ...

M, J

98-15

1949

C_2H_2 (Do)

Glockler G.

J.Chim.Phys., 1949, 46, 103-105

Force constants and heats of
dissociation of diatomic molecules

C.A., 1950, 44, 9200a

10, 11, 5.

Всё п. к. Фv



Bell E.E., Nielsen H.H., J. Ch. Ph. 18, 1382 1950

и.к. 2,5-16 μ

Инфракрасный спектр ацетилена

$$\nu_1 = 3373,2$$

$$\nu_2 = 1974,0$$

$$\nu_4 = 613,3$$

Усилены линии гребов первого

Приводятся греб во всем диапазоне
кислотности

Гит. V, 10

C₂ H₂

(mp. m)

BD-2093-IV | 1950

Clark A. M.,
Dcm F.

Trans. Faraday Soc.,
1950, 46, 901-11

1950

4066 - IV

C_2H_4 , CH_4 , C_2H_2 , C_2H_6 (D)

Heitler W.

Helv. chim. acta, 1955, 38, N 1,
5-15

Die Bildungsenergien der ...

J, M

C_2H_2

C_2H_2
curepp.

R. Talley, A. Nelson

1950

J. Ch. Ph. 1680, 18

U.K. curepp C_2H_2 6
051,4400-8500 cm^{-1}

9269

-IV

1950

$\text{D}_2(\text{CH}_3\text{F}, \text{CH}_3\text{Cl}, \text{CH}_3\text{Br}, \text{CH}_3\text{I}, \text{C}_2\text{H}_6, \text{C}_2\text{H}_4,$

$\text{C}_2\text{H}_2)$

Wicko B.

Z. Elektrochem., 1950, 54, 27-33

Theoretical and ...

3, 18

2089-17

1951

C₂H₂ ($\sqrt{\cdot}$ i)

Bell E.E., Nielsen H.H.

J.Chem.Phys., 1951, 19, 136

Erratum: The infrared ...

J

$\text{CH}_4; \text{CH}_3; \text{CH}_2; \text{CH};$ IV M-382
1957
 $\text{C}_2\text{H}_2, \text{C}_2\text{H}_4, \text{C}_2\text{H}_6$ (- cl , Hf, D)

Glockler G.

Discussions Faraday Soc. 1951,

A 10, 26-35

"Estimates of average bond ...

G.A., 1952, 3333c

4009 - IV

1951

ω, β (C_2H_2 , C_2D_2 , C_2HD)

Plyler E.K., Gailar N.

J. Research. Natl. Bur. Standards
1951, 47, 248-51 (Research Paper N 2249)

"Near-infrared ...

C_2H_2

J.

C_2H_2
 C_2H_4
закрыт.

Л.М. Сverdlov.

1957

ДАН СССР 78, 115-18

Изменение между закры-
той и открытой формой
(правильно сумм)

$C_2H_2 - C_2D_2$
 $C_2H_4 - C_2D_4$

C.H₂.

J.W. Taylor.

1957

Trans. Farad. Soc.

⁴⁷, 1293-8.

Effect of conjugation on
bond-dissociation energy.

Dimer changes in D.

C₂H₂.
Wood.
Koroch.

Thompson, McKean 1951
Callomon

Proc. Roy. Soc. L. A208,
332-41.

Иммере. ноее ноебаниз

C₂H₂

P. Torkington
Proc. Roy. Soc. (L)

1951

A 206, 17-39.

Кепловские колебания
C₂H₄, C₂H₂ и их замещенные

C_2H_2
соедин.

Dyne P.J.

19522

Can. J. Phys. 30, 79-80 ~~1952~~

Ковар соединения C_2H_2

Уг. соедин.

C₂H₂
смерщ.

G. Moore, Duncan

1952

JACS 74, 3136-40.

Исследование механизмов
перехода в ацетилен
в вакуумной у.з.

C_2H_2, C_2D_2 King, Ingold. C.K. 1952.
Culley
Nature 169, 1101-2

For each C_2H_2 u C_2D_2

222400-2100.

10005. u bands, asym.

C-C 1.383 Å $\angle CCH = 120.2^\circ$

C-H = 1.08 Å

$\nu_2 = 1049 \text{ cm}^{-1}$ $\nu(CC) 1385 \text{ cm}^{-1}$

C_2H_2
 C_2H_4
Синтез

Schüler, Reinebeck 1952
Z. Naturforsch. 7a, 285-9.

Синтез в водной среде
 C_2H_2 , C_2H_4 и др. ароматиз. м.

интересного

C_2H_2

раств.
энерг.
уравн.

J. G. Ross.

1952.

Trans. Farad. Soc. 48, 373-91.

Раств. энерг. уравн. C_2H_2
в газовой фазе. Иониз.
спин, вращ. б-б вращ.

C₂H₂

Dyke P. J.

1953
1952.

Canad. J. Phys. 31, 453
30, 79, 1952.

Набл. спектр C_2H_2 и новые
состояния C_2H_2 .

C_2H_2
смерз

C.K. Ingold, G.W. King | 1853

J. Chem. Soc. 2702 i s. d.

Серия газмен о смерз

C_2H_2

C_2H_2

C. K. Ingold, G. W. King

1953

Chem. J.

J. Chem. Soc., 2725-2744.

Воздушно-жидкостные системы

IV. Выводы и анализ

систем C_2H_2 и гидродиффузии
в баллонах для хранения, хранения

Рис. 1956
26766

Воздушно-жидкостные системы.

C_2H_2 в кр.с.-соед. - не имеет асимметрии
вращев.

$$A = 12,50 \text{ см}^{-1}$$

$$B = 1,127$$

$$C = 1,033$$

$$r_{CC} = 1,383 \text{ \AA}$$

$$r_{CH} = 1,08 \text{ \AA}$$

$$\angle CCH = 120,2^\circ$$

C_2H_2

метроны
спин

A. Pullman

1953

S. Chim. phys. 50, 447-58.

метроны спин
измерения.

2085-IV
 C_2H , C_2H_2 , C_2H_3 (monomeric. route.)

1953

Schüler H.

Mém. soc. roy. sci. Liège, 1953, 13, 231-7

A new spectrum attributed to the C_2H_x
molecule ($x=1, 2, \text{ or } 3$)

W. J. P. (P)

C. a., 1953, 8511 i

4017 - IV

1953

C₂H₂ (Te)

Serre J., Pullman A.,

J.chim.phys. et phys.-chim.biol.,
1953, 50, N 9, 447-458

Recherches théoretique sur ...

J

1953

ННВ, ННАН А. D. Walsh Y. Chem. Soc.

C₂H₂

21 2260-6

Спектр многоатомных
молекул.

C_2H_2 (I)

BP-2102-IV

1954

Franklin G. L., Field F. H.

J. Amer. Chem. Soc., 1954, 76, 117, 1994-1997
(amer.)

The ionization potential of substituted acetylenes by electron impact.

PXXu 1955, 15731



10- (P)

2

K. K. Jones.

C_2H_2 смес

J. Chem. Phys. 22, 863-86

IV - 2114

1954.

Динамика ультракоротого. новое положение
сверхиници

Исслед. смес в обз. 1970-2470A.

Вращат. пост. верхнего сег.

$A_0 = 12,94$, $B_0 = 1,1247$, $C_0 = 1,0237$ см⁻¹.

Если C-H разд. ультракоротого равном между
1,070 и 1,090A, то $\tau_{CC} = 1,388A$ C-C-H углы 120°

C_2H_2
и.к. спектр

✓
Kiyama R., Minomura S., Ozawa K
Proc. of Jap. Ac. 1954, XXX, № 683
Волновые и.к. измерения в
газообразном состоянии при давлении

$$\nu_4 = 611,8; \nu_5 = 729,1; \nu_6 = 1973,8$$

$$\nu_3 = 3287; \nu_1 = 3373$$

Mikawa J.

J. Chem. Soc. of Jap.

1955, 76, 17, 204

внеш. связь и терм. функции
формальда NH_2CHO

глиц таблица 298.16 - 600°K
и кр.

C_2H_2



Kiyama R.

1958

и.к. измер

упр газа.

90.24 кг/м²

Mitsumura S.

Ozawa K.

Proc. of the Japan Academy
XXX, No 8, 758, 1954.

и.к. измер нормальных

газов. C_2H_2 - упр газ газа.

24 кг/м² ●

1100-5800 см⁻¹

$t = 23-25^\circ C$.

$V_1 = 3323.7 \text{ см}^3$	R	-
$V_2 = 1973.8$	R	- наклон
$V_3 = 3287$	и.к.	-
$V_4 = 611.8$	R	-
$V_5 = 729.1$	и.к.	-

номера 1994 - V_2 индифференциальное
при увелич. газа.

C_2H_2

1954

S. Minomura

† Rev. Phys Chem Japan
24, 49

Induced infrared absorption
in gaseous acetylene
under pressure

cur. ch.
papers
V5-552

1954

C_2H_2, CH_2 ($\Delta H_f, D$)

Mitra S.S.

Science and Culture (India), 1954, 19, 355-6

Heats of dissociation and atomic heats of
formation of acetylene and free methy-
lene molecule

M, W

✓

(88)

C.A. 1954, 9800g

C_2H_2

C_2D_2

(I)

Дектр.
перелог.

11-047-dbl

Nostrand E.D.

Duncan A.B.F.

"J. Am. Chem. Soc."

1954, 76, N13, 3377-79

1954.

C_2H_2

number 2144

1954

Schuler H

P-231-37

On a new spectrometer
a structure to the C_2H_x molecule
($x=1,2,3$)

Shashanka Mitra

[1392-4004-IV] 1954

Do(C₂H₂)

Science and Culture
(India) 19, 355-6.

Измерение глицерина и атомная единица
образования азотрилена и C₂H₂.

- 1) C₂H₂ глицерин на 2 см мол. = 229.2 ^{Растворено} ^{CH=CH} ^{суд. C=170} ^{киал/мо.}
- 2) " " " CH₂ + C = 186 "
- 3) " " " C₂ и H₂ = 203 "
- 4) CH₂ глицерин на ● CH + H = 123.2 "
- 5) " " " C + H₂ = 100 1354

Теплота сгорания $C_2H_2 = 389,2$ ккал

1 — " $CH_2 = 203,2$ ккал.

СА 48
38802

4019

-10

1954

C₂H₂ (Te)

Sponer H., Löwdin P.O.

J. phys. et radium, 1954, 15,
N 7-8-9, 607-611

Les niveaux ...

J

HCN и

C_2H_2

в-примеси

1V-4024

Wiggins T.A., Shearer J.N., Shue E.R. 1954

Rank D.H. J.Ch.Ph. 22, 547

С помощью метода доплеровского
мещения был исследован в-примес-
ный спектр линейных ионных HCN
и C_2H_2 . Разность в значениях $B'-B''$
вычислена из Q уровней $v_1 + v_5'$
и P и R уровней v_1 и v_5 и можно
найти $q = 4.72 \cdot 10^{-3}$ см²

Дифференциальные уравнения

C_2H_2

$$B'' = 1,17658$$

$$\Phi = 1,0 \cdot 10^{-6}$$

HCN

$$B'' = 1,47870$$

$$\Phi = 3,40 \cdot 10^{-6}$$

C_2H_2

A.P.

Bp-4036-IV

1955

F.O. Coats

R.C. Anderson

J. Am. Chem. Soc. V77 (1955)

pp 895-896

✓
 C_2H_2

u-r enesb

Kerzberg J., Stoicheff

1955

Nature, 1956, 175, 79

1953

C₂H₂

Hornig D.F., Mexican D.C.

J. Phys. Chem. 59 1133

Bond Moment and Molecular
structure. ϵ κ

C₂H₂ 1.064 6.37.

cm C₂H₄

1955

4016

IV

C₂H₂ (Te.)

Serre J.

J. chim. phys. et phys.- chim.
biol., 1955, 52, N 4, 331-338

Recherches théoriques sur ...

J

C₂H₂

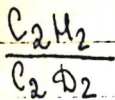
Walker W.C., Weissler G.L. ¹⁹⁵⁵
J. Chem. Phys., 1955, 23, 1547.

Preliminary Data on Photo-
ionization Efficiencies and
Cross Sections in C₂H₄
and C₂H₂

Промежуточные ионизационные

C₂H₄ 10,46 ± 0,05 эв.

● C₂H₂ 11,25 ± 0,05 эв.



E.C. Wingfield J.W. Straley
J. Ch. Ph., 23, 231.

1955

1. K-curve C_2H_2 u C_2D_2 .

ВФ-2086-IV

C_2H_2

Allen H.C., Tidwell E.D., Plyler E.K. 1956

У-к спектр

J. Res. NBS, 1956, 57, 54, 213

1900-8000 cm^{-1}

Инфракрасный спектр ацетилена
Рекорд найден и измерен при Соколов
государстве. Проанализирована линия из
наблюдавшихся полос и найдены
точные значения ν_{00} и $\nu' - \nu''$. Найдено
из опыта и $\nu' - \nu''$ излучения газа
 $\nu_0 = 1,17684 \pm 0,00016$
Диаметр сопла 0,1-0,2 cm^{-1} . В раз сущ

уравнов. функции. выражения коэффициентов "формулы"
 и т.д. Показатели соответствующих значений и т.д.

$$\omega_1^0 = 3397,78$$

$$X_{11} = -24,08$$

$$X_{12} = -16,94$$

$$X_{13} = -99,01$$

$$\omega_2^0 = 1981,72$$

$$X_{22} = -7,92$$

$$X_{23} = -1,38$$

$$X_{24} = -6,16$$

$$\omega_3^0 = 3307,62$$

$$X_{33} = -25,69$$

$$X_{34} = -9,06$$

$$X_{35} = -5,73$$

$$\omega_4^0 = 607,28$$

$$X_{44} = 5,38$$

$$X_{45} = -12,65$$

$$\omega_5^0 = 729,03$$

$$X_{55} = -227$$

$$X_{14} = -16,46$$

$$g_{44} = 1,10$$

$$g_{55} = 2,49$$

$$\gamma = 49$$

$$X_{25} = -0,85$$

$$X_{15} = -11,75$$

Для удобства не мешало бы
 и т.д. функции возмущения

C_2H_2

Christensen M.T. и др.

1956

Proc. Roy. Soc., 1956, A238, 11212, 15-30

Косел-Бранс. полоса C_2H_2 и инфракрасные молекулы.

РМП 1957

59, 24119

1956

C_2H_2

(-)

Coburn T. J., Rao K. N., Nielsen H. H.
J. Chem. Phys., 1956, 25, 607.

Комбинационная полоса $\nu_4 + \nu_5$ -
ацетилена.

IV-2094

C_2H_2

C_2H_2 1. T. Feldman, G.C. Shepherd, H.L. Welsh 1956
Canad. J. Phys. 34, 112, 1425.

Раман-спектр азотулена.

11-2/01
Исслед. Вращающ. и Вращ.-колеб.
Раман-спектр азотулена при
задач. давл. на приборе с высокой
дисперсией. Вращающ. структура
3-го порядка в Раман-спектре
основного вращ.-колебания.

ν_1, ν_2 и ν_4 разрешено и проанализировано.
Каждая полоса, вращ. поглотения и
позиционировать атомно-массовую и каждый

2113 - IV

1956

C₂H₂ (структура)

Ingold C.K.

J.Chim.phys.et phys.-chim.biol.,
1956, 53, N6, 472-479

Изменение формы молекул ...

IV-2116

C_2H_2 (молекулярные постоянные) 1956

Keller F.L., Nielsen A.H., Shaffer W.H.,

J.Chem.Phys., 1956, 25, N 1,
175-176

Новые члены в потенциальной ...

C₂H₂ ✓ S. Minomura 1956
Res. Phys. Chem. Japan 26, 917

Induced infrared absorption
in gaseous acetylene at high
pressure. II.

ν_2 полоса C₂H₂ при 1974 см⁻¹
набл. в смеси газе при давлении
14,5 атм/см² и в смеси с
N₂ при давлении 100 кг/см²

CA 51
858 d.

4018-11

1956

C₂H₂ (Te)

Serre J., M-me

C.r.Acad.sci., 1956, 242, N 11,
1469-1471

L'étude de l'acetylene ...

J

C_2H_2 , C_2HCH_3 (J)

1956

Тиба Лоно
Буссэйрон кэнкю, 1956, № 94,
24-31
Гиперкон'югация ...

J

изучаен

и.к.смер

E.O. Tidwell, E.K. Plyler

1956

JACS 78, 3034-40.

и.к. смер $[^2H]$ изучаен

4025 - IV - B5P

1956

C₂H₂(J)

Watanabe K., Namioka T.,
J.Chem.Phys., 1956, 24, N. 4, 915

J

C_2H_2

Coats F.H.; Anderson
R.C.

1957

Ø

11-7502-chel
1390-2097-IV

YACS, 79, NG, 1340

Термодинамические вели-
чины ...



C_{2H_2}
 C_{4H_2}
 C_4H_2
 C_4H_6
—

D. H. Callomon, B. P. Stoicheff 1957
Canad. J. Phys., 35, 14, 373 [Bp-2098-10]

Высокоразрешающая Раман-спектроскопия газов. VIII. Вращательная структура азота, диоксида азота, диоксида азота d_2 и диоксида азота.

21.1.1957. Вращат. поср. были



Найдем следующие:

$$B_0(C_2H_2) = 1.1769 \text{ см}^{-1} \pm 0.0003$$

$$B_0(C_4H_2) = 0.14689 \text{ см}^{-1}$$

$$B_0(C_4D_2) = 0.12767 \text{ см}^{-1}$$

$$B_0(C_4H_6) = 0.1122 \text{ см}^{-1}$$

$$Z(C \equiv C) = 1.2085$$

$$Z(C-H) = 1.0572$$

$$D_0 = 1.9 \pm 0.4 \cdot 10^{-6}$$

Акаму показал, что $Z(C-H)$ в диатермине меньше, чем в ацетилене и омегаацетилене.

В диатермине одна C-C связь длиннее чем в закрытой ~~соед.~~ соед. молекуле меридиана.

C_2H_2

ommunen 3171.

1957

G. Herzberg.

Mem. Soc. Roy. Sci. Liege
1957, 18, 317-418

Последние лабораторные исслед.
молекуляр. спектров. с точки зрения
астрономии.

4034

-IV-139

~~4034~~

1957

$D(C_2H-H)$, $D(C_2H_3-H)$

Франкевич Е.Л., Тальрозе В.Л.
Изв. АН СССР. отд. хим. наук, 1957,
№ 12, 1501 ; стр. 6

Оценка энергий диссоциации ...

C_2H_2

M, J

C_2H_2

Уорансен А. В.

(1957)

Физ. сб. Львовск. ун-та, 1957, вып. 3(8), 934

1904-11

Задача перм. колебаний и перем.
ангармоничности молекулы
 C_2H_2 и C_2D_2 .

РМФ, 1958

58, 1972.

1957

Mellott C. E., Bretscher M. M.

Baldock R.

J. Chem. Phys., 1957, 26, 1302

Диссоциация азотсодержащих соединений
в масс-спектре азота

Диссоциация

11-323

1957

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

Watanabe K.,

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

Потенциалы ионизации некоторых молекул.

РЖХ, 1957, № 24, 76390

Весть ф.к.

от.

C_2H_2

Тыков Т. В. 1958

Изв. АН СССР. Оиг. хим. н.,
1958, № 6, 771-772

Частоты валентных коле-
баний и электронные заряды
связей C-H в углеводородах.

X-59-3-7185

CaH₂

Бер-5180-III | 1958

Stoichett, B.P.

Смеськи.)
Ze

„Current Science“, 1958, v1,
1-8

4021

-10

1958

D(C₂H-H), D(C₂H₃-H)

Talrose V.L., Frankavitch E.L.

J. Amer. Chem. Soc., 1958, 80, N 9,
2344-2345

Determination of proton ...

J, M

C₂H₂

C_2H_2



Wilkinson P. G.

1958

напряжения
возбудит
сигнал.

J. Mol. Spectr., 2, 387-404

Спектр поглощения азотсодержащих
и азотсодержащих- d_2 в вакуумной

У. Г.

IV-4028

1959

C₂H₂

C₂H

м. ф.
и мол.
вес.

Plaster M. R., Reid T. B.,

J. Chem. Phys., 1959, 31, 66.

Равновесие жидко-газо-аэро-
золь при высоких темп-рах

Равновесие жидко-парово-
газово ^{до 3000°K} и аэрозольно до 3500°K.
Состояние равновесия.

Одним из основных C₂H: газы
3216,7, 659,4, 1925,4 см⁻¹. $\bar{\nu} = 19,284$
 $I = 19,284 \cdot 10^{-40}$ 

X-60-3-8207

Выводение м-н C₂H₂ до 3000 и C₂H до 3500°

C_2H_2

Weber J. H.

1959

Thermodynamic properties
of acetylene

A. I. Ch. E. Journal 1959, 5(1),
17.

C.A. 1962
56(3), 2048e

1960

C₂H₂

Вак. В., Hansen-Hygardal

Ж. Chem., Phys. 1960, 35, 418 (w.)

Корреляция молекуляр-
ной структуры.

C_2H_2

11960

2B88. Расчет ацетиленов методом МО с учетом всех электронов. Burnelle Louis. MO treatment of acetylene including all electrons, «J. Chem. Phys.», 1960, 32, № 6, 1872—1873 (англ.).—Методом ЛКАО МО в приближении самосогласованного поля Рутана без учета взаимодействия конфигураций рассчитана молекула ацетилена (I). В качестве АО использовались слейтеровские ф-ции атомов С и Н. Трех- и четырехцентровые интегралы между Is-АО (С) пренебрегались, а все остальные вычислялись в приближении Маллиkena. Рассчитанный (по Купмансу) первый потенциал ионизации I равен 10,34 эв, а энергия первого перехода ${}^1\Sigma_g^+ - {}^1\Sigma_u^-$ 6,24 эв (эксперим. величины 11,41 и 5,23 эв соответственно). Рассчитанная полная энергия I оказывается на 0,56 ат. ед. меньше экспериментальной, что объясняется приближенным расчетом интегралов. Проведен расчет заселенности связей. Отмечается, что неучет атомов Н приводит к существенно большей энергии электронного перехода (8,02 эв).
Е. Никитин

ор. 1961.2

C_2H_2

Janine Jacob

1960

Сир. ренд. 1960, 250, 9, 1624
И-х спектр ацетилена в ф-ре

Сравним ^{и-х} спектр пополю газобор. ацетилена
и в ф-ре в различных растворителях

11-2117

1960

C₂H₂ (структура, силов. пост.)

King G.W.,

Canad. J. Chem., 1960, 38, N 3,
365-372

Поверхности электронного ...

C₂H₂

1960

2Б35. Расчеты основных состояний C₂H₂ и CO₂ по методу самосогласованных молекулярных орбит в приближении ЛКАО. McLean A. D. LCAO-MO-SCF ground state calculations on C₂H₂ and CO₂. «J. Chem. Phys.», 1960, 32, № 5, 1595—1597 (англ.).—Сообщены результаты первых расчетов многоатомных линейных молекул по методу самосогласованных МО, выполненных на основе недавно законченной программы для электронной счетной машины. Программа позволяет про-

см. н/об

х. 1961.2

изводить полностью автоматич. расчеты молекул как с заполненной, так и с незаполненной электронной оболочкой при минимуме данных: базисные функции, межъядерные расстояния, электронная конфигурация, симметрия, заряды ядер. Ограничения: базисные функции должны быть слейтеровского типа, а их число не более 16. Число ядер в молекуле должно быть не более 4. Все интегралы вычисляются с точностью до 5-го десятичного знака, а полная энергия, энергия и коэф. МО — до 4-го десятичного знака. Приведены результаты расчетов основных состояний молекул C_2H_2 и CO_2 в одноконфигурационном приближении, которые потребовали 2 и 3 часа машинного времени соответственно. Рассчитанные энергии верхней запятой МО (12,01 эв в C_2H_2 и 11,98 эв в CO_2) паходятся в разумном согласии с соответствующими эксперим. величинами (11,41 и 13,79 эв).

Е. Шусторович

1960

C₂H₂ 12Б56. Распределение заряда, гибридизация и связывание в ацетилене и в двуокиси углерода. McLean A. D., Ransil B. J., Mulliken R. S. Charge distribution, hybridization, and bonding in acetylene and carbon dioxide. «J. Chem. Phys.», 1960, 32, № 6, 1873 (англ.).—Произведен анализ распределения электронов в молекулах C₂H₂ и CO₂ на основе мол. волновых функций, рассчитанных Мак-Лейном (РЖХим, 1961, 2Б35). Для C₂H₂ найдено (в скобках значения, соответствующие волновой функции Бернелла; (РЖХим, 1960, № 23, 91245): заселенности перекрывания σ -связей CH 0,79 e (0,87 e) и CC 0,89 e (0,82 e); полный заряд каждого атома H + 0,21 e (+0,105 e); суммарная заселенность

см. 4/05

x.1961.12

перекрывания двух π -связей $1,05 e$ (—). Промотирование $2s_C \rightarrow 2p\sigma_C$ составляет $0,92 e$ ($0,92 e$), т. е. гибридизация АО углерода в случае обеих волновых функций близка к sp -гибридизации. Отмечается пониженная заселенность σ -связи NN в N_2 по сравнению с σ -связью CC в C_2H_2 , обусловленная отталкиванием неподеленных пар атомов азота. Анализ для CO_2 дает: σ - и π -заселенности перекрывания связи C=O равны соответственно $0,21 e$ и $0,52 e$; полные заряды атомов: $+0,43 e$ (C) и $-0,22 e$ (O). Промотирование $2s_C \rightarrow 2p\sigma_C$ составляет $1,08 e$ (гибридизация близка к sp -гибридизации). Промотирование $2s_O \rightarrow 2p\sigma_O$ ($0,14 e$) почти такое же, как для атома O в CO и H_2O . Т. Р.

1960

C_2H_2
HCN

Overend y.

Trans. Far. Soc., 1960, 56, 310-314
Радиолесное пила через в $HC \equiv CH$
и HCN

Длина
струи

11-4007

BP-5706-III; IV-450

I960

w: (CO₂, CO, HCl, HBr, NH₃,
C₂H₂, CH₄, N₂O, H₂O)

Plyler E.K., Danti A., Blaine L.R.,
Tidwell E.D.

J. Res. Nat. Bur. Standards, 1960, A64,
N I, 29-48 (am.)

Vibrationrotation structure in absorp-
tion bands for the calibration of spec-
trometers from 2 to 16 microns.

PX, 1962,
I5I26.

1960

C_2H_2

Perturbation of molecular rotation-vibration energy levels by rare gases. D. H. Rank, D. P. Eastman, W. B. Birtley, and T. A. Wiggins (Pennsylvania State Univ., University Park). *J. Chem. Phys.* 33, 323-6(1960).—The shift in frequency of lines of the 2-0 band of HCl and of the $\nu_1 + \nu_2$ band of C_2H_2 due to the presence of Kr and Xe as foreign gases was measured. A marked J dependence was observed. The relative shifts in the upper and lower states of the transitions were calcd. from the shifts in the $\Delta_2 F''(J)$ and $\Delta_2 F'(J)$ values obtained from the measured line shifts. In the case of HCl, the shifts in the rotational levels were markedly different in the upper and lower states, the upper state shift being proportional to J , while the lower-state energy-level shifts approached an asymptotic value for high J . For C_2H_2 , the shifts in both levels resembled the shift in the lower state of HCl.

Henry Leidheiser, Jr.

C.A. 1961.55.5.4147i-4148a

C₂ H₂

BP-7403-IV | 1961

(Bo, To, Ro)

Brown J.K.,
Cox A.P.

Spectrochim. acta, 1961,
17 (12), 1230-39

1961

C₂H₂

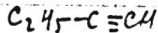
Burnelle L.

J. Chem. Phys., 1961, 35, 311.

Исследование микетной и не-
мекетной молекулы азотиста с
помощью SCF LCAO

молекула
раств

2 мк.



и т.д.

Тастимович З.А., Шигорин Д.Ч., 1961

Трачев З.Н., Зерулаева И.А.,

Шостакевич М.Я. 2

Орг. и сп., 8, 45, (1961), 595-598.

Исследование прихода конических
ацетиленов и его производных
методом и.к. спектров
поглощения. 

Приведены ν в см.⁻¹ и μ в дебайтах ν в см.⁻¹.

C₂H₂

G. Herzberg, F.R.S.

1964

1222

(Chemip)

Rev. Universelle des Mines

9^e Serie T XVII N2, 1961

La Spectrosc. dans la Science
moderne.

p-1-10

C₂H₂

BOP-511-1V	1961
------------	------

Herzberg G.

(Y, D)

"Canadian J. of Physics",

39, 1961, 1511-13

C_2H_2

Kroepelin H.

1961

1035

спектр.

измер.
t°

syn.

Proceedings Fifth International Conference on Ionization Phenomena in Gases, Munich 1961
Temperaturbestimmungen an Lichtlösen in Kohlenwasserstoffatmosphäre

C_2H_2 (Do)

IV-619

1961

Кнох В.Е., Palmer Н.В.

Chem.Revs., 1961, 61, N 3, 247-
255 (англ.)

Энергия диссоциации связи малых
углеводородных молекул / обзор /

РХ., 1961, 23Б44

Ю,М

Есть Ф.к.

C₂H₂.

1961

Mean amplitudes of vibration and shrinkage effects of acetylene from spectroscopic data. E. Meisingseth and S. J. Cyvin (Norges Tek. Hoegskole, Trondheim, Norway). *Acta. Chem. Scand.* 15, 2021-5(1961)(in English).—Force consts., mean-square amplitude matrix elements, mean amplitudes of vibration, and shrinkage effects for C₂H₂ were calcd. The theory of vibrational mean-square amplitudes for a linear sym. X₂Y₂ mol. was applied. Approxn. methods were also studied. For example, when C₂H₂ was treated as a 2-particle structure a very good approxn. was obtained for the C-C mean amplitude of vibration. Aaron L. Bluhm

C.A. 1962. 56. 13

15064 B

1961

C_2H_2

Rath G.

Некоторые результаты измерений в ИК-
области спектра с новым прибором высо-
кого разрешения.

Instrum. and Measure
" Vol. 7 " New-York-London ", 1961, 489
Acad. Press.

см. (с)

Ф-1963-1Д

C_2H_2

T. A. Wiggins

1961

Spectrochim Acta 1961, 17, 1125

И. к. спектр ацетилена.

$$B_0 = 1.17654 \pm 0.00004$$

$$D_0 = 1.51 \pm 0.03 \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$$

$$\omega = 612.88 \text{ cm}^{-1}$$

C_2H_2
и.к.

17Б91. Инфракрасный спектр ацетилена. Wiggins T. A., Plyler Earle K., Tidwell Eugene D. Infrared spectrum of acetylene. «J. Opt. Soc. America», 1961, 51, № 11, 1219—1225 (англ.).—Изучен ИК-спектр C_2H_2 в интервале $2500-4150\text{ см}^{-1}$ с целью получить более точный набор вращательных постоянных. Из 19 обнаруженных полос поглощения у 11 была хорошо разрешена вращательная структура. Определены вращательные постоянные $B_0 = 1,17654 \pm 0,00004\text{ см}^{-1}$ и $D_0 = (1,51 \pm 0,03) \cdot 10^{-6}\text{ см}^{-1}$ и константы l -удвоения для вырожденных колебаний $q_4 = 5,27 \cdot 10\text{ см}^{-1}$ и $q_5 = 4,63 \cdot 10^{-3}\text{ см}^{-1}$. Сравнение вращательных констант для разных наблюдаемых состояний показывает, что данных еще недостаточно для получения удовлетворительного набора вращательных постоянных.

Из резюме авторов

C₂H₂

И.К.

1961

8 В138. ИК-спектр ацетилен. Wiggins T. A., Plyler Earle K., Tidwell Eugene D. Infrared spectrum of acetylene « J. Opt. Soc. America », 1961, 51, № 11, 1219—1225 (англ.)

С целью определения более точных значений вращательных постоянных молекулы C₂H₂ исследован ИК-спектр поглощения ацетилен, полученный в области 2500—4150 см⁻¹ при разрешении до 0,03 см⁻¹. Наблюдено 19 различных полос. Для 11 достаточно интенсивных и хорошо разрешенных полос выполнен анализ вращательной структуры. Значения постоянных $B_0 = 1,17654 \pm \pm 0,00004$ и $D_0 = 1,51 \pm 0,03 \cdot 10^{-6}$ см⁻¹ получены из анализа пяти полос, включающих основное колебательное состояние молекулы. Значения постоянных B_v для 10 различных верхних состояний определены исходя из полученных

РЖСР 1962

8В138

см. на обороте

значений разностей $B_0 - B_v$. Для ряда состояний вычисленные значения постоянных α_v отличаются от измеренных, указывая на необходимость учета постоянной γ в выражении для B_v . Для вырожденных колебаний ν_1 и ν_5 определены постоянные удвоения I-типа, равные $q_4 = 5,27 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ и $q_5 = 4,63 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$. Указывается, что для более точного определения вращательных постоянных молекулы C_2H_2 требуются дополнительные данные, позволяющие учесть резонанс между 00100- и 01011¹-состояниями. Из разностных полос, включающих уровень $\nu_4 = 1$, определено значение частоты основного колебания $\nu_4 = 612,88 \text{ см}^{-1}$.

К. Василевский

11961

C2H2

Infrared spectrum of acetylene. T. A. Wiggins, Earle K. Plyler, and Eugene D. Tidwell (Pennsylvania State Univ., University Park). *J. Opt. Soc. Am.* 51, 1219-25(1961).—The range was 2500-4150 cm^{-1} , the instrument a grating with 10,000 lines per in., and the absorption cell, with an optical path of 6 m., was used at pressures of 1-120 mm. and at temps. up to 60°. Of 19 observed bands, 11 were used for rotational analysis. Consts. for the ground state are $B_0 = 1.17654 \pm 0.00004$, $D_0 = 1.51 \pm 0.03 \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$. For the degenerate modes, the l -doubling consts. are $q_4 = 5.27$, $q_5 = 4.63 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. The use of difference bands involving the $v_4 = 1$ level gave 612.88 cm^{-1} as the vibrational frequency. Addnl. data and consideration of resonances will be needed in order to obtain satisfactory rotational consts.

George M. Murphy

C.A.1962.56.13
15065 hi

C₂H₂

результ

1 В91. Возбужденные состояния ацетилена. W. o. z. nicki W. Excited states of acetylene. «Bull. Acad. polon. sci. Ser. sci. math., astron. et phys.», 1961, 9, № 4, 273—279 (англ.; рез. русск.)

Форма молекулы ацетилена в основном ($D_{\infty h}$) и первом возбужденном (C_{2h}) электронных состояниях интерпретируется на основе неэмпирич. метода антисимметризованных МО. Волн. ф-ции обоих состояний строятся с учетом изменения гибридизации атомов С от sp к sp^2 , при этом для МО используется 2-центровое приближение. МО внешних π -электронов, электронов в линейном ацетиле не точно ортогональны, но МО электронов остов ортогональны лишь приближенно ($s_{ij} \sim 0,01$). Для вычисления молекулярных интегралов применялись слейтеровские АО с $\delta = 1,625$. 3- и 4-центровые интегралы рассчитывались приближенно по Малликену, остальные — точно. Полная энергия E в зависимости от угла θ (или параметра гибридизации) имеет минимум при $\theta = \pi$ в основном и при $\theta = 2\pi/3$ в возбужденном состоянии. Энергия соответствующего перехода ${}^1\Sigma_g^+ \rightarrow {}^1A_{1u}$ равна 6,38 эв, что согласуется с известным эксперим. результатом. Отмечается, что эффект $\sigma-\pi$ -взаимодействия не мал и подлежит учету в аналогичных обстоятельствах. — В. Быховский

Ф. 1962. 1В

Excited states of acetylene. W. Woznicki (N. Copernicus Univ., Torun, Poland). *Bull. Acad. Polon. Sci., Ser. Sci., Math., Astron. Phys.* 9, 273-9(1961)(in English). An attempt is made to give a theoretical explanation to the exptl. known fact that the symmetry of mols. in excited states may differ entirely from that in the normal state. Calcs. were carried out for the C_2H_2 mol. by means of the A.S.M.O. method. In constructing the M.O. the 2-center approxn. was applied. By minimization of the total energy of the mol., it is found that C_2H_2 in the normal state 1A_g is linear and possesses the symmetry $^1\Sigma_g^+$, whereas in the excited state 1A_u , the mol. is bent to a $C-C-H$ angle of 120° , the energy of the transition $^1\Sigma_g^+ \rightarrow ^1A_u$ amounting to 6.38 e.v. ($\lambda \sim 1950$ A.). These results are in agreement with the exptl. data.

H. Kehiaian

C.A. 1963. 59. 6

5927h - 5928a

9346-10

1962

(Обзор) O_2 ; He; CH_4 ; N_2 ; CO ; CO_2 ; C_2H_2

Бажулин Г.А.

Успехи физ. наук, 1962, 77, №4, 639-648

Исследования вращат. и вращат. -
колебат. спектров газов метана

РЖХ 1964 15107

ю

4119-IV

~~6467~~

1962

C_2H_2 , CH_3F , CH_3Cl , CH_3Br , CH_3I , CH_3OH ,
 CH_3SH , CH_3SiH_3 , CH_3GeH_3 , C_2H_4ND ,
 C_2H_4O , C_2H_4S , CH_3NH_2 , $CH_3Li(A)$,
 $C_2H_6(AD)$

Рыков Г. В.
Ж. Прикл. Хим., 1962, 16,
~ 1-283-112

HO, M.Евг. ф. К.

1962

Bp-2096-IV

$$\frac{C_2H_2}{C_2H_4}$$

Ionization and dissociation of molecules by monoenergetic electrons. V. C_2H_2 and C_2H_4 . Jacques E. Collin. *Bull. Soc. Chim. Belges* 71, 15-31(1962). The ionization and dissocn. of C_2H_2 and C_2H_4 were studied by means of a monoenergetic electron beam, with Ar as reference. The potentials observed are in accord with M.O. theory. Observed potentials for C_2H_2 were 11.50, 13.25, and 16.95 e.v.; for C_2H_4 , they were 10.48, 11.74, 13.31, 14.64, and 19.28 e.v. The appearance potential for $C_2H_3^+$ was 14.10 e.v., while $C_2H_2^+$ appeared at 13.40 e.v.

John S. Thayer

Macc-cenosp

2

+2

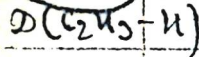
C. A. 1962. 57.5

5403a



1962

2096-IV



Масс-спектр,
повышение
ионизации
 $\Delta H^\ddagger(C_2H_3)$

3 Д126. Ионизация и диссоциация молекул моноэнергетическими электронами. V. Ацетилен и этилен. Collin Jacques E. Ionization and dissociation of molecules by monoenergetic electrons. V. Acetylene and ethylene. «Bull. Soc. chim. belg.», 1962, 71, № 1—2, 15—31 (англ.; рез. франц.)

Исследованы кривые появления молекулярных и осколочных ионов, образующихся при ионизации C_2H_2 и C_2H_4 электронным ударом. Для ионизации использованы электроны, монохроматизированные методом Фокса (РЖФиз. 1956, № 10, 27904). Обнаруженные на кривых появления изломы позволили определить первый и более высокие (соответствующие возбужденным состояниям иона) потенциалы ионизации (ПИ). Для C_2H_2 измерены следующие ПИ (в эв): $11,50 \pm 0,10$, $13,25 \pm 0,19$ и $16,95 \pm 0,30$; для этилена: $10,48 \pm 0,13$, $11,74 \pm 0,17$; $13,31 \pm 0,20$, $14,64 \pm 0,58$ и $19,28 \pm 0,30$. Исследование кривой появления осколочных ионов $C_2H_3^+$ из C_2H_4 позволило определить ПИ для радикала C_2H_3 в предположении, что $D(C_2H_3-H) = 105$ ккал/моль. Получены следующие ПИ (C_2H_3): 9,55; 10,93; 12,70; 13,88 и 19,70 (в эв). Широкое обсуж-

(см. также)
 C_2H_4 (19)

р. 1963. 30

см. н/об.

денне результатов позволило установить состояния электронов, определяющих основной и высшие потенциалы ионизации. Ч. III РЖХим, 1960, № 16, 64232.

Е. Франкевич

у от
на

1982

C_2H_2
cuerpo

Infrared spectra and hydrogen bonding of acetylenes.
Charles S. Kraihanzel, Sr. (Univ. of Wisconsin, Madison).
Univ. Microfilms (Ann Arbor, Mich.), Order No. 62-1181,
149 pp.; *Dissertation Abstr.* 22, 3006(1962). CA

C.A. 1962. 57.3
2993 d

C_2H_2

Lafferty W. J., Plyler E. K.,

Tidwell E. D.

J. Chem. Phys., 1962, 37, 1981. C_2H_2

IR energy, averaged,

cc. 1900-3400 cm^{-1} , 15 noise gain, over $\nu_4' = 518.38$, $\nu_5' = 677.77$ cm^{-1} $B_0 = 0.99156 \pm 0.00004$ cm^{-1} $D_0 = (1.17 \pm 0.07) \cdot 10^{-6}$ cm^{-1}

1962

C_2H_2

Laurie Victor W., Herschbach Dudley

R

J. Chem. Phys., 37, No 8, 1687

Влияние колебаний на определение молекулярной структуры. II. Средние структуры, полученные по спектроскопическим данным.

1962

 C_2H_2 C_2H_6 H_2O SO_2 C_3O_2

список



11-8638

22 Б137. Определение молекулярных постоянных из спектров с высоким разрешением. Plyler E. K. The determination of molecular constants from high resolution spectra. «Internat. Sympos. Molec. Struct. and Spectrosc. Tokyo, 1962», S. I., s. a., C307/1—C307/4 (англ.)

На ранее описанном приборе получена с высоким разрешением вращательная структура полосы $\nu_2 + \nu_6$ в ИК-спектре этана (I). Определены значения геометрич. параметров I: $r_0(C-H) = 1,108$ и $r_0(C-C) = 1,536$ А. Из анализа вращательной структуры спектров C_2H_2 , C_2HD и C_2D_2 получено $r_0(C \equiv H) = 1,0566$ и $r_0(C \equiv C) = 1,2088$ А. Кратко охарактеризованы результаты, полученные при исследовании ИК-спектров N_2O , SO_2 и C_3O_2 . В. Александ

ж. 1963.22

1966

C_2H_2

Свердлов Л. М.

и
протон.
расщеп.

Опыт. и спектр., 1962, 13, вып. 1,
52-55.

Сравнение между мас-
спектрометрией антарци-
пентостен систем
уменьшения многоатом-
ных ионизм.

1962

0
2
C₂H₂
C₂H₄

Some new metastable states of molecules. William Lichten (Univ. of Chicago). *J. Chem. Phys.* 37, 2152-4(1962). A beam of mols. in the ground state was bombarded with electrons of controlled energy, excited to a metastable state, and detected on a metal surface which acted as a secondary electron emission detector. Mol. O₂ existed in a metastable state at an electron energy of 12 e.v. The lifetime was at least 1 msec. Metastable states were also observed in C₂H₄ and C₂H₂. The lifetimes, fractions of a msec., were compatible with the assumption of triplet states.
Henry Leidheiser, Jr.

9
2 Xapf

C.A. 1963. 58. 9

1056 d

1963

BQ-7412-IV

Spectroscopic studies on molecular vibrations and Coriolis coupling in acetylenes, diiodoacetylene, and cyanogen. J. Brunvoll and S. J. Cyvin (Norges Tek. Hogskole, Trondheim, Norway). *Acta Chem. Scand.* 17(5), 1412-16(1963)(in English). Spectroscopic calens. are reported for some linear sym. X_2Y_2 -type mols. David L. Hatt

C_2H_2

C.A. 1963. 59. 12
13454 f

1948

2096 - IV

1963

C_2H_2 (J)

Collin Jacques E.

~~Ionization and dissociation of
molecules by monoenergetic electrons.
V. Acetylene and ethylene. "Bull. Soc.
chim. belg.", 1962, 71, # 1-2, 1543~~

(англ.; рез. франц.)

РХ., 1963, 2, Б37

Ю

М

Ес/70 open

2099-11

1963

C₂H₂ (ON.1036.)

Lowar H.J., Logat Nora L. The s.p.o.
(split-p-orbital) method. II. Further
definition and application to acetylene.
"Proc. Roy. Soc.", 1961, A264, 1319, 431-
444 (ann.)

PL., 1963, 4, 623

14

10

22324

ROTATION-VIBRATION CONSTANTS OF
ACETYLENE. Earle K. Plyler (National Bureau of
Standards, Washington, D. C.), Eugene D. Tidwell, and
T. A. Wiggins. J. Opt. Soc. Am., 53: 589-93(May 1963).

The study of the absorption spectrum previously reported was extended to include the 1900- to 2200- and the 4400- to 6750- cm^{-1} regions. Rotational analysis provides 20 states from which the following constants are determined: $\alpha_1 = 6.82$, $\alpha_2 = 6.30$, $\alpha_3 = 5.60$, $\alpha_4 = -1.30$, $\alpha_5 = -2.20 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ and $B_e = 1.18240 \text{ cm}^{-1}$. This value was used with B_e values for C_2HD and C_2D_2 to determine the bond length of $r_e(\text{C}-\text{H}) = 1.0603$ and $r_e(\text{C} \equiv \text{C}) = 1.2034 \text{ \AA}$. A total of 46 states was available, from this and other work, to determine a set of vibrational constants. About one-half of the 23 constants were determined with acceptable precision. The remaining constants are still in doubt due, primarily, to resonances.
(auth)

1963

11-5698-11
Bq-8645-11

NSA: 1963.17.13

BOP-8645-17

1963

C₂H₂
C₂H₂C₂D₂

H. K. Cline

Rotation-vibration constants of acetylene. Earle K. Plyler, Eugene D. Tidwell (Natl. Bur. of Stds., Washington, D.C.), and T. A. Wiggins. *J. Opt. Soc. Am.* 53, 589-93(1963). The study of the absorption spectrum previously reported (CA 57, 15065h) was extended to include the 1900-2200- and the 4400-6750-cm.⁻¹ regions. Rotational analysis provides 20 states from which the following consts. are detd.: $\alpha_1 = 6.8_2$, $\alpha_2 = 6.3_0$, $\alpha_3 = 5.6_0$, $\alpha_4 = -1.3_0$, $\alpha_5 = -2.2 \times 10^{-3}$ cm.⁻¹, and $B_e = 1.1824_0$ cm.⁻¹. This value was used with B_e values for C₂HD and C₂D₂ to det. the bond length of $r_e(\text{C}-\text{H}) = 1.060_3$ and $r_e(\text{C}\equiv\text{C}) = 1.203_4$ Å. A total of 46 states was available, from this and other work, to det. a set of vibrational consts. About 1/2 of the 23 consts. were detd. with acceptable precision. The remaining consts. are still in doubt due, primarily, to resonances.

CA

C.A. 1963. 5B. 10

977/6

7714 - IV - B9

1963

(COCHN_2 , C_2H_2 , C_2HCl) J

Toffani A., Pignataro S., Cantone B.,
Grasso F.

Nuovo cimento, 1963, 29, N 4,
918-929

Mass spectra of ...

J

BP-2862-III; BP-IV-494
 C_2H_2 (E)

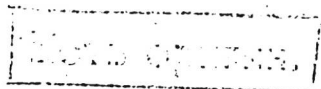
1963

Gilson B.R., Arents J.

J.Chem.Phys., 1963, 38, N 7,
1572-1575 (AMU.)
Theoretical study of ...

P p., 1964, 4D74

10



C_2H_2

Granger G.

1963

Spectrochim. acta, 19, n12,
2113.

структура

Определение молеку-
лярной структуры на
основе значений враща-
тельных постоянных.
(см. HCN)

C_2H_2

Hertzberg G.

1963

1009

"Discussions Far. Soc."

спектр

1963, №35

сильный.
з. в о з д. со с т.

"Determination of the Struct..

C₂H₂

ВФ-10094-IV

-1963

Журнов Н.И.

(Vi)

„Оптика и спектроскопия“,
1963, 14, № 4, 580-582

К оценке точности выпол-
нения...

C_2H_2

~~$C_2H_2^+$~~

Bp - 9730 - <u>IV</u>	1963
-----------------------	------

Lindholm E,
Szabo J., Wilmenius P.

(Y)

"Arkiv för Fysik" 25, n 30,

417-424, 1963

C_2H_2
спектр

В92-8645-1V

1963

✓ 6 Б222. Вращательно-колебательные постоянные ацетилена. Plyer Earle K., Tidwell Eugene D., Wiggins T. A. Rotation-vibration constants of acetylene. «J. Opt. Soc. America», 1963, 53, № 5, 589—593 (англ.)

Исследованы спектры поглощения ацетилена в области 1900, 2200 и 4400—6750 $см^{-1}$. Для определения колебательных постоянных использованы 46 состояний. Р. Ф.

x.1965.6

1963

10094 - IV

$\text{CH}_4, \text{C}_2\text{H}_2$ (V₁)

Ирнов Н.И.

Оптика и спектроскопия, 1963, 14,

№ 4, 580-582

и оценке точности выполнения ...

J

М-462-IV

1964

9 Д294. ИК-спектры твердого ацетилен. Bottger Gary Lee. Infrared spectra of solid acetylene. Doct. diss. Univ. Washington, 1964, 87pp. Ref. «Dissert. Abstrs», 1964, 25, № 5, 2774 (англ.)

Изучены ИК-спектры поглощения поликристаллич. пленок C_2H_2 (I), C_2HD (II) и C_2D_2 (III) в области 2,2—22 μ при $t = -63^\circ K$. Произведено сравнение спектров твердой фазы и паров I и дана разбивка полос по типам колебаний. Часть полос приписана комбинациям колебаний решетки и фундаментальных колебаний I. Наблюдавшаяся мультиплетная структура полос фундаментальных колебаний указывает на то, что в низкотемпературных модификациях I и III молекулы принадлежат к типу симметрии C_{2h} . Спектральное проявление эффектов изотопного замещения при переходе от I к III

ф. 1965. 2А

обсуждено с точки зрения дипольных взаимодействий. Изучена температурная зависимость спектра полос ν_5 I. Установлено, что при отжиге поликристаллич. пленок I происходят необратимые изменения спектров, которые нельзя объяснить изменением размера кристаллов. Изучены также спектры I в твердых матрицах (криптон, ксенон) при $t = 22^\circ \text{K}$, однако условия формирования матрицы оказывали существенное влияние на спектр.

1964

Infrared spectra of crystalline C_2H_2 , C_2HD , and C_2D_2 . G. L. Bottger and D. F. Eggers, Jr. (Univ. of Washington, Seattle). *J. Chem. Phys.* 40(7), 2010-17(1964). The infrared absorption spectra of polycryst. films of C_2H_2 , C_2HD , and C_2D_2 were examd. at 63°K. and 4500 and 450 cm^{-1} . The spectra of the solid state and the gas phase of the various acetylenes are compared and the appropriate vibrational assignments are made. Several absorptions attributable to combinations of lattice modes and mol. fundamentals were found. The observed multiplet structure of the fundamental vibrations indicates that in the low-temp. modification of C_2H_2 and C_2D_2 the mols. are located at sites of C_{2h} symmetry. Spectra of various solid solns. composed of mixts. of isotopic species were obtained and their significance discussed. The effect of isotopic substitution on the splittings in the ν_3 region led to the conclusion that the dipole-dipole coupling model is sufficient to explain the observed spectra. RCJQ

C_2H_2 .

u. K.

chemisor

C.A. 1964.60.9

100679h

1964

C_2H_2

U.K.

19935 **INFRARED SPECTRA OF SOLID ACETYLENE.**
Gary Lee Bottger. Thesis, Seattle, Univ. of Washington,
1964. 87p.

The infrared absorption spectra of polycrystalline films of C_2H_2 , C_2HD , and C_2D_2 were examined at 63°K in the frequency range between 4500 and 450 cm^{-1} . The spectra of the solid-state and the gas phase of the various acetylenes are compared and the appropriate vibrational assignments are made. Several absorptions attributable to combinations of lattice modes and molecular fundamentals were found. The observed multiplet structure of the fundamental vibrations indicates that in the low-temperature modifica-

res
and p

NSA. 1965. 19. 11

tion of C_2H_2 and C_2D_2 the molecules are located at sites of C_{2h} symmetry. Spectra of various solid solutions composed of mixtures of isotopic species were obtained and their significance is discussed. The effect of isotopic substitution on the splittings in the ν_5 fundamental region led to the conclusion that the dipole-dipole coupling model is sufficient to explain the observed spectra. The spectrum of the ν_5 fundamental of acetylene was found to have a pronounced temperature dependence. Nonreversible spectral changes observed when the polycrystalline films were annealed could not be explained merely in terms of an increase in

sample crystallinity. The spectrum was also found to be sensitive to the temperature at which the acetylene was deposited. Matrix isolation studies of the infrared spectra of acetylene in various solid rare-gas crystals at 22°K. are presented. The ν_5 adsorption frequencies of monomeric acetylene suspended in krypton and xenon solid solutions were obtained. The rather gross effects that occur when the rate of sample deposition is varied are described in detail. A careful investigation was made of certain concentration-dependent multiple absorptions found in the spectra. (Dissertation Abstr., 25: No. 5, Nov. 1964)

IV-9557

1964

CH(Do); C(Δ Hs); C₂H₂ (Do)

Brewer R.G., Kester F.L.
J. Chem. Phys., 1964, 40(3),
812-17

Dissociation energy of the ...

J, Be

C_2H_2

Bop - M 48 - IV | 1964.

Dibeler V. H.

Reese R. M.

(9)

"J. Res. Nat. Bur. Stand"
Phys. Chem." 1964, 68A, N4,
409 - 417.

C_2H_2, C_2D_2

BD-9596-15

1964

(I)

Dibeler V. H.,
Reese R. M.

J. Chem. Phys., 1964,
40 (7), 2034-35

1964

C_2H_2
 N_2

C_3

lib. exp. para

(3ues)

Electronic structure of molecules containing sp hybrid atoms.

I. Acetylene, diacetylene, nitrogen. Andre Julg and Alain Pellegatti (Fac. Sci., Marseille, France). *Theoret. Chim. Acta* 2(3), 202-9(1964)(in French). The improved L.C.A.O. theory is used to study the electronic structure of acetylene, diacetylene, and N mols. Calcd. vertical transition energies are in good agreement with exptl. A relation between total mobile bond order ($\pi + \pi'$) and bond distance is proposed, which applies also to atoms with different effective nuclear charges.

II. The C_3 molecule. *Ibid.* 210-14. The improved L.C.A.O. theory is applied to the C_3 mol. In order to satisfy the necessary equality between the non-diagonal matrix elements L_{pq} and L_{qp} , an electron shift is introduced along the σ bonds. The net charges borne by the terminal atoms are $+0.09$. The computed C—C distance (1.286 A.) is in good agreement with expt. The first $N \rightarrow V$ transition energies: $^1\Sigma_g^+ \rightarrow ^1\Sigma_u^-$ and $^1\Sigma_g^+ \rightarrow ^1\Delta_u$ are 4.7 and 4.8 e.v. These values are not in contradiction with expt., which places these transitions beyond 4.1 e.v., a limit from which the terrestrial atm. absorption makes it impossible to study comet spectra.

RCTC

C.A. 1964 61 N5 5080 e

Q

16 Б126. Инфракрасные спектры $C_2^{12}H_2$, $C^{12}C^{13}H_2$ и $C_2^{13}H_2$ с высоким разрешением. Lafferty Walter J., Thibault Robert J. High resolution infrared spectra of $C_2^{12}H_2$, $C^{12}C^{13}H_2$, and $C_2^{13}H_2$. «J. Molec. Spectrosc.», 1964, 14, № 1, 79—96 (англ.)

Получены с высоким разрешением ИК-спектры поглощения $C_2^{12}H_2$ (I), $C^{12}C^{13}H_2$ (II) и $C_2^{13}H_2$ (III) в области 3200—3400 cm^{-1} (I), 2600—2800, 3300—3400 и 6400—6600 cm^{-1} (II, III). Произведен анализ вращательной структуры полос резонирующих колебаний ν_3 и $\nu_2 + \nu_4' + \nu_5'$ I. Для невозмущенных частот получены значения 3288,66 (ν_3) и 3288,11 cm^{-1} ($\nu_2 + \nu_4' + \nu_5'$). Отношение более высокой частоты к ν_3 подтверждается анализом спектров II и III в этой области. Получены следующие значения невозмущенных частот (cm^{-1}): для II 3361,59₄ (ν_1), 3284,2₁ (ν_3), 607,21₃ (ν_4), 728,23₁ (ν_5); для III 3279,4₉ (ν_3), 602,77₇ (ν_4). Определены такие значения вращательных постоянных B_0 , B_c , D_0 и α для исследованных колебательных переходов. Параметры r_s для ацетилена равны 1,057₆ (C—H) и 1,2070Å (C≡C).

В. Алексанян

$C_2^{12}H_2$

спектры

1646-11

X-1965-16

6 Д232. ИК-спектры высокого разрешения $C_2^{12}H_2$, $C^{12}C^{13}H_2$ и $C_2^{13}H_2$. Lafferty Walter J., Thibault Robert J. High resolution infrared spectra of $C_2^{12}H_2$, $C^{12}C^{13}H_2$, and $C_2^{13}H_2$. «J. Molec. Spectrosc.», 1964, 14, № 1, 79—96 (англ.)

Исследованы две парал. полосы $C_2^{12}H_2$ с резонансом Ферми ν_3 и $\nu_2 + \nu_4^1 + \nu_5^1$ в области $3200—3400\text{ см}^{-1}$. Рассчитанные невозмущенные частоты для ν_3 и $\nu_2 + \nu_4^1 + \nu_5^1$ равны $3288,66$ и $3288,11\text{ см}^{-1}$ соответственно. Отождествление ν_3 с высшей частотой подтверждено исследованием этой днады для $C^{13}C^{12}H_2$ и $C_2^{13}H_2$. Получены спектры поглощения исследованных в-в в области $2600—2800$, $3300—3400$ и $6400—6600\text{ см}^{-1}$. Для $C^{13}C^{12}H_2$ получены невозмущенные колебательные частоты. Несколько таких частот рассчитано для $C^{13}_2H_2$. Найдена константа равновесия B для изотопных молекул и эти константы использованы для точного расчета расстояния r_e в ацетилене. Библ. 22 назв.

спектр
(72)

г. 1965. 62

1545-11

1964.

Лагарев Ю. А.

C_2H_2

ν_i

Опти. и спектр., XVII, №3, 364.

Среднее значение момента
проводимости полярности
и химическая
связь в углеводородах.

C₂H₂ (J); (C₂H₂)⁺(J) 9730-IV 1964.

Lindholm E., Szabo I., Wilmenius P.

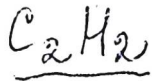
Arkiv fys, 1964, 25, nr 5, 417-424 (avv)

Dissociation of acetylene molecule ions
formed in charge exchange collisions
with positive ions. Ion-molecule
reactions of acetylene

Proc Roy Soc, 1965, 201-15

ЕСТЬ ОПЕЧАТКА
10

+1



1390-55M-IV 1961

Murad E., Ingkavarn M.G.

"J. Chem. Phys.", 1961, 40,
111, 3263-75

(y, ΔH_f)

Вар-9793-15

1964

C₂H₂

8 Д133. Коэффициенты поглощения и фотоионизации ацетилена, пропина и 1-бутина. Nakayama Toshio, Watanabe K. Absorption and photoionization coefficients of acetylene, propyne, and 1-butyne. «J. Chem. Phys.», 1964, 40, № 2, 558—561 (англ.)

Фотоэлектрическим методом измерены коэф. поглощения и фотоионизации ацетилена (I), пропина (II) и 1-бутина (III) в области 1050—2000 Å. Спектр поглощения I состоит из двух резких серий Ридберга, спектр II из трех более диффузных, а спектр III из трех весьма диффузных серий. Все серии в спектре каждого в-ва сходятся к одному пределу, равному для I, II и III соответственно 11,41; 10,36 и 10,18 эв и равному потенциалу ионизации этих молекул, определенному из кривых фотоионизации. Предложена идентификация некоторых полос.

Ф. Вилесов

ф. 1964 - 88

C2H2

A. D. Walsh.

1964

Ann. Rept. Progr. Chem. / Chem.
Soc. London / 61, 8-26.

Electronic spectra of polyato-
mic molecules.

C_2H_2

Al-Joboury M.I.,
May D.P.
Turner D.W.

1965

(7)

BP-2879-III

J. Chem. Soc.
1965 vol. 616-622

(Cell. O_2) III



C_2H_2

Nicholson A. J. C. 1965

J. Chem. Phys., 43, n4, 1171.

Кривые эффективности
фотоионизации. II. Полярные и
истинные структуры.

(см. НСВ)

ВФ-11-12002 (7)

C_2H_2

кв. - мех.
расчет

Pople y. A.,
Santry D. P.

1965

Molec. Phys., 9, N4, 301

Молекулярно-орбиталь-
ная теория углеводоро-
дов. II. Этилен, этилен,
ацетилен.

(См. C_2H_6) III

C₂H₂ 1965

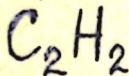
Molecular Rydberg transitions in rare-gas matrixes. Evidence for interaction between impurity states and crystal states. E. S. Pysh, Stuart A. Rice, and Joshua Jortner (Univ. of Chicago). *J. Chem. Phys.* 43(9), 2997-3004(1965)(Eng). As a 1st step in characterizing mol. Rydberg states in the solid state, the absorption spectra arising from C₂H₂ and C₆H₆ impurity states in solid Kr and Ar in the far-uv region were obtained.

63.13

The 1st member of the C₂H₂ Rydberg series, which appears at 8.155 ev. in the gas phase, is observed to be shifted to 8.67 ev. in a Kr matrix and to 9.01 ev. in an Ar matrix. These large energy shifts are discussed, particularly with reference to the optical spectra of rare-gas solids and rare-gas alloys, where similar large blue shifts are observed. The far-uv spectra of C₆H₆ trapped in Kr and Ar matrixes show a qual. different phenomenon. The Rydberg states of C₆H₆ are observed to interact with conduction-band continuum states to exhibit anomalous Fano-type line shapes. The Rydberg states repulse the neighboring continuum states to produce sharp decreases in the continuum absorption intensity. These results are discussed in connection with other systems which show Fano-type line shapes.

RCJQ

C.A. 1965
7163 h-



J.

11 Б115. Изучение возмущающего действия, оказываемого различными сжатыми газами на инфракрасные полосы поглощения ацетилена. Savary André, Robin Stéphane. Etude de perturbations de bandes infrarouges de l'acétylène par divers gaz comprimés. «С. г. Acad. sci.», 1965, 261, № 20, 4010—4013 (франц.)

Прослежено изменение комбинац. полос поглощения параллельного $\nu_4 + \nu_5$ (А) (центр полосы $1328, 18 \text{ см}^{-1}$) и перпендикулярного типов $\nu_1 + \nu_5$ (Б) ($4092, 75 \text{ см}^{-1}$) газ. ацетилена в смеси его с N_2 и Ar соотв. при давл. последних 50—700 атм. Полоса А, не имеющая Q-ветви

X. 1966 II

в нормальных условиях, при давл. от 500 атм и выше обнаруживает появление центрального максимума, сильно перекрываемого P - и R -ветвями и смещающегося в сторону низких частот при возрастании давл. Возмущающее действие N_2 более заметно по сравнению с Ar . Полоса B , характеризующаяся структурой с P , Q и R -ветвями в нормальных условиях, при давл. возмущающего газа при 50 атм и выше теряет тонкую структуру. Предложено объяснение наблюдаемого эффекта.

Б. Рассадин

C_2H_2

(M n)

12 Д252. ИК-полосы поглощения ацетилена. Ч. I. Анализ полос в области $13,7 \mu$. Scott J. F., Rao K. Narahari. Infrared absorption bands of acetylene. Part. I. Analysis of the bands at $13,7 \mu$. «J. Molec. Spectrosc.», 1965, 16, № 1, 15—23 (англ.)

Получен спектр поглощения ацетилена в области $13,7 \mu$ с высоким разрешением. Длина поглощающего слоя 2 м , давление газа 1 мм рт. ст. Анализ вращательной структуры позволяет отнести наблюдаемые линии к полосе ν_5 и к четырем разностным полосам $[2\nu_5^0 - \nu_5]$, $[2\nu_5^2 - \nu_5]$, $[(\nu_4 + \nu_5)^0 - \nu_4]$ и $[(\nu_4 + \nu_5)^2 - \nu_4]$ молекулы $^{12}C_2H_2$ и полосе ν_5 молекулы $^{12}C^{13}CH_2$. Определены центры полос и разности $B' - B''$. Оценены колебательные постоянные ω_5^0 , x_{55} , g_{55} , x_{45} и g_{45} молекулы $^{12}C_2H_2$. Отмечено чередование интенсивности вращательных линий с четными и нечетными J для полос $\nu_5(\Pi_u - \Sigma_g^+)$, $[(\nu_4 + \nu_5)^0 - \nu_4] \cdot (\Sigma_u^+ - \Pi_g)$ и $[2\nu_5^0 - \nu_5](\Sigma_g^+ - \Pi_u)$ линейной симметричной молекулы $H^{12}C - ^{12}C - H$, происходящее за счет спина ядра атома водорода. Библ. 9. назв. С. С.

ф. 1965. 128

1965
111
- 50742
- 50742
BQ - 50742

C_2H_2

B9-5074-a-VII

1965

u.k.

Infrared absorption bands of acetylene. I. Analysis of the bands at 13.7μ . J. F. Scott and K. Narahari Rao (Ohio State Univ., Columbus). *J. Mol. Spectry.* 16(1), 15-23(1965)(Eng). The ir absorption bands of C_2H_2 occurring at 13.7μ were recorded with a high-resolution vacuum-ir grating spectrograph. Analysis of the rotational structure observed led to the identification of the ν_2 fundamentals of $^{12}C_2H_2$ and $^{12}C^{13}CH_2$ and 4 "difference" bands of $^{12}C_2H_2$. A discussion is presented of the rotational and vibrational consts. of the C_2H_2 mol. evaluated from these data.

RCKP

C.A. 1965. 63. 2

1349h

10 Д255. ИК-полосы поглощения ацетилена. Ч. II. Влияние колебательного l -удвоения. Scott J. F., Rao Narahari K. Infrared absorption bands of acetylene. Part II. Effect of vibrational l -type doubling. «J. Molec. Spectrosc.», 1965, 18, № 2, 152—157 (англ.)

Исследовано влияние колебательного l -удвоения уровней ацетилена, в котором возбуждены оба перпендикулярные колебания ν_4 и ν_5 . Влияние этого эффекта на величины констант колебательного взаимодействия x_{45} и g_{45} ранее не учитывалось, т. е. предполагалось, что $r_{45} = 0$. В настоящей работе авторы, сочетая результаты изучения колебательно-вращательных полос ИК-спектра C_2H_2 с измерениями, выполненными в далекой УФ-области для

IV-M-1623

1965

ф. 1966. 102

электронных полос C_2H_2 , оценили величины r_{45} , x_{45} и g_{45} с учетом колебательного удвоения l -типа. Найденные значения ($r_{45}=3,46$ см $^{-1}$; $x_{45}=-7,01$ см $^{-1}$; $g_{45}=11,48$ см $^{-1}$) значительно отличаются от принятых ранее. Приведены схематич. картины колебательных l -резонанса и l -удвоения в уровнях $0002^0 1^1-0002^2 1^1$ и 00031 . Библ. 5 назв. Ч. I см. РЖФиз, 1965, 12Д252. С. Бурейко

C₂H₂

homomolecular

B.M.R.

M-W-1623

1966

Infrared absorption bands of acetylene. II. Effect of vibrational *l*-type doubling. J. F. Scott and K. Narahari Rao (Ohio State Univ., Columbus). *J. Mol. Spectry.* 18(2), 152-7(1965) (Eng); cf. CA 63, 1349h. The effect of vibrational *l*-type doubling on levels of C₂H₂ in which both perpendicular modes ν_4 and ν_5 are excited complicates the evaluation of the vibrational interaction consts. x_{45} and g_{45} . Previous exptl. detns. of these 2 consts. have neglected the effect of vibrational *l*-type doubling and, hence, assumed $r_{45} = 0$. On combining the data obtained for the vibration rotation bands in the ir with the measurements

made in the far uv on the electronic bands of C₂H₂ and using the current theory dealing with the problem of vibrational *l*-type doubling, an attempt has been made to obtain values for r_{45} , x_{45} , and g_{45} . The newly detd. x_{45} and g_{45} differ significantly from those derived by assuming $r_{45} = 0$.

RCKP

CA 1966, 643
2867 W

C₂H₂

B90 - M1624 - IV

1965

Chung

Reconsideration of vibrational *l*-type doubling in C₂H₂. J. F. Scott and K. Narahari Rao (Ohio State Univ., Columbus). J. Mol. Spectry. 18(4), 451-2(1965)(Eng). The effect of vibrational *l*-type doubling and resonance in ¹²C₂H₂, which caused certain corrections to the relations employed in the previous paper (CA 64, 2867h) is reconsidered. Four new equations, including 2 quadratics, are shown: they provide 2 sets of values for g_{45} , x_{45} , r_{45} , and g_{44} . The 1st set allows the levels 0102¹1¹, 0011¹0⁰, 0101¹2², and 0010⁰1¹ to be calcd. with good agreement with values detd. from hot bands in the 3- μ region. Both sets of values show a neg. sign for the const. r_{45} , which results in the Σ_u^- states of levels 0000¹1¹ and 003¹1¹ lying above the Σ_u^+ states.

Ralph H. Steinberg

C.A. 1966. 64. 7

9081 cd

1966

C₂H₂

Р₁ (чуж)

сф. структура

1 Б163. Спектры в дальней инфракрасной области кристаллических ацетиленов C₂H₂ и C₂D₂. Anderson A., Smith Wm. Hayden. Far infrared spectra of crystalline acetylenes C₂H₂ and C₂D₂. «J. Chem. Phys.», 1966, 44, № 11, 4216—4219 (англ.)

ИК-спектры поликристаллич. пленок C₂H₂ и C₂D₂ в области 20—250 см⁻¹ получены с помощью фурье-спектрометра при т-ре 77° К. Оба кристаллич. ацетилена имеют по 2 полосы: 98,5 и 118 см⁻¹ для C₂H₂, 102 и 122 см⁻¹ для C₂D₂. Отношение частот 2 молекул почти точно соответствует квадратному корню из обр. отношения масс соотв-их молекул, что позволило отнести указанные полосы к трансляционным колебаниям кристаллич. решеток. Анализ показал, что структура кристаллич. ячейки C₂H₂ и C₂D₂ соответствует пространственной группе D_{2h} с двумя молекулами в ячейке, а молекула имеет симметрию C_{2h}.

Г. Кузьянц

х. 1967.1

C_2H_2

2 Д342. Спектры кристаллических ацетиленов C_2H_2 и C_2D_2 в далекой ИК-области. Anderson A., Smith Wm. Hayden. Farinfrared spectra of crystalline acetylenes C_2H_2 and C_2D_2 . «J. Chem. Phys.», 1966, 44, № 11, 4216—4219 (англ.)

 V_i

С помощью фурье-спектрометра получены ИК-спектры ($20-250\text{ см}^{-1}$) поликристаллич. пленок C_2H_2 и C_2D_2 при $t = 77^\circ\text{K}$. Обнаружены 2 полосы $98,5$ и 118 см^{-1} в C_2H_2 , 102 и 122 см^{-1} — в C_2D_2 . Отношение частот почти точно соответствует квадратному корню из обратного отношения масс соответствующих молекул, что позволило отнести указанные полосы к трансляционным колебаниям кристаллич. решеток. Структура кристаллич. ячейки C_2H_2 и C_2D_2 соответствует пространственной группе D_{2h} с двумя молекулами в ячейке, а молекула имеет симметрию положения C_{2h} . Г. Кузьянц

структура

ф. 1967. 2D

C_2H_2
 C_2D_2

R. Botter, V.H. Dibeler,
J.A. Walker, H.M. Rosen-
stock.

1966

727

(фотоиониз.) Rep. "J. Chem. Phys",

фактор
ф.-к.

44, №3, 1966.

C₂H₂

Bap-M1346-IV | 1966

Bottler R, Dibeler V. H.,
Walker J. A., Rosenstock H.

(1)

"J. Chem. Phys., 1966, 44,
N3, 1271-1278.

M 1355 - IV

1966

J(O_2 , H_2O , D_2O , C_2H_2 , C_2H_4)

Brehm B.

Z.Naturforsch, 1966, 21a, N 3, 196-209

Massenspektrometrische Untersuchung
der Photoionisation von Molekülen

F

PF., 1966, 11D124

V0

C₂H₂

1966

14 Б59. Расчет основного состояния молекулы ацетилена в приближении двух центров. Булычев В. П. «Теор. и эксперим. химия», 1966, 2, № 6, 823—825

В двухцентровом приближении произведен расчет основного состояния C_2H_2 методом Рутана. В программе расчета все интегралы, кроме небольшого числа малых по модулю, подынтегральные выражения к-рых содержат $1s$ -функцию, вычисляются точно. Варьировались длины связей $C-C$ и $C-H$ и экспоненты в слейтеровских АО валентных электронов. Минимум полной энергии $E = -76,012$ ($-77,39$) достигнут при $r_{C-C} 2,305$ ($2,281$), $r_{C-H} 1,904$ ($2,002$) (здесь и далее в скобках приведены эксперим. значения и все величины в ат. ед.). Полученные результаты лишь немногим хуже данных более точ-

X. 1967. 14

ных и более трудоемких расчетов. Рассчитанные энергетич. уровни обнаруживают правильную последовательность (за исключением того, что уровень $1\sigma_u$ на 0,0001 ат. ед. ниже уровня $1\sigma_g$, что, по мнению автора, объясняется неточными оценками нек-рых малых интегралов). Для энергии синглет-триплетного перехода получено значение 5,16 эв (5,23 эв), а для энергии высшей занятой орбитали — 0,3064 ат. ед. (эксперим. значение потенциала ионизации 0,4193 ат. ед.). Результаты расчета силовых постоянных связей плохие. В. Лебедев

C₂H₂

1966

Стручкова

25752t Calculation of acetylene molecular structure in the two-center approximation. V. P. Bulychev. *Teor. Eksp. Khim.* 2(6), 823-5(1966)(Russ). M.O.-L.C.A.O. calcn. for acetylene was performed with 1s, 2s, and 2p C orbitals. The eigenvalues and eigenfunctions are given. Good agreement was found between theoretical and exptl. excitation energy. By means of potential energy curves, the force consts. of the C-C and C-H bonds were estd. In the 1st case the theoretical value agrees with the exptl. one; in the 2nd case the agreement is poor. R. Zahradnik

C.A. 1967-67-6

1966

C_2H_2

Dibeler & V. H., & gr.

Advances Mass

Spectrom. Vol. 3, London,

1966, 4H

потенц.

ионизация



$(C_2H_2) III$

C_2H_2

Гердберг Т.

1966

1125

"Ученые труд. наук."

1966, 88 (4), 675-701.

Опред. строения. прошивных
ячеек. массы и раунка-
лов в д. возб. сосиса.

оттиск 3026

C_2H_2

1966

70465s Infrared absorption bands of acetylene. James F. Scott (Ohio State Univ., Columbus). *Univ. Microfilms* (Ann Arbor, Mich.), Order No. 66-10,037, 148 pp.; *Diss. Abstr. B* 27 (5), 1572(1966)(Eng); cf. CA 66, 15195d. SNDC

C.A. 1964. 66. 16

HCl

DCl

C₂H₂

C₂D₂

CH₃C≡CD

CH₃C≡CH

ИК-спектр

f 2000

9 Д210. Влияние изотопического замещения водорода — дейтерий на интенсивности полос ИК-поглощения. Jouve Pierre. Effet de la substitution isotopique hydrogène-deutérium sur l'intensité des bandes d'absorption infrarouge. «C. r. Acad. sci.», 1966, C262, № 6, 441—443 (франц.)

Измерены интегр. коэф. (A) ИК-поглощения ряда в-в в газовой фазе. Для полос HCl: 2887; 5668 см⁻¹ и DCl: 2091; 4129 см⁻¹ получены значения A (см/моль): 3200; 70 и 1640; 26. Значения A для полос C₂H₂: 729; 3286 см⁻¹ и C₂D₂: 538; 2430 см⁻¹, значения A равны 16 200; 6800 и 8300; 3750. Первые из них относятся к деф. кол. связей CH и CD, а вторые — к валентным. Измерены также значения A для соответствующих частот метилацетилена и CH₃≡CD и для первых обертонов этих частот. Все значения A удовлетворяют правилам сумм: $\Sigma(A/v^2)_H = \Sigma(A/v^2)_D$; $\Sigma(A_2/2v^3)_H = \Sigma(A_2/2v^3)_D$. Величины A/v² не зависят от масс атомов и определяются строением электронных оболочек молекул.

М. Ковнер

1966

ф. 1966. 9Д



11 1038 - IV - B9P

1966

C_2H_4 , C_2H_2 , C_2D_2 ($Ze=C$; $Ze=H$; $LCCH$)

Kuchitsu K.

J. Chem. Phys., 1966, 44, N 3, 906-911

Calculation of the average structure of ethylene

PX., 1966, 195159

J

F

C_2H_2

Palke W.B.,
Gipscomb W.

1966

расчет

J. Amer. Chem. Soc., 1966,
88, N 11, 2384.

Расчет молекул CH_4 , C_2H_2 ,
 C_2H_4 , C_2H_6 , BH_3 , B_2H_6 , NH_3
и HCN методом са-
(см. CH_4)

ф. 1966. 112

мощности совмещено по-
ля.

(см. Стен)



BP M 1963 - IV

1966

J (CH₄, C₂H₆, CO, CO₂, C₂H₂, N₂, HCN)

Peters D.

J.Chem.Phys., 1966, 45, N9, 3474-3475

Ionization energies of some small
molecules

PF., 1967, 6D98

J. ECON. OPTIM. F

ommuch 2991

1966

C₂H₂

uk cchsp

M. T.

15195d Infrared absorption bands of acetylene. III. Analysis of the bands at 3 μ . J. F. Scott and K. Narahari Rao (Ohio State Univ., Columbus). *J. Mol. Spectrosc.* 20(4), 438-60 (1966)(Eng); cf. CA 64, 2867f. An interpretation of the rotational structure of the absorption spectrum of C₂H₂ occurring at about 3 μ has been presented. Analysis of 3 previously unreported Π - Π transitions has been made. The evaluation of several vibrational consts. of ¹³C₂H₂ and the assignment of the upper states of the Π - Π bands has been discussed, with the inclusion of both anharmonic and vibrational l-type resonance effects.

RCKP

C.A. 1967. 66. 4

C_2H_2

9 Д243. ИК-полосы поглощения ацетилена. Ч. IIIa. Анализ полос при 3 μ . Scott J. F. Rao K. Narahari. Infrared absorption bands of acetylene. Part IIIa. Analysis of the bands at 3 μ . «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 20, № 4, 438—460 (англ.)

Изучена вращательная структура ИК-спектра поглощения ацетилена $^{12}C_2H_2$ и $^{12}C^{13}CH_2$ в области 3180—3360 cm^{-1} . Выполнен вращательный анализ четырех переходов П—П, три из которых были ранее неизвестны. Рассчитан ряд колебательных констант $^{12}C_2H_2$ и обсуждается отнесение верхних состояний полос П—П с учетом влияния ангармоничности и колебательного резонанса l -типа. Показано, что хотя дополнительный учет недиагональных элементов гамильтониана может изменить численные значения x_{45} , g_{45} и r_{45} , полученные константы определены с хорошим приближением. Приведена ф-ла для вычисления вращательного удвоения l -типа в P - и R -ветвях. Библ. 10. Ч. II см. РЖФиз, 1966, 10Д225. С. Бурейко

1966
оттиски 2991

оп. 1967 - 980

CH₂
C₂D₂

1966

9 Д240. ИК-спектры C₂H₂ и C₂D₂. Richards L. Willard. The infrared spectra of C₂H₂ and C₂D₂. «J. Chem. Educ.», 1966, 43, № 12, 644—647 (англ.)

Статья представляет описание студенческой работы, посвященной определению структуры и симметрии многоатомной молекулы по ИК-спектру на примере молекул C₂H₂ и C₂D₂. Библ. 13. С. Станкевич

оп. 1967. 92

1966

4 Б88. Кювета с подогревом для изучения инфракрасных полос поглощения. Webb David U., Rao K. Narahari. A heated absorption cell for studying infrared absorption bands. «Appl. Optics», 1966, 5, № 9, 1461—1463 (англ.)

Описана кювета длиной в 1 м для изучения структуры полос поглощения в ИК-спектрах газов при высоких т-рах. Кювета позволяет использовать как кварцевые и сапфировые окна, так и окна из NaCl, KBr, CsBr и др. материалов, растрескивающихся в обычных условиях при значительных изменениях т-ры. Исследованы спектры C₂H₂ при 300° и HCl при 800°. В спектре поглощения молекулы H³⁷Cl при т-рах порядка 800° обнаружено более 25 ранее не наблюдававшихся линий в полосе 1—0. Рассчитан ряд мол. констант этой молекулы. Указано на полезность описанной кюветы в решении многих проблем мол. спектроскопии. С. Бурейко

С₂H₂
2 2,
HCl,
Исследования
Техника
+ 9 экз
L

Х. 1967. 4

$\text{CN} \equiv \text{CN}$

1967

6 Б81. Фотоэлектронные спектры ацетилена, диацетилена и их дейтеропроизводных. Baker C., Turner D. W. Photoelectron spectra of acetylene, diacetylene, and their deuterio-derivatives. «Chem. Commun», 1967, № 16, 797—799 (англ.)

Исследованы спектры энергии фотоэлектронов при возбуждении паров ацетилена и диацетилена линией излучения $\text{He } 584 \text{ \AA} (21, 21 \text{ эв})$. Особое внимание уделено колебательной структуре, которая сопоставлена с наблюдаемой для дейтеропроизводных. Некоторые из её элементов удовлетворительно согласуются с известными колебаниями соответствующих молекул, однако наблюдаются и особенности, не находящие пока объяснения с точки зрения колебательных частот молекулы или иона. Приведены таблицы найденных значений четырёх потенциалов ионизации в интервале 10—20 эв для каждой из молекул C_4H_2 , C_4D_2 и трех — для C_2H_2 , C_2D_2 , а

Х. 1968. 6

⊠

также факторы Франка—Кондона первого электронного
перехода C_2H_2 , C_2D_2 (колебательные переходы 0—0,
1—0, 2—0, 3—0). В. Дианов-Клоков

C₂H₂

XIV-2922

1987

(5)

112596 Photoelectron spectra of acetylene, diacetylene, and their deuterio-derivatives. C. Baker and D. W. Turner (Imp. Coll., London). *Chem. Commun.* 1967(10), 797-9(Eng). By using a 127° electrostatic velocity analyzer, the 584-A. photoelectron spectra of C₂H₂ and C₄H₂, as well as of their deuterio analogs, have been detd. and are given for the 10-21 ev. range. The observed Franck-Condon factors agree with those calcd. by Sharp and Rosenstock (CA 62: 1197d) in showing no isotope effect. The observed ionization potentials in ev. are:

	1st	2nd	3rd	4th
C ₂ H ₂	11.40	16.44	18.42	
C ₂ D ₂	11.40	16.54	18.42	
C ₄ H ₂	10.17	12.62	16.61	19.8
C ₄ D ₂	10.18	12.62	16.77	19.8

S. Goldwasser

+1

C. A. 1987. 67. 24

D

CH₂CH

(7)

1968-11-12-123

1967
10 Б64. Ионизация ацетилен и его электронные энергетические уровни. Collin Jacques E., Delwiche Jacques. Ionization of acetylene and its electronic energy levels. «Canad. J. Chem.», 1967, 45, № 16, 1883—1889 (англ.)

Критически обсуждены различные эксперим. данные (в основном, самих авторов), относящиеся к процессам ионизации в молекуле ацетилен, протекающим при ее столкновениях с электронами, фотонами, ионами и метастабильными атомами. Указано, что первый потенциал ионизации молекулы (11,406 эв) отвечает адиабатическому удалению наружного $1\pi_u$ -электрона. Предионизация является важным источником ионов в областях 13,25 и 14,5 эв, причем соответствующие уровни оптичес-

Л. 1968.10.

ки запрещены и, по-видимому, являются ридберговыми уровнями с электронными конфигурациями $\sigma_g \pi_u^4 \pi_g^*$ или $\sigma_g \pi_u^4 \sigma_u^*$. Уровни предионизации сходятся к второму потенциалу ионизации, который отвечает удалению 3 σ_g -электрона связи C—C и равен примерно 16,5 эв.

Е. Шусторович

C₂H₂

1987

4 Д99. Ионизация ацетилена и уровни электронной энергии. Collin Jacques E., Delwiche Jacques. Ionization of acetylene and its electronic energy levels. «Canad. J. Chem.», 1967, 45, № 16, 1883—1889 (англ.)

Проведены эксперименты по электронной и фотонной ионизации ацетилен

а. Приводимые в работе новые и литературные данные по ионизационным процессам в ацетилене при бомбардировке электронами, ионами, метастабильными атомами, а также фотонами, обсуждаются с учетом электронной структуры ацетилен

а и на основе известной спектроскопич. информации. Табулированы различные теоретич. оценки электронных уровней, а также экспериментально определенные положения энергетич. уровней. Интерпретация эксперим. данных обсуждается с учетом возможного изменения сим-

С2Н2-11-69

ф. 1968. 4

метрии как возбужденных состояний молекулы, так и основного и возбужденного состояний иона. Сделан вывод о том, что первый ионизационный потенциал ацетилена при 11,406 эв соответствует адиабатич. удалению слабо связанного $1\pi_u$ -электрона. Образование ионов при энергии возбуждения около 13,25 и 14,5 эв обусловлено преионизационными состояниями, с предположительным участием оптически запрещенных переходов в триплетное состояние. Предполагается, что преионизационные состояния обладают $\sigma_g\pi_u^4\pi_g^x$ - или $\sigma_g\pi_u^4\sigma_u^x$ -конфигурациями. Делается вывод о том, что ридберговская серия преионизационных уровней имеет пределом второй ионизационный потенциал, который связывается с удалением $3\sigma_g$ -электрона и равен примерно 16,5 эв.

А. А. Медвинский

C_2H_2

1967

Р) 3 Б29. Теоретический анализ эффектов гидрогенизации в углеводородах. Точные самосогласованные МО-волновые функции для C_2H_2 , C_2H_4 , и C_2H_6 . Buenker Robert J., Peyerimhoff Sigrid D., Whitten Jerry L. Theoretical analysis of the effects of hydrogenation in hydrocarbons: accurate SCF MO wavefunctions for C_2H_2 , C_2H_4 , and C_2H_6 . «J. Chem. Phys.», 1967, 46, № 6, 2029—2039 (англ.)

На основе расчетов ряда молекул этен—этилен—ацетилен методом самосогласованного поля обсуждается сходство между этим рядом и изоэлектронным ему рядом $F_2—O_2—N_2$. В первом ряду в качестве нулевого члена рассмотрена также молекула C_2 . Расчет произведен с фиксированными и варьируемыми базисными наборами, построенными из лепестковых гауссовых

+ 2

X. 1968. 3



функций. В углеводородном ряду обсуждена корреляция изменений орбитальных энергий с изменениями длин связей С—С, относительным участием АО водорода в МО углеводородов и с несвязывающим взаимодействием, возникающим из-за оттягивания электронов от атомов водорода. На основе полученных результатов интерпретированы изменения в минимальных ионизационных потенциалах в углеводородном ряду и соотношения между длинами связей и энергиями связей в обоих рядах.

В. Л. Лебедев

C_2H_2

1967

1) 11 В187. Инфракрасный спектр испускания ацетилена. Etchart Hélène, Delaval Yves, Lecomte Jean. Spectre d'émission infrarouge de l'acétylène. «C. r. Acad. sci.», 1967, 265, № 22, В 1238—В 1243 (франц.)

С использованием спектрографа с дифракционной решеткой высокого разрешения в области $4000—4160\text{ см}^{-1}$ при t -рах 20, 320 и 450°C исследованы ИК-спектры испускания ацетилена. Подтверждено отнесение полосы $4091,20\text{ см}^{-1}$ к комбинации $\nu_1 + \nu_5^1$ и полосы $4068,57\text{ см}^{-1}$ к $\nu_1 + 2\nu_5^0 - \nu_5^1$; для полосы $4077,13\text{ см}^{-1}$ предложено отнесение $\nu_1 + \nu_2 + \nu_5^1 - \nu_2$ и для $4082,20\text{ см}^{-1}$ — $\nu_1 + \nu_4 + \nu_5^1 - \nu_4^1$. Интерпретация пиков $4075,48$ и $4062,35\text{ см}^{-1}$ остается неясной. Б. Рассадин

X-1968-11

1967

 C_2H_2

6 Д409. ИК-спектр испускания ацетилен. Etchart Hélène, DeTaval Yves, Lecomte Jean. Spectre d'émission infrarouge de l'acétylène. «C. r. Acad. sci.», 1967, 265, № 22, В 1238—В 1243 (франц.)

С помощью растрового спектрографа Жирара с селективной модуляцией и с охлаждаемым приемником PbS получены ИК-спектры ($4160-4000\text{ см}^{-1}$) поглощения при 20 и 320°C и испускания ацетилена при 495°C . Приведена интерпретация полученных результатов. Положение наиболее интенсивных максимумов остается неизменным, что свидетельствует об отсутствии изменений в структуре молекулы. Отмечено появление «горячих полос» в спектрах поглощения и испускания при увеличении температуры. А. Л. Белозеров

ИК-спектр
испускания

оп. 1968. 69

1967

34382v Infrared emission spectrum of acetylene. Helene Etchart, Yves Delaval, and Jean Lecomte (Fac. Sci., Paris). *C. R. Acad. Sci., Paris, Ser. A, B* 265B(22), 1238-43(1967)(Fr). The emission spectrum of C_2H_2 heated to several hundred degrees was obtained with a Girard grating spectrograph. This spectrum was compared with the heated or unheated absorption spectrum. The low energy of the emission of gas heated to several hundred degrees made evaluation difficult. A cooled PbS cell, with the Girard spectrograph, gave a resolu. power of approx. 30,000. Absorption measurements were made at room temp. and 320° , emission at 495° . Hot bands appeared or were reinforced at $4000-4160\text{ cm}^{-1}$. Spectra with highly detailed fine structure were obtained, although interference was caused by parasite lines from the H_2O vapor emission. GRJF

C.A. 1968. 68.8

C_2H_2

Frost A.A.,
Prentice B.H.,
Rouse R.A.A.

1914

полные
жержи,

J. Amer. Soc., 89, n 12, 3068

длины
связей

Простая
марной
цааяся
менных"

моделю
структур, базируе-
на "распростра-
локализован-

мы срубилых.

(с.м. №2) III

1907

C_2H_2

Gaudin H.,
Hagemann R.

J. Chim. phys. et phys. —
chim. Biol., 64, n° 7-8,
1909.

Определение абсолютных
сечений  ионизации
атомов He, Ne, Ar и C_2H_2

Зеленый районный рынок
с твердостью зеленых
от 100 до 2000 руб.

(Лен. Жел.) III

C_2H_2

Hunter T. F.

1947

J. Chem. Soc., A, 3, 374.

Изменчивость полос γ_3
в ИК - спектрах CH_4 , N_2O
и C_2H_2

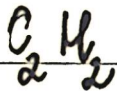
(См. CH_4).

C₂H₂

1967

67711j Ionization of acetylene and its electronic energy levels. Jacques E. Collin and Jacques Delwiche (Univ. Liege, Belg.). *Can. J. Chem.* 45(16), 1883-9(1967)(Eng). The ionization processes in C₂H₂ under photon, electron, ion, and metastable atom impact, including new results, are crit. discussed in relation with the electronic structure of C₂H₂ and with the known spectroscopic information. The first ionization potential at 11.409 ev. corresponds to a 1 π_u electron removal and Franck-Condon processes yield an adiabatic ionization potential in this particular case. The new production of ions around 13.25 ev. and 14.5-15 ev. is due to pre-ionized states probably optically forbidden. From the discussion it is suggested that these might be excited linear $\sigma_g\pi_u^4\pi_g^*$ or $\sigma_g\pi_u^1\sigma_u^*$ states. The second ionization potential of C₂H₂, related to the removal of a 3 σ_g electron, is shown to be around 16.5 ev. 32 references. RCCM

C.A. 1967. 67. 14



Innes X.

1967

Proc. Int. Conf. Spectrosc.
1st, Bombay 1967, 1, 219.

High resolution electronic
spectra of polyatomic
molecules.

(see. NH_2) III

H_2C_2

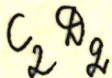
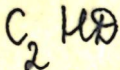
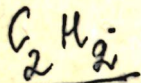
Kroto H.,
Santry D.P.

1967

J. chem. Phys., 47, N2, 792

(C₂H₂ NO) III

1987



УЗ Б72. Новый метод расчета колебаний молекул.
Панченко Ю. Н., Коптев Г. С., Татевский В. М.
«Вестн. Моск. ун-та. Химия», 1967, № 4, 106—108

Ранее предложенным методом (РЖХим, 1967, 22Б125) из данных об основных и нулевых частотах колебаний C_2H_2 определены силовые постоянные ацетилена. Последние использованы для расчета частот C_2D_2 и C_2HD . Результаты вычислений хорошо согласуются с экспериментальными данными. В. Алексанян

(см. посыл.)
расчет частот;

Х. 1968. 3



C_2H_2

1967

1 Д143. Новый метод расчета колебаний молекул.
Палченко Ю. Н., Коптев Г. С., Татевский В. М.
«Вестн. Моск. ун-та. Химия», 1967, № 4, 106—108

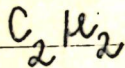
Рассчитаны основные и нулевые частоты колебаний молекул C_2H_2 , C_2D_2 , C_2HD с матрицей потенц. энергии U , полученной математически точно из набора эксперим. частот. Найденные частоты хорошо согласуются с наблюдаемыми для ацетилена и его изотопнозамещенных.

А. Фридман

ф. 1968. 12

17

1967

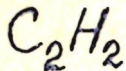


Segal. Y. A., Klein M. L.

J. Chem. Phys., 47, —, v 10,
4236.

Вычисление интенсив-
ностей колеб в ИК-
спектрах по методу
CNDO.

(см. H_2O) III



Sperling T.H.
Mason E.A.

1967

J. Chem. Phys., 46, N1, 322

Определение квадратурных
моментов молекулы из
коэффициента вязкости
и второго вирiaalного
коэффициента.



(См. O₂ III)

1967

 C_2H_2

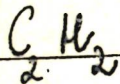
8 Д108. Эквивалентные орбитали для C_2H_2 , C_2H_4 и C_2H_6 . Trinajstić N. Equivalent orbitals of C_2H_2 , C_2H_4 , and C_2H_6 . «Z. phys. Chem». 1967, 236, № 5—6, 369—371 (англ.)

Для C_2H_2 , C_2H_4 и C_2H_6 путем максимизации следа матрицы перекрывания эквив. орбиталей с 1s-атомными функциями водорода с учетом только одноцентровых интегралов при построении матрицы перекрывания построены эквив. орбитали и кратко обсуждены их свойства.

В. Л. Лебедев

9. 1968. 89

24



1967

Yonezawa T.,
Yamaguchi K., Kato H.

Bull. Chem. Soc. Japan,
40, N 3, 536.

Термодинамическое рас-
считывание систем
взаимодействия Фенитро-
нов и модов сали-
солованских молеку-

ярных орбиталей.
I. Насколько ясно - см.

(см. Стр.)

C₂H₂, C₂H₄ (T)

1968

Drumbrong A.P., Berdas B.,
McGlynn S.P.

Spectrosc. Lett., 1968, 1(1), 13-7

Содержимое. по загл. метода МО.

(A 1968, 69, 44, 13060n

XIV-1070

1968

 C_2H_2

8 Д243. Молекулярная фотоэлектронная спектроскопия высокого разрешения. III. Ацетилены и аза-ацетилены. Baker C., Turner D. W. High resolution molecular photoelectron spectroscopy. III. Acetylenes and azacetylenes. «Proc. Roy. Soc.», 1968, A 308, № 1492, 19—37 (англ.)

Изучены фотоэлектронные спектры (8—21 эв) высокого разрешения ($\sim 0,01$ эв), возбужденные гелиевым излучением с $\lambda = 584 \text{ \AA}$, линейных ненасыщенных ацетиленов: C_2H_2 , C_2D_2 , C_4H_2 , C_4D_2 , CH_3C_2H , $CH_3-(C \equiv C)_3-CH_3$ и аза-ацетиленов: $H\bar{C}N$, $D\bar{C}N$, C_3HN , C_4N_2 и C_2N_2 . Приведены полученные значения ионизационных потенциалов (ИП) рассмотренных молекул. Понижение первого ИП в ряду ацетилен (11,40 эв), диацетилен (10,17 эв),

р. 1969. 82

+6



триацетилен (9,67 эв) объяснено влиянием сопряжения. Меньшая величина ИП метилацетилена (10,37 эв) по сравнению с ацетиленом отнесена к перекрыванию псевдо- π -орбитали метильной группы с π -орбиталью между двумя атомами углерода. Рассмотрена роль индуктивного эффекта в изменениях значений ИП. Обсуждена колебательная структура ряда полос; приведены частоты колебаний и их отнесение. Построена корреляционная диаграмма электронных уровней энергии исследованных систем. Библ. 33.

С. Ф. Б.

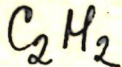
C₂H₂

XIV-1070

1968

(24099k) High-resolution molecular photoelectron spectroscopy. III. Acetylenes and aza-acetylenes. Baker, Clive; Turner, David W. (Phys. Chem. Lab., Oxford, Engl.). *Proc. Roy. Soc. Ser. A* 1968, 308(1492), 19-37 (Eng). The 584-A. (21.22-ev.) photoelectron spectra of the following linear unsatd. mols. are reported: acetylene, DC:CD, HCN, DCN, diacetylene, DC:CC:CD, cyanoacetylene, cyanogen, dicyanoacetylene, methylacetylene, and dimethyltriacetylene. The ionization potentials of the mols. and the vibrational fine structure observed in many of the bands are discussed. . RCPP

C.A. 1969. 70. 6



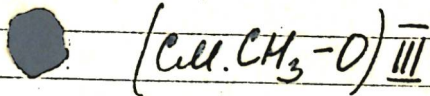
Сил. пост.

Becher H. J.

1968

Fortschr. Chem. Forsch.,
10, N1, 156

Расчеты силловых постол-
емных из колебательных
спектров простых орга-
нических мол-л.



C₂H₂

sp²sp

1968

(99577c) Geometries and charge distributions of organic ligands. I. Metal-carbon π bonding and the geometry of acetylene. Blizzard, A. C.; Santry, D. P. (McMaster Univ., Hamilton, Ont.). *J. Amer. Chem. Soc.* 1968, 90(21), 5749-54 (Eng). The geometrical effects of metal-C π bonding on complexed C₂H₂ have been investigated by using a model based largely on C₂H₂ intramol. interactions. The calcs. showed that the accumulation of electron d. in the π_0 orbital through π bonding could lead to either a cis or a trans bent structure, whereas only cis bent structures are observed exptl. It was possible to explain this fact in terms of an argument based solely on the symmetry of the metal-C₂H₂ interaction. A similar argument showed that the same forces were also opposed to the cis bending of the H atoms toward the metal but had little effect on cis bending away from the metal.

RCIC

C.A. 1968. 69. 24



растер
(Atto)

11968

Frost A. A., Rouse R. A.

J. Amer. Chem. Soc., 90,
N 8, 1968-69.

Модель молекулярной
структуры, использую-
щая "плавающие" сфериче-
ские гауссовские
орбитали. И. В. Уливого -

роды.

(сир. стл.) III

XIV-688

1968

C₂H₂C₂H₄C₂H₆(M.O.
pairing)

22072b Quantum mechanical two-center models for acetylene, ethylene, and ethane. Hartmann, Hermann; Helfrich, Klaus (Univ. Frankfurt/Main, Frankfurt/M., Ger.). *Theor. Chim. Acta* 1968, 10(5), 406-22 (Ger). Diat. orbitals (H₂-like functions) were used as M.O. to form a 10-row Heisenberg-Slater-determinant for the valence electrons of C₂H₂ and a 14-row determinant for the valence electrons of C₂H₄. By optimizing the effective nuclear charge Z₀, points of the energy surfaces for a rectangular grid were calcd. from the determinantal approxns. for the 2 mols. The ground state of C₂H₄ was similarly treated as a mixt. of two symmetry-adapted linear combinations of 12-row determinants. The resulting eigenvalue problem gave an approxn. for height and shape of the barrier of internal rotation and for the twisting frequency of C₂H₄. RCTC

+Luis

C.A. 1968. 69.6



C_2H_2

Kolotilo D. M.

1968

Porosh. Met., 8 (12), 45

(C-C chelze)

Chemical bonding
and properties of
graphitic materials.

(Gen. C_2H_6) III

НССН

Nibler J.W.,
Pimentel G.C.

1968

см. пост.

J. Molec. Spectrosc.,
26, N3, 294

Смещение силовых посто-
янных несимметричных
молекулярных цитонов

H_2O , H_2S , H_2Se , C_2H_2 .

(См. H_2O) III

1968

C₂H₂

Nielsen H.H.

Rao K.N.

справка.
ср-ра
наиме

U.S. Govt. Res. Devel. Corp.

Rep, 1969, 69, n 9,
75

(Cet CO₂) III

C₂H₂

(5)

1968

6938h Franck-Condon factors for the ionization of acetylene. Petropoulos Basile; Botter, Rene (L.R.P., Fac. Sci., Paris, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Paris, Ser. A,B* 1968, 266B(14), 933-6 (Fr). The probability of transition by ionization, the transition moment, intensity of absorption band, and Frank Condon factors $q(\nu'', \nu')$ were derived by the method described by B. Petropoulos, *et al.* (1967), and modified for the ionization of C₂H₂ ($\nu_1'', X^1\Sigma_g^-$) $\rightarrow$ C₂H₂⁺($\nu_1', ^1\pi_u$). Centroids $\langle r \rangle$ and $\langle r^2 \rangle$ were also calcd. Factors ν'' and ν' are tabulated for integral values 0-14 and 0-3, resp. Calcd. transition probabilities, $P_{rel}(\nu', 0)$ agree well with exptl. values. FBJF

C.A. 1968. 69.2

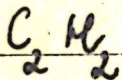
C_2H_2

1968

8 Д107. Множители Франка—Кондона для переходов в C_2H_2 , приводящих к диссоциации. Pétropoulos Basile, Botter René. Facteurs de Franck-Condon pour l'ionisation de C_2H_2 . «C. r. Acad. sci.», 1968, 266, № 14, В933—В936 (франц.)

Вычислены и приводятся в таблицах множители Франка—Кондона и r -центронды для полос $C_2H_2(v_1'', X^1\Sigma_g^-) \rightarrow C_2H_2^+(v_1', \Pi_u)$, $v_1''=0,1,2,\dots,14$, $v_1'=0,1,2,3$. Расчет проведен методом, подобным применявшемуся в работе (РЖФиз, 1968, 1Д263). Результаты обсуждаются. В. А. Морозов

ф. 1968. 87А



BQ-4505-X | 1968
Roy R.S.

Proc. Mys. Soc. London,
Ab. Mol. Mys., [2] 1 [2],
320.

An empirical relation-
ship between bond
length and frequency
(see Ch. 4) III

Scott J. F. C_2H_2 (proparg. rad.) 1968
Rotational constants of acety-
lene.

"J. Opt. Soc. Amer.", 1968, 58,
v1, 142-143

1968

 C_2H_2

19 Б79. Вращательные постоянные ацетилена. Scott James F. Rotational constants of acetylene. «J. Opt. Soc. Amer.», 1968, 58, № 1, 142—143 (англ.)

Исследован колебательно-вращательный спектр ацетилена в области $11\,000\text{--}16\,000\text{ см}^{-1}$. Определены значения вращательной постоянной B_v и постоянной центростремительного растяжения D_v для 8 высоких возбужденных колебательных состояний. Найденные значения B_v сопоставлены с их значениями, вычисленными при помощи данных по α -постоянным, полученных из анализа полос ниже 8500 см^{-1} , и показано, что учет лишь вращательного l -резонанса приводит к удовлетворительному согласию между опытными и вычисленными значениями B_v .

М. Р. Алиев

мол. коэф.

X. 1968. 19

C_2H_2

1968

У8 Д276. Вращательные постоянные ацетилена. Scott James F. Rotational constants of acetylene. «J. Opt. Soc. Amer.», 1968, 58, № 1, 142—143 (англ.)

С целью определения вращательных постоянных C_2H_2 исследован фотографич. спектр газообразного C_2H_2 в области $14\,000—16\,000\text{ см}^{-1}$ при $t_{ре} \sim 300^\circ\text{K}$ в интервале давлений от 100 мм рт. ст. до 1 атм в слое 40 м. Полученные значения B сравнены с рассчитанными на основании измерений в области $<8500\text{ см}^{-1}$; совпадение измеренных и рассчитанных значений позволяет сделать вывод, что значения коэф. α_i , определяемые из ИК-спектров, дают правильные значения вращательных постоянных в области $14\,000—16\,000\text{ см}^{-1}$. Обсуждаются некоторые детали отнесения в спектрах. Библ. 11. Э. В. Б.

вращат.
пост.

ф. 1968. 8 А

1968

23286r Rotational constants of acetylene. Scott, James F.
(Ohio State Univ., Columbus). *J. Opt. Soc. Amer.* 1968, 58(1),
142-3 (Eng). The equation $B(v) = B_0 - \sum_i \alpha_i v_i - \sum_{i,j} \gamma_{ij} v_i v_j$ gave an extremely good fit to HC:CH rotational consts.
of even the most excited vibrational states when: γ_{ij} terms were
neglected; the α_i were detd. from ir bands, 11,000-16,000 cm^{-1} ;
and resonance effects reported by Lafferty and Thibault, Scott
and Rao were included. FBJN

C.A. 1968-69-6

C_2H_2

1968

Setzer D. W.

Stedman D. H.

E_{max}

J. Chem. Phys., 49 (1), 467

(all. CO_2) III

C_2H_2

9 Д189. Изучение триплетных состояний ацетиленом методом электронного удара. Trajmar S., Rice J. K., Wei P. S. P., Kuppermann A. Triplet states of acetylene by electron impact. «Chem. Phys. Letters», 1968, 1, № 13, 703—705 (англ.)

Методом электронного удара (с малыми энергиями налетающих электронов) исследуется молекула ацетилена. Обнаружены два низколежащих триплетных состояния при 5,2 и 6,1 эв. Идентификация состояний основана на правилах, выведенных из зависимости от энергии и угловой зависимости диффер. сечений рассеяния для известных 10 синглет-синглетных и 9 триплет-синглетных переходов в He, H₂, N₂ и CO. Дано объяснение, почему эти триплеты не были обнаружены в оптич. спектре поглощения. Предсказано, что при кинетич. энергиях падающих электронов, превышающих

ф. 1968. 99

1968

~~9 Д190~~

~~Физика~~

100 эв, переходы в открытые триплетные состояния
должны ослабевать. Е. А. Пшеничников

80528.1853

Ph, Ch

X 4164

~~LiC_2H~~ , C_2HF
 C_2H_2

40892

1968

Vellard Alain.

(расчет, М. И. Ж. Д.)

Electronic structure of lithiumacetylene.

"J. Chem. Phys.", 1968, 48, N 5, 2012-2016

20

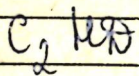
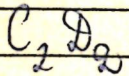
(англ.)

730 736

739

ВИНИТИ

1969



UK. chem. sp.
в spectrosc.

C. A. 1969.

118025f Fermi resonance in the infrared spectra of acetylene in solutions. Borgest, V. A.; Kolomiitsova, T. D. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1969, 27(2), 241-3 (Russ). The ir spectra of C_2H_2 , C_2HD , and C_2D_2 solns. in liq. N ($77^\circ K.$) and O ($90-120^\circ K.$), the splitting of the 3300-cm.^{-1} absorption band as well as the ratio of integral intensities of the corresponding doublets have been measured. A considerable increase of the half-width of the doublets with increasing temp. was observed. The differences in the spectra of acetylene solns. in the 3300-cm.^{-1} range are explained by various conditions for the Fermi resonance between the levels ν_3 and $\nu_2 + \nu_4 + \nu_5$. V. Vesely

+2

71.24

X

1969

 C_2H_2 (ионизация
Э. Дифон)

16 Б122. Принцип Франка — Кондона и ионизация ацетилена электронным ударом. Brion, C. E. The Franck—Condon principle and the ionization of acetylene by electron impact. «Chem. Phys. Letters», 1969, 3, № 1, 9—11 (англ.)

Получена кривая эффективности ионизации ацетилена моноэнергетич. электронным пучком, отфильтрованным в 127-градусном электростатич. анализаторе, разделяющем электроны по энергиям. Анализ элементов структуры кривой вблизи пороговых значений энергий обнаружил известные колебательные уровни иона $C_2H_2^+$. Сравнение полученных значений энергии колебательных уровней с данными фотоэлектронной спектроскопии и фотоионизации указывает на нарушение принципа Франка — Кондона при ионизации электронным пучком. Подтверждается возможность образования переходного комплекса между молекулой и бомбардирующим электроном со временем жизни $\sim 10^{-13}$ секунд. М. Туркина

X. 1969.

16

C_2H_2

(ионизация
электронным
ударом)

10 Д152. Принцип Франка—Кондона и ионизация ацетиленов электронным ударом. Brion C. E. The Franck—Condon principle and the ionization of acetylene by electron impact. «Chem. Phys. Letters», 1969, 3, № 1, 9—11 (англ.)

Получена кривая эффективности ионизации ацетиленов моноэнергетич. пучком электронов, отфильтрованным в 127° электростатич. анализаторе, разделяющем электроны по энергиям. Анализ структуры кривой вблизи пороговых значений энергии обнаружил известные колебательные уровни $C_2H_2^+$. Сравнение полученных значений энергии колебательных уровней с данными фотоэлектронной спектроскопии и фотоионизации указывает на нарушение принципа Франка—Кондона при ионизации электронным пучком. Указывается на возможность образования переходного комплекса между молекулой и бомбардирующим электроном со временем жизни 10^{-13} сек.

ф. 1969. 10Д

1969

C_2H_2

Кб. мех.
массен

1969

Гей 8, Максим З.Б.,
Тринадцатик Н.

Г. Мол. Структ., 3 (1-2),
21-6.

(м. BH_3) III

1969

 C_2H_2

Hb. Mex.
 parrenbr
 Y, r, cat. n.

+2
 (circled)

61074u Wave mechanical absolute calculations on acetylene and simple halogen-substituted acetylenes. Haase, Joachim; Janoschek, R.; Preuss, Heinzwerner; Diercksen, G. (Univ. Karlsruhe, Karlsruhe, Ger.). *J. Mol. Struct.* 1969, 3(1-2), 165-9 (Ger). The total energies, ionization energies, steady state bond distances, and force consts. of C_2H_2 , C_2HF , and C_2HCl are calcd. by using the self consistent M.O.L.C. (L.C.-G.(gaussian)O.) method. The ionization energies are 10.7 (11.4), 10.34, and 8.8 ev. for C_2H_2 , C_2HF , and C_2HCl , resp. The asymmetric and symmetric vibrational frequencies are calcd. for C_2H_2 on the basis of the calcd. force consts. The slightly lower interat. distances of the substituted derivs. are probably a result of the at. vols. of the halogens. The charge d. of the H-atom decreases with decreasing electronegativity of the substituents at the other C atom (H, F, Cl). The at. distances deviate by <1% from the measured values. Ionization occurs at the triple bond.

BVJG

C.A. 1969.

70.1

X

1969

C_2H_2

Milligan D.E.,
Yakov M.E.

gromozus

J. Chem. Phys, 1969,

51, n 5, 1952.

(Cu. C_2^-) III

C_2H_2 (Y)

14

XIV 1980 1969

Omura J; Kaneko T; Yamada Y;
Tanaka K.

J. Phys. Soc. Jap. 1969, 27(1), 178-81

Mass-spectrometric studies of
photoionization. IV Acetylene
and propyne.

E.C.T. & G. K.

10



CA, 1969, 71, N10, 43472f

C₂H₂

в. мек.
расст

Polák R.

1969

Theoret. chim. acta,
14 (2), 163.

(see. Li₂) III

C_2H_2

Prenss H.
Zawoschek R.

1969

Do
y
re
vi

y. Mol. Street, 3(4-5),
423.

(all. C_2H_4) III

C_2H_2

формы
p-и
кв.-и
разм

Snyder L.C., 1969
Basch H.

J. Amer. Chem. Soc.,
1969, 91, 9, 2189.

$(C_{60}H_{12})_{III}$

1969

 C_2H_2

) 21 Б62. Ангармонические силовые постоянные ацетилена. Кубические и квартичные силовые постоянные ацетилена; расчет с общим квартичным силовым полем и эмпирическая потенциальная функция. Suzuki I., Overend John. Anharmonic force constants of acetylene, Cubic and quartic force constants of acetylene; calculations with a general quartic force field and an empirical anharmonic potential function. «Spectrochim. acta», 1969, A 25, № 5, 977—987 (англ.)

Из лит. данных по гармонич. частотам ω_n^0 , постоянным ангармоничности X_{mn} и постоянным колебательно-вращательного взаимодействия α_n молекул C_2H_2 , C_2HD и C_2D_2 вычислены квартич. кубич. и квартичные силовые коэф. модифицированного валентного силового поля молекулы C_2H_2 . Потенциальная функция выражена

X. 1969. 21

через внутренние координаты, а переход к нормальным координатам осуществлен нелинейным преобразованием. Показано, что для определения наиболее общего квартичного силового поля с 43 коэф. эксперим. данных недостаточно. Предложено модифицированное поле с 19 параметрами, в к-ром для описания ангармоничности валентных связей вводятся функции Морза и учитывается ряд ангармонич. членов, соотв-щих взаимодействию валентных связей с углами и углам между собой. Найденный набор силовых коэф. для этого поля удовлетворительно воспроизводит эксперим. данные по ω_n^0 , $X_{m,n}$ и α_n .

М. Р. Алиев

1969

 C_2H_2 сил.
пост.

✓ 11 Д165. Ангармонические силовые постоянные ацетилена. Кубические силовые постоянные и постоянные четвертого порядка ацетилена; расчет с общим силовым полем, учитывающим члены четвертого порядка и эмпирическая ангармоническая потенциальная функция. Suzuki I., Overend John. Anharmonic force constants of acetylene. Cubic and quartic force constants of acetylene; calculations with a general quartic force field and an empirical anharmonic potential function. «Spectrochim. acta», 1969, A 25, № 5, 977—987 (англ.)



Ф. 1969. 11 Д

Из литературных данных о гармонич. частотах ω_n^0 постоянных ангармоничности x_{mn} и постоянных колебательно-вращательного взаимодействия α_n молекул C_2H_2 , C_2HD и C_2D_2 вычислены силовые коэф. модифицированного валентного силового поля молекулы C_2H_2 в разложении потенциала до 4-го порядка включительно. Потенц. ф-ция выражена через внутренние координаты, а переход к норм. координатам осуществлен нелинейным преобразованием. Показано, что для определения наиболее общего (учитывающего члены четвертого порядка) силового поля с 43 коэф. эксперим. данных недостаточно. Предложено модифицированное поле с 19 параметрами, в котором для описания ангармоничности валентных связей вводятся ф-ции Морзе и учитывается ряд ангармонич. членов, соответствующих взаимодействию валентных связей с углами и углов между собой. Найденный набор силовых коэф. для этого поля удовлетворительно воспроизводит эксперим. данные по ω_n^0 , x_{mn} и α_n .

М. Р. Алиев

1969

8102w Anharmonic force constants of acetylene. Cubic and quartic force constants of acetylene; calculations with a general quartic force field and an empirical anharmonic potential function. Suzuki, Isao; Overend, John (Univ. of Minnesota, Minneapolis, Minn.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1969, 25(5), 977-87 (Eng). Literature values of the vibrational frequencies and rotational consts. of C_2H_2 , C_2HD , and C_2D_2 have been used to det. the anharmonic force-consts. The most general quartic valence potential function has been investigated although there are presently insufficient data to fix all the force consts. uniquely. An empirical 19-parameter anharmonic potential function is described which fits the exptl. data as well as the 40-parameter general force field. Internally self-consistent sets of α_{ij} , and ω_i are given.

RCSQ

C.A. 1969. 71. 2

C_2H_2

XIV-1128

1970

Binerboym J., Schaef-
fer R.

Vi;

Inorg. Chem., 1970, 9,
N6, 1578-80.

C_2H_2

Bodor N., et al.

1970

J. Amer. Chem. Soc., 92,
13, 3854.

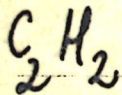
λ ;

св. пост;
 γ .

Основное состояние
молекулы с σ -связью. X.
Расширенный метод
промежуточного усредне-
ния  дифференциальной
интерпретации на соеди-

книже, содержание атом
или кислорода.





ис. пер.
расчет

Гимарс В. М.

1970

Г. Амур. Учен. Зв.,
92 (2), 266.

(ис. C_2N_2) III

C_2H_2

Gründler W.

1870

Tetrahedron,

Helium
abzu



XIV-1649

1970

C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 (ZC-H)

Janoschek R.,

Z. Naturforsch., A 1970, 25 (2),

311-12

(+2)

(X)

ECTI M. K.

10

1970

XIV-1669

 C_2H_2

(8050q) ab initio SCF and CI [configuration interaction] calculations of linear and bent acetylene. Kammer, Wolf E. (Inst. Theor. Phys., Giessen, Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1970, 6(5), 529-32 (Eng). Ab initio SCF MO and CI calcs. on C_2H_2 in linear and bent conformations indicate that most of the low-lying electronically excited states of C_2H_2 have stable cis and trans isomers. Calcd. transition energies are discussed in relation to obsd. optical absorption bands and electronic excitation energies.

FBJN

ub. mex.

paci

C. H. 1971. 14. 2

$CH \equiv CH$

XIV-1669

1970

5 Б61. Неэмпирический расчет линейной и нелинейной конформаций ацетилена методом ССП и КВ. Kammer Wolf Ekkehard. Ab initio SCF and CI calculations of linear and bent acetylene. «Chem. Phys. Lett.», 1970, 6, № 5, 529—532 (англ.)

С использованием базиса из 60 гауссовых функций, сгруппированных в 24 набора, рассчитаны основное и возбужденное состояния линейной и нелинейной конформации молекулы ацетилена. Рассчитанные спектры поглощения находятся в хорошем соответствии с эксперим. данными по электронному удару. Из резюме

расчет;

м. и.;

хим. сп-ра;

X. 1971. 5

1970

XIV-546

HC:CH

26076g Mass-spectrometric studies of mono- and dihalo-
acetylenes. Kloster-Jensen, Else; Pascual, C.; Vogt, Jan
(Phys.-Chem. Inst., Univ. Basel, Basel, Switz.). *Helv. Chim.
Acta* 1970, 53(8), 2109-18 (Eng). The C:C bond dissoen.
energies of halogenated acetylenes, detd. from the CH^+ and CX^+
appearance potentials, were HC:CH 230, FC:CH 178, ClC:CH

166, BrC:CH 202, IC:CH —, ClC:CCl 125, BrC:CBr 155, IC:CI —, ClC:CBr 150, ClC:CI 173, and BrC:CI 174 kcal/mole.
The appearance potential of CH^+ from IC:CH could not be detd.
because of the low abundance of this ion. CWJN

No (C:C)

C. A. 1971. 74. 6

+8 III;

+9 I



$H-C \equiv C-H$

XIV-546

1970

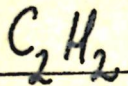
9 Б84. Масс-спектрометрическое исследование моно- и дигалогенацетиленов. Kloster—Jensen Else, Pascual C., Vogt J. Mass spectrometric studies of mono- and di-haloacetylenes. «Helv. chim. acta», 1970, 53, № 8, 2109—2118 (англ.)

Do. Исследованы масс-спектры ряда галогенацетиленов (в скобках приведены значения энергий диссоциации $-C \equiv C-$ связи в ккал/моль, вычисленные исходя из измеренных потенциалов появления ионов CH^+ и CX^+ , где X — галоген): $H-C \equiv C-H$ (230), $F-C \equiv C-H$ (178), $Cl-C \equiv C-H$ (166), $Br-C \equiv C-H$ (202), $Cl-C \equiv C-Cl$ (125), $Br-C \equiv C-Br$ (155), $Cl-C \equiv C-Br$ (150), $Cl-C \equiv C-J$ (173) и $Br-C \equiv C-J$ (174). Определены потенциалы появления одно- и двухзарядных молек. ионов исследуемых соединений. Б. В. Розынов

+8 III,
+9 I.

X. 1971.9

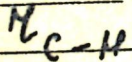




Maksic Z.B.
Randic M.

1970

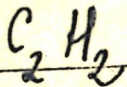
J. Amer. Chem. Soc.,
92, 424-5.



proton

(see C_2H_6) III





Si.
paerem

Manne R.

1970

J. Chem. Phys. 52 (11),
5733.

(all. CH₄) III

C₂H₂

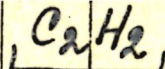
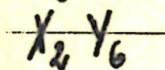
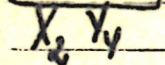
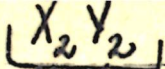
1970

UK-checker

(105030r) Infrared bands of acetylene-¹²C, -¹³C, and -¹²C¹³C.
Mickelson, Michael E. (Ohio State Univ., Columbus, Ohio).
1969, 368 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor,
Mich., Order No. 70-14,074. From *Diss. Abstr. Int. B* 1970,
31(2), 854.

SNDC

C. A. 1971. 74.2D.



1970

~~03510-~~ Symmetry rule for predicting the structures of molecules. II. Structure of $X_2 Y_n$ molecules. Pearson, Ralph G. (Chem. Dep., Northwestern Univ., Evanston, Ill.). *J. Chem. Phys.* 1970, 52(5), 2167-74 (Eng). By using the 2nd-order Jahn-Teller effect as a criterion, mol. shapes are predicted for mols. with the formulas $X_2 Y_2$, $X_2 Y_4$, and $X_2 Y_6$. The method is remarkably successful, the only failure being the inability to predict the correct angle of rotation about single bonds. However, this is a necessary failure. RCJQ

Структура
параметры

(437)



C. A. 1970. 72. 18



C_2H_2

1970

4 Д173. Об эффекте Реннера в молекуле ацетилен.
Петелин А. Н. «Оптика и спектроскопия», 1970, 29,
№ 6, 1153—1155

Рассмотрен эффект Реннера в линейной молекуле типа X_2Y_2 , находящейся в электронном $^1\Pi$ -состоянии. Расчет проведен с помощью теории возмущений для малой постоянной электронно-колебательного взаимодействия. Приводятся выражения для уровней энергии E_{v_1, v_2} при $v_1=1, v_2=0$ и $v_1=0, v_2=1$ (с точностью до членов 2-го порядка малости). Показано, что эти уровни расщепляются на 3 компоненты. Кратко обсуждается вопрос о сопоставлении полученных результатов с известными спектральными данными (по спектрам поглощения) для молекул C_2H_2 и C_2D_2 .

В. А. Морозов

эффект
Реннера

ор. 1971. 48

C_2H_2

1970

(104848b) Renner effect in an acetylene molecule. Petelin,
A. N. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1970, 29(6), 1153-5 (Russ).
The Renner effect in a linear mol. of the type X_2Y_2 in the elec-
tronic $^1\pi$ state is theoretically discussed. The absorption
of C_2H_2 and C_2D_2 at $\sim 1250 \text{ \AA}$ ($^1\Pi_u - ^1\Sigma_g^+$ transition) was solved in
terms of derived equations based on wave functions of the mol.
All 3 bands corresponding to the 00001-00001 transition of both
mols. were estd.

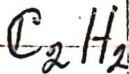
M. Tichy

(+1) IV

C.A. 1971. 74. 20

(+1) IV, обг





1970

3 Д288. Принцип Франка — Кондона для ионизации многоатомных молекул. Rosenstock H. M., Botter R. Franck — Condon principle for the ionization of polyatomic molecules. «Recent Develop. Mass Spectroscopy. Proc. Int. Conf. Mass Spectroscopy, Kyoto, 1969». Tokyo, 1970, 797—806. Discuss., 806 (англ.).

Обзор работ по применению принципа Франка — Кондона к рассмотрению переходов в ионизационное состояние в многоатомных молекулах. Обсуждается колебательная структура кривых ионизации в молекулах C_2H_2 , H_2O , NH_3 и N_2O . Даны примеры, иллюстрирующие различные проблемы при применении принципа Франка — Кондона к рассматриваемым переходам, такие, как выбор частот переходов, учет изменения гео-

кривые
иониз

ф. 1975 №3

☒ (+1) f.m.m.

☒ (+3)

☒ (+1)

м.с

метрии и симметрии иона по сравнению с молекулой,
учет аангармоничности и смешивания колебаний при вы-
числении множителей Франка — Кондона. Библ. 30.
В. А. Морозов

1970

C_2H_2

расчет

V_i

м.и.

см.и.

X. 1970. 21

21 Б88. Анализ колебаний некоторых молекул X_2Y_2 методом функции Грина. Ramaswamy K., Srinivasan K. Green's function analysis of some X_2Y_2 linear molecules. «J. Mol. Struct.», 1970, 5, № 5, 337—344 (англ.)

Методом функции Грина выведены новые изотопич. соотношения между частотами колебаний пар линейных X_2Y_2 — $X_2'Y_2$, X_2Y_2' , $X'XY_2$ и X_2YY' . При помощи этих соотношений вычислены частоты ряда изотопозамещенных (по Н и С) молекулы ацетилена. Полученные значения частот согласуются с эксперим. Вычислены также силовые постоянные C_2H_2 , средние амплитуды колебаний, постоянные центробежного искажения (D) и кориолисова взаимодействия (ζ) молекул C_2H_2 , C_2D_2 , C_2T_2 и $^{13}C_2H_2$. Значения D и ζ -постоянных удовлетворяют соотношению между ними.

М. Р. Алиев

+2

18

C_2H_2

Thomas T.D.

1870

J. Chem. Phys., 52(3),
1873.

(9)

(acc. CH₄) III

1971

C₂H₂

8 Б1413. Флуоресценция при фотолизе ацетилена в области вакуумного ультрафиолета. Becker K. H., Nakas D., Schürgers M. Fluorescence in the vacuum-uv photolysis of acetylene. «Z. Naturforsch.», 1971, 26a, № 10, 1770—1771 (англ.)

фотолиз;
спектр
флуоресц.

Зарегистрирован спектр флуоресценции (ФЛ) C₂H₂ при давл. 0,02—0,12 мм, возбуждаемой светом Кг-резонансной лампы (в основном λ 1236 Å, 20% интенсивности — в области λ 1165 Å). Спектр ФЛ сравнивается со спектром испускания пламени (СИП) в зоне р-ции C₂H₂ с атомами О. Оба спектра (при разрешении $\Delta\lambda \sim 10$ Å) содержат широкую полосу, начинающуюся при $\lambda \sim 4000$ Å и простирающуюся далеко в красную область до $\lambda \sim 5700$ Å ($\lambda_{\text{макс.}} \sim 4900$ Å). Полосы Свана молекулы C₂ ($A^3\Pi_g \rightarrow X^3\Pi_u$) наблюдаются только в СИП. Спектр ФЛ не обнаруживает какой-либо структуры да-

узн.
(лизи-
ция)

X. 1972.8

же при его регистрации с $\Delta\lambda = 0,5 \text{ \AA}$, что позволяет исключить любую двухатомную молекулу как возможный носитель X^* спектра ФЛ. Квантовый выход ФЛ составляет 0,1%. В опытах с изменением давл. показано, что естественное время жизни X^* равно 6,2 мксек. Константы скорости тушения ФЛ различными молекулами таковы ($10^{-11} \text{ см}^3/\text{молекула} \cdot \text{сек}$): C_2H_2 15 ± 2 ; H_2 $8,3 \pm 1,5$; N_2 $5,2 \pm 1,5$; Ar $6,4 \pm 1,5$. Сделан вывод, что X^* образуется в перв. акте фотолиза C_2H_2 . Не обнаружено никакой ФЛ под действием света 1236 $\text{\AA}$ на производные C_2H_2 : MeC_2H , EtC_2H , C_4H_2 , лишь для CNC_2H наблюдаются фиолетовые полосы спектра ФЛ CN^* . Не обнаружено также резонансной ФЛ C_2H_2^* . Сделан вывод, что X^* является молекула C_2H_2^* или (менее вероятно) C_2H^* . Возбуждение C_2H_2^* , вероятно, происходит в запрещенном оптич. переходе, что объясняет малый квантовый выход ФЛ. Широкая полоса в СИП может объясняться передачей энергии от высоковозбужденных молекул CO^* к C_2H_2 . Эта полоса отсутствует в СИП зоны р-ции в системе $\text{C}_3\text{O}_2 + \text{O} + \text{H}$.

В. Е. Скурат

1941

C_2H_2
cu. no. ob.

Boyd R. Y.
Whitehead M. A.

J. Chem. Soc., 1941,

St., no. 22, 3549.

(Cu. Bk) IV.

сравнение арбит. мерной и
 поперечников показавшей
 системы параметров. (ЭV)

м-ла	Арбит.	I	II	III	IV	мер.
C_2H_2	Tu	11.55	10.24	12.02	10.80	11.40 Tu
	σ_g	13.56	12.80	13.90	13.78	16.44 σ_g
	σ_u	19.42	18.78	19.52	18.93	18.42 σ_u
	σ_g	29.26	29.31	26.19	25.24	

C_2H_2	Chaturvedi G. C., 1971 Rao C. N. R.
Vi, cell. n.	spectrochim. acta, 1971, <u>A24</u> , ~10, 2097 ● (Cu. HCN) <u>III</u>

Dissertation 2995

1941

 C_2H_2

5 Б45. π -Электронная теория ацетилена. II. Неограниченный метод Хартри — Фока. Dancz John, Harris Robert A. Pi-electron theory of acetylene. II. Unrestricted Hartree—Fock theory. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 6, 2868—2875 (англ.)

кв-мех
расчет

В рамках неограниченного метода Хартри—Фока, с использованием формализма вторичного квантования, проведен расчет молекулы C_2H_2 с вариацией параметров π -электронного гамильтониана Паризера—Парра—Попла. При сопоставлении с соотв-щими результатами точной диагонализации π -электронного гамильтониана найдено, что полученные симметризованные волновые функции дают хорошее описание всех изученных св-в π -электронной системы ацетилена: полной энергии, корреляц. функций и перекрывания с точной функцией основного состояния. Сообщ. № см. РЖХим, 1970, 18Б50.
Е. Шусторович

X. 1942. 5

C₂H₂

on m m c 2994

1971

refrue
no roeb

14

(124579p) Determination of new acetylene "hot bands" observed in the emission at 2.4μ . Delaval, Yves; Cartigny, Jacques; Lecomte, Jean (Lab. Rech. Phys., Univ. Paris VI, Paris, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. B* 1971, 273(2), 80-4 (Fr). In the emission spectrum of C₂H₂ at 770°K, bands near the ($\nu_1 + \nu_5$) band ($\nu_0 = 4091.18 \text{ cm}^{-1}$) were obsd. which were not obsd. at room temp. These bands are called hot bands and originate primarily in the ($\nu_1 + \nu_4^{\pm 1} + \nu_5^{\pm 1}$)- ν_4 and ($\nu_1 + 2\nu_5^{\pm 2,0}$)- ν_5 transitions. The ($\nu_1 + \nu_4 + \nu_5$) and ($\nu_1 + 2\nu_5$) levels were sufficiently populated to give rise to P, Q, and R lines of measureable intensity. The ($\nu_1 + 2\nu_4 + \nu_5$), ($\nu_1 + \nu_4 + 2\nu_5$), and ($\nu_1 + 3\nu_5$) were too weakly populated for measurement of fine structure. For the $\nu_1 + \nu_5$ band, $J \leq 46$ levels were attained.

C.A. 1971. 45. 20

C₂H₂

Витмисс 2992

1971

№ 2 Б190. Тонкая структура полос излучения ацетилена при 700° К в области 2,4 мкм (4100 см⁻¹). Delaval Yves, Cartigny Jacques, Lecomte Jean. Structure fine de bandes d'émission observées vers 2,4 μ (4·100 cm⁻¹) avec l'acétylène chauffé vers 700 K. «Mém. Soc. roy. sci. Liège», 1971, 1, № 2, 65—74 (франц.)

Р. Для изучения малоинтенсивного ИК-излучения нагретых газов использован растровый ИК-спектрометр системы Жирара, обеспечивший в этих условиях в области 4000 см⁻¹ разрешение 0,11—0,14 см⁻¹. Калибровка спектрометра по длинам волн проведена с помощью спектров излучения аргона и неона, возбуждавшихся в разрядных лампах. Полосы излучения ацетилена, нагретого до 770° К регистрировали в области 3969—4187 см⁻¹. Составная полоса $\nu_1 + \nu_2^{-1}$ (Π—Σ) в спектре излучения простирается вплоть до $l=46$. Для нее найдены ν_0 , B', B'', D' и D''. В этой же области исследованы горячие полосы. Г. Н. Жижин

М. Н.

X. 1972.2

C_2H_2

оттиск 2992

1971

2 Д531. Тонкая структура полос излучения ацетилена около 2,4 мк при температуре 700° K. Delaval Yves, Cartigny Jacques, Lecomte Jean. Structure fine de bandes d'émission observées vers 2,4 μ (4100 cm^{-1}) avec l'acétylène chauffé vers 700° K. «Mém. Soc. roy. sci. Liège», 1971, 1, № 2, 65—74 (франц.)
Получены ИК-спектры излучения ацетилена при т-ре 760° K с разрешением $0,1\text{ cm}^{-1}$ в области 4100 cm^{-1} .

М. П.

Ф. 1972.2.2Д

Спектры зарегистрированы на спектрометре Жирара решеткой 300 штрих/мм во втором порядке. Для градуировки спектрометра использованы спектры разряда в аргоне и неоне и нагретого СО. Наблюдаемые спектры связаны с переходом $\nu_1 + \nu_5'$ на основной уровень и рядом «горячих» переходов. Метод позволяет исследовать состояния с большими числами J вплоть до $J=45$. Приведены частоты P - и R -линий полосы $\nu_1 + \nu_5$ ацетилена, из анализа этих частот определены вращательные постоянные B и D в основном и возбужденном колебательных состояниях. По полосам горячих переходов изучена структура уровней, соответствующих возбуждениям нескольких колебаний. Определены величины расщеплений уровней на компоненты Σ^- и Σ^+ и Σ и Δ . Библ. 10.

М. В. Тонков

C₂H₂

(Vi)

XIV-2835
~~number~~ 2992

1941

(033016) Fine structure of the emission bands observed near 2.4μ (4100 cm^{-1}) in acetylene heated at 700°K . Delaval, Yves; Cartigny, Jacques; Lecomte, Jean (Fac. Sci., Paris, Fr.). *Mem. Soc. Roy. Sci. Liege, Collect.* 8° 1971, 1(2), 65-86 (Fr). The emission spectra of C₂H₂, heated to 760°K , in the $2.4\text{-}\mu$ region were obtained with the aid of a grating spectrograph. In spite of the weak emission gas spectra contg. fine structure were obtained. By utilizing the 5 fundamental bands of C₂H₂ and symmetry considerations, it was possible to calc. the origin of the obsd. bands with good accuracy. By using upper rotational levels it was possible to calc. rotational consts. that were in good agreement with those of other workers. This work illustrates a new way of studying high temp. vibrational-rotational bands.

Norman Slagg

C.A. 1941. 45. 16

C_2H_2

Hitchfield R.
at all

1941

paerem

J. Chem. Phys. 1941, 54,
W2, 724-28

● (Cu. H_2O)III

C_2H_2

$AlCl_4^-$

$LiAlCl_4$

M. n.

rb. Mex.
parent

C. A. 1942. 46.2

1941

69145 Quantum-chemical studies about acetylene, the tetrachloroaluminate(III) ion, and lithium tetrachloroaluminate(III). Drossbach, P.; Hoff, H. (Phys.-Chem. Elektrochem. Inst., Tech. Univ. Muenchen, Munich, Ger.). *Z. Naturforsch. A* 1971, 26(9), 1397-1406 (Ger). Calcns. are made for $HC\equiv CH$, $AlCl_4^-$, and $LiAlCl_4$ by using the SCF-MO-LC-LCGO method regarding all electrons. The orbital energies, populations, and orbital centers are reported. The dipole moment for $LiAlCl_4$ is 12.2923 D. Compared with the free atoms, the Roentgen levels in the mols. are not only lowered by chem. bonding but also lifted by the electron interaction. The discharge of an ion with simultaneous transition of several electrons is discussed.

(+2) ☒

C_2H_2

6 Б34. Квантово-химические исследования ацетилена, иона тетрахлоралюмината и тетрахлоралюмината лития. Drossbach P., Hoff H. Quantenchemische Untersuchungen an acetylen, tetrachloroaluminat(III)-ion und Lithiumtetrachloroaluminat(III) «Z. Naturforsch.», 1971, 26 a, № 9, 1397—1406 (нем.)

17/61

расчет

Неэмпирическим методом МО ССП проведен расчет C_2H_2 (I), $AlCl_4^-$ (II) и $LiAlCl_4$ (III). Для I использовался базис из 3 ГФ для H, 5 ГФ для s-АО C и 16 сгруппированных ГФ для 2p-АО C. Приведены полная и электронная энергии и вычисленный потенциал ионизации I (10,48 эв). Для расчета II использовалось 93 ГФ в виде 59 групп (приведены экспоненты ГФ, имитирующих s- и p-АО Al и Cl). Приведены орбитальные энергии II с указанием АО, дающих основные вклады в МО, а также координаты центров тяжести распределений электронов на всех МО. Расчет II проводился для 4 значений расстояния Al—Cl, минимум энергии соответствует расстоянию 2,06 Å (опыт

ДЖХ,

1972, № 6

(4) III 30/12/71

☒

2,13А). Обсужден механизм разряда II на электроде, как многоэлектронный процесс с образованием объединенных МО, включающих высшие заполненные МО иона и АО металла. Для расчета III использовались 99 ГФ в виде 64 групп. Из сопоставления данных для иона и соли найдена энергия процесса $\text{Li}^+ + \text{AlCl}_4^- = \text{LiAlCl}_4$, равная -115 ккал. Дипольный момент III оценен в $12,29$ D, причем выяснено, какая из МО дает наибольший вклад. Приведены графики распределения электронной плотности на нек-рых МО и проекция полной электронной плотности в III. Энергии МО сопоставлены с данными по энергиям связи электронов на внутренних АО в атомах по рентгеновским спектрам III. Прослежено также изменение энергий МО иона при взаимодействии с Li.

М. Дяткина

1941

C₂H₂

(u. n)

Kb. test.

paelem

C.A. 1942. 46. 2

(6915t) Calculation of the acetylene molecule. Egey, Thomas (Inst. Theor. Phys., Justus Liebig-Univ. Giessen, Giessen, Ger.). Z. Naturforsch. A 1971, 26(9), 1496-9 (Ger). The energy of the HC:CH mol. was calcd. by the valence bond method using a Born-Oppenheimer approxn. of the Hamiltonian. Only optimized electron (Slater) functions and homeopolar states were used to describe $3\ ^1\Sigma_g^+$ states and their superpositional state.

СН
2 2

Выпуск 2996

1971

12 Б47. Ридберговы термы ацетилена. Greene E. L., Wood W., Jr., Barnard Jonathan, Duncan A. B. F. Rydberg terms of acetylene. «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 1, 71—74 (англ.)

В одноэлектронном приближении вычислены волновые функции и энергии ридберговских уровней молекулы ацетилена. В качестве базиса использованы слейтеровские орбитали. Результаты расчета применены к интерпретации спектра поглощения C_2H_2 в вакуумной УФ-области. Показано, что серия с $\nu_n = 92076 - R/(n - 0,50)^2$ ($n = 3, 4, \dots, 10$) относится к переходам из основного состояния в состояния типа $1\pi_u$ с возбуждением одноэлектронных орбиталей $nS\sigma$, а серия с $\nu_n = 91950 - R/(n - 0,95)^2$ ($n = 3, 4, \dots, 10$) — к переходам из основного состояния в состояния типа $1\Sigma_u^+$ с возбуждением $nd\pi_g$ -орбиталей.

М. Р. Алнев

Х. 1971. 12

C₂H₂

ammelle 2996

1971

(26294b) Rydberg terms of acetylene. Greene, Elwood W., Jr., Barnard, Jonathan; Duncan, A. B. F. (Dep. Chem., Univ. Rochester, Rochester, N.Y.). *J. Chem. Phys.* 1971, 54(1), 71-4 (Eng). It is assumed that 2 obsd. Rydberg series in C₂H₂ correspond to (ns) and (nd) orbital excitation. Calcs. in a 1-electron approxn. support the assumption in both cases. The core is assumed to be frozen and linear and interat. distances unchanged from normal state values in the Rydberg states and in the lowest state of the ion. The terms agree well with exptl. values. The Rydberg functions are obtained as linear combinations of Slater functions and energies are stable to variation of both linear and nonlinear parameters. RCJQ

Greene
Pugsepa

C.A. 1971. 74.6

C_2H_2

XIV-287

1971

структ.
парам.

24 Б129. Сравнение геометрии основного состояния $C_2H_2^+$, определенной методом фотоэлектронной спектроскопии, с геометрией C_2H_2 в некоторых ридберговских состояниях. Hollas J. M., Sutherland T. A. The geometry of the ground state of $C_2H_2^+$ from photoelectron spectroscopy compared with that of C_2H_2 in some Rydberg states. «Mol. Phys.», 1971, 21, № 1, 183—185 (англ.)

Из относит. интенсивности электронно-колебательных полос фотоэлектронного спектра C_2H_2 при 11,40 эВ (первый порог ионизации) с использованием принципа

X. 1971.24

с



Франка—Кондона в гармонич. приближении вычислены
 изменения внутренних колебательных координат C_2H_2
 при ионизации ($\Delta(C-H)=0,012$, $\Delta(C\equiv C)=0,050A$) и
 структурные параметры иона $C_2H_2^+$ в основном состо-
 янии $\tilde{X}^2\Pi_u$ ($CH=1,06 \pm 0,01$, $CC=1,25 \pm 0,01A$,
 $\angle HCH=180^\circ$), а из относит. интенсивностей полос ва-
 куумного УФ-спектра поглощения C_2H_2 вычислены
 структурные параметры C_2H_2 в возбужденном ридбер-
 говом состоянии $C^1\Pi_u$ ($CH=1,075 \pm 0,025$, $CC=1,265 \pm$
 $\pm 0,02$, $\angle HCH=180^\circ$). Показано, что структурные пара-
 метры иона $C_2H_2^+(\tilde{X}^2\Pi_u)$ очень близки к соотв-щим
 структурным параметрам молекулы C_2H_2 в ридберговых
 состояниях $\tilde{G}^1\Pi_u$ и $\tilde{C}^1\Pi_u$.

М. Р. Алнев

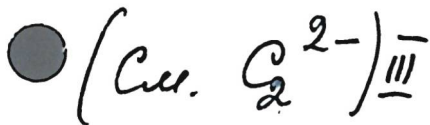
C_2H_2

Hopkinson A.C.,
Csi & madia Y.G.

1971

некр.
стр-ие;
соедин
к
цотон

Chem. Commun., 1971,
N20, 1291.



C_2H_2

C_2HD

C_2D_2

liq.

noct.

number 2993

1941

92592 Energy levels and molecular constants of acetylene, acetylene- d_2 , and acetylene- d_1 determined from infrared spectra. Hurlock, S. C.; Ghersetti, Sergio; Rao, K. Narahari (Dep. Phys., Ohio State Univ., Columbus, Ohio). *Mem. Soc. Roy. Sci. Liege, Collect.* 8° 1971, 1(2), 87-97 (Eng). A summary is given of the best available energy levels and mol. consts. as detd. by high resoln. ir spectroscopy for the electronic ground states of C_2H_2 , C_2HD , and C_2D_2 . W. J. Lafferty

(+2) ☒

C.A. 1941. 45. 14

1971

C₂H₂

Faegle H.
August H. at all

Do.

(оченька)

J. Chim phys. et phys.

chim. Biol. 1941, 68, W-7-8

1159-61

(C₂H₂) III

C_2H_2 ;

$C_2H_2^+$

coll.

ср-ра

Lathan W. A.
at all

1941

J. Amer. Chem. Soc.
1941, 93, 14, 808-215

$(C_{22}H_2)_{IV}$

1971.

 C_2H_2 C_2HSiF_3

n gp

(ny)

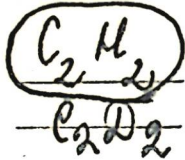
kb-mex

paere

(V1403w) Analysis of the ionization potentials and the charge distribution of silyl and alkyl substituted π -hydrocarbons using the complete neglect of differential overlap/2 (CNDO/2) method. Pitt, C. G. (Chem. Life Sci. Lab., Res. Triangle Inst., Research Triangle Park, N.C.). *J. Chem. Soc. D.* 1971, (15), 816-18 (Eng). CNDO/2 MO calcns. on acetylenes $RC\equiv CH$ ($R = SiF_3$, CF_3 , SiH_3 , SiH_2Me , Si_2H_5 , H, Me, Et, CH_2SiH_3) reproduced exptl. obsd. trends in charge distribution, despite the omission of d -orbitals from the Si basis set.

(+ 8) $\boxtimes$.

C. A. 1971. 45. 14



v_i

2015-11-18

Schwartz V.A.

1971

Ron A., Kimmel S.

J. Chem. Phys., 54(1), 99.

(Coll. C_2H_6) III

C_2H_2

1971

786-114

11 Д153. Использование модифицированного расширенного метода Хюккеля в динамике молекул, содержащих кратные связи. Yeranov Walter A. The use of the modified extended Hückel method in the dynamics of molecules containing multiple bonds. «Z. Naturforsch.» 1971, 26a, № 6, 947—952 (англ.)

В рамках модифицированного варианта расширенного метода Хюккеля рассмотрены ацетилен, этилен и этан. Подробно исследованы изменения полной энергии при всех возможных вариациях геометрии. Рассчитанная геометрия наиболее стабильных конфигураций хорошо согласуется с опытом. Оценены параметры, позволяющие с помощью предложенных ранее ф-л рассчитать энергии атомизации алифатич. и ароматич. углеводородов. Энергии атомизации найдены равными (в скобках — опытные значения все в ккал/моль) 19,7 (19,7); 24,5 (22,6) и 28,8 (29,1) эв соответственно; барьер вращения в этане 2,9 (2,7—3,0). В. Л. Лебедев

Ф. 1971. 112

+2



1972.

8 Б123. Диссоциативное присоединение электронов к C_2H_2 и C_2D_2 . Azria R., Fiquet-Fayard F. Attachement électronique dissociatif sur C_2H_2 et C_2D_2 . «J. Phys.» (France), 1972, 33, № 7, 663—667 (франц.; рез. англ.)

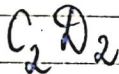
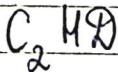
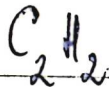
Изучены энергетич. характеристики и влияние изотопного замещения на процесс присоединения электронов низкой энергии (0—15 эв) к молекулам C_2H_2 (I) и C_2D_2 (II). Квазимоноэнергетич. пучок, образованный по методу разности задерживающих потенциалов, взаимодействовал в камере столкновений с I и II (рабочее давл. 10^{-4} — 10^{-5} мм). Положительные (ПИ) и отрицательные (ОИ) ионы регистрировались отдельно. Масс-спектрометрически идентифицированы 4 наблюдавшиеся максимума интенсивности ОИ в зависимости от энергии электронов E : C_2H^- (III) при $E=2,55$ эв; C_2H^- , C_2^- , H^- (7,45 эв); C_2^- (два максимума 11,45 и 13,05 эв). Для III

х. 1973. № 8.

получены кривые эффективности ионизации, потенциал появления ($2,3 \pm 0,1$ эв) и абс. сечения процесса (σ) при различных значениях E [$\sigma_{III\text{макс}} = (2,2 \pm 0,3) \cdot 10^{-20} \text{ см}^2$]. Определены при $E=75$ и 100 эв величины σ^+ для I и II: $\sigma_{I^+} = 4,7 \pm 0,15 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$, $\sigma_{II^+} = 5,0 \pm 0,15 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$.

М. Туркина

1972

V_i

U.K. magazine

C.A. 1972. 76. 26

160350m Infrared spectra of acetylene in matrixes at low temperatures. II. Bagdanskis, N. I.; Bulanin, M. O. (USSR). *Opt. Spectrosk.* 1972, 32(3), 525-30 (Russ). The ir absorption spectra of C_2H_2 , C_2HD , and C_2D_2 in N matrixes were studied at 20°K before and after annealing at 27-35°K by using the earlier described matrix isolation method (Bagdanskii, et al., 1970). The spectra revealed that C_2H_2 dimers in the matrix form open chain H bonds. The formation of cyclic dimers was not obsd.

C₂H₂

ammick 3000

1972

(Di)

(65776w) Assignments of the acetylene bands at 2.1-2.2 μ . Baldacci, Agostino; Ghersetti, Sergio; Rao, K. Narahari (Dep. Chem., Univ. Venice, Venice, Italy). *J. Mol. Spectrosc.* 1972, 41(1), 222-5 (Eng). The interpretation of the C₂H₂ bands at 2.1-2.2 μ are presented which resulted in altering previous assignments of the bands. The *J* assignments for the $\nu_3 + 2\nu_5^0$ band were changed by 2 units. The vibrational band origin is placed at 4727.07 instead of at 4722.06 cm⁻¹ given previously. With this revised *J* assignment the ground-state combination differences derived from the data for the $\nu_0 + 2\nu_6^0$ band agree well with the values obtained from more than half a dozen bands. The higher spectral resolution now available, combined with the internal consistency between the measurements made here and in other recent studies may have contributed to removing the ambiguities in the *J* assignments for this band. The reversal of the vibrational assignments for the bands $\nu_3 + 2\nu_4^0$ and $\nu_2 + (3\nu_4 + \nu_5)^0$ reported here is considered to be a logical consequence of the revised assignment for the ν_3 band. Raylene Adams Coad

C.A. 1972. 46. 12

Opium

309



C_2H_2

1972

11701m Bands of carbon-13 and deuterium-enriched species
of acetylene. Technology developed and interpretation of the
data observed. Barnes, Russel Henry, Jr. (Ohio State Univ.,
Columbus, Ohio). 1972, 210 pp. (Eng). Avail. Univ. Micro-
films, Ann Arbor, Mich., Order No. 73-1931. From *Diss. Abstr.*
Int. B 1973, 33(10), 4950.

(min)

C.A. 1973, 79 v2.

C_2H_2

(λ_i)

22 Б926. Триpletное состояние ацетилена. Испускание диацетила при фотосенсибилизированной ртутью реакции разложения. Burton C. S., Hunziker H. E. Triplet state of acetylene: biacetyl emission from the mercury photosensitized reaction. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 1, 339—347 (англ.)

При фотосенсибилизированном ртутью разложении диацетила (I) в проточных условиях с модулирующей возбуждающего света (2537А) в присутствии C_2H_2 наблюдалась фосфоресценция I. Показано, что фосфоресценция не вызывается C_6H_6 или др. продуктами разл. Предложен механизм, согласно к-рому испускание связано с переносом энергии от метастабильного триpletного C_2H_2 (II) к I. Скорость самотушения II составляет 0,083 от скорости переноса энергии от II к I. Показано, что триpletный уровень II лежит в пределах от 2,6 до 4,7 эв. Кроме того, оценена константа скорости триplet-триpletной аннигиляции I, равная $2 \cdot 10^{11}$ л/моль·сек.

А. Шведчиков

1982

1584 - 114

X. 1982. 22

C_2H_2

1972

Gedonbaum Stulce Torons

Diss., Dokt. Naturwiss. Fak.

Allg. Wiss. Techn. Univ. München.

1972. III. 11.

(all. H_2O ; III)

C_2H_2

1972

5 Д139. Исследование электронного строения молекул. XVII. Анализ образования молекул ацетилена, этилена и этана в модели Хартри — Фока. Clementi Enrico, Pople Herbert. Study of the electronic structure of molecules. XVII. Analysis of the formation of the acetylene, ethylene, and ethane molecules in the Hartree—Fock model. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 11, 4870—4883 (нагл.)

ϵ_i, U_0

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в больших базисах сгруппированных гауссовых ф-ций исследовано электронное строение ацетилена (I), этилена (II), этана (III) и нижнего синглетного состояния C_2 . Для II рассмотрены плоская и перпендикулярная, а для III — шахматная и затменная конформации. Производилось

Ф. 1973 N 5

(+3)

☒

C_2

C_2H_4

C_2H_6

варьирование геометрии в широких пределах. Рассчитаны полные, электронные, орбитальные и разного рода корреляц. энергии, релятив. поправки. Проведен анализ заселенностей по Малликену и анализ энергий путем разбиения на компоненты. Рассчитанные полные энергии отличаются от хартри-фоковских не более чем на 0,01 ат. ед. Подробно обсуждена природа связи СС. Обнаружено, что в I—III эксперим. гибридизация сильно отличается от «идеальной». Подробно обсуждена природа барьеров вращения в II и III; показано, что корреляц. поправки в барьеры вращения незначительны. Ч. XVI см. РЖФиз, 1972, 11Д, 126. В. Л. Лебедев

C_2H_2

1972

11 Б39. Исследование электронного строения молекул. XVII. Анализ образования молекул ацетилена, этилена и этана по методу Хартри — Фока. Clementi Enrico, Popkie Herbert. Study of the electronic structure of molecules. XVII. Analysis of the formation of the acetylene, ethylene, and ethane molecules in the Hartree—Fock model. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 11, 4870—4883 (англ.)

Эл. встроены

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в больших базисах сгруппированных гауссовых функций исследовано электронное строение ацетилена (I), этилена (II) в плоской и перпендикулярной конформациях, этана (III) в шахматной и затменной конформациях и C_2 (IV) в низшем синглетном состоянии. Варьировались длины связей С—С. Рассчитаны полные, орбитальные, электронные, различные корреляц. энергии, энергии диссоци-

2. 1973 N11

(+2)

C_2H_4
 C_2H_6



аппарат и релятивистские поправки. Проведен анализ энергии по схеме разбиения на компоненты и анализ заселенностей по Малликену. Отмечено, что полные энергии отличаются от хартри-фоковского предела не более чем на 0,01 ат. ед. Подробно обсуждена природа хим. связи в I—IV. Гибридизация в I—III найдена равной $2s^{1,30}2p^{0,77}$, $2s^{1,38}2p^{1,68}$ и $2s^{1,38}2p^{2,58}$ соотв. Детально исследованы барьеры вращения в II и III и отмечено, что корреляц. вклады в барьеры невелики. В III барьер обусловлен переносом заряда с атомов Н на С и сопряжением псевдо-2p-АО групп Н₃ с 2p-АО атомов С. Сообщ. XVI см. РЖХим., 1972, 22Б26.
В. Л. Лебедев

CH:CH

1972

Clark P. A., Preuss H.

М. П.

Кв. мех.
пацет

Z. Naturforsch. 1972, 27,
1294-9.

● (see CH₄) III

1972

 C_2H_2

22 B27. Исследование электронного строения органических соединений методом молекулярных орбиталей. XIV. Равновесная геометрия и энергии низколежащих возбужденных состояний. Ditchfield R., Del Bene J., Pople J. A. ~~Molecular-orbital-theory of the electronic structure of organic compounds. XIV. Equilibrium geometries and energies of low-lying excited states.~~ «J. Amer. Chem. Soc.», 1972, 94, № 14, 4806—4811 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО исследовано электронное строение ацетилена, цианистого водорода, фтористого циана, формальдегида, карбонилфторида (F_2CO), фтористого метилена ($HC\dot{F}$), нитроксила (HNO) и фтористого нитрозила (FNO) в основных и низколежащих возбужденных состояниях. Использован базис орбиталей слентеровского типа (ОСТ), каждая из к-рых представлена линейной комбинацией (ЛК) 4 гауссовых функ-

расчет
и.п.

мат. аппр.

+

X. 1972. 22

ций (ГФ). Производилась полная оптимизация всех геометрич. параметров с наложением только ограничений по симметрии. Характеристики возбужденных состояний рассчитывались с учетом взаимодействия до 64 однократно возбужденных состояний и также производилась оптимизация геометрии. Для ряда состояний указанных молекул, кроме HNO и F_2CO , проведены расчеты с базисом ОСТ, к-рые для внутренних оболочек представлялись ЛК 4 ГФ, а для валентных разбивались на внутреннюю — ЛК 3 ГФ — и внешнюю — 1 ГФ — части. Табулированы равновесные геометрии, полные энергии, энергии переходов. Полученные результаты хорошо согласуются с эксперим. данными, причем оба базиса приводят к близким значениям, включая длины связей между электроотрицательными атомами, где больший базис существенно лучше. Сообщ. XII. см. РЖХим, 1972, 17Б51. В. Л. Лебедев



1972

132731p Analysis of the ν_3 band profile of deuterated acetylene in solution at variable temperature. Elbez, Gerard; Soussen-Jacob, Janine; Vincent-Geisse, Josette (Lab. Rech. Phys., Univ. Paris VI, Paris, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. B* 1972, 275(6), 243-6 (Fr). The temp. dependence (203-303°K) of the ν_3 band width of C_2D_2 in CS_2 is well explained by a model of rotational diffusion across a potential barrier. The vibrational and rotational components were sepd., and the potential barrier to reorientation was calcd. as 1.3 kcal/mole. A study of the correlation function gave a similar value (1.2 kcal/mole).

(V₀)

C. R. 1972, 77, 20

C₂H₂

оттиск 3001

1972

16 Б273. Спектры комбинационного рассеяния высокого разрешения ацетилена, ацетилена- d_1 и ацетилена- d_2 . Fast H., Welsh H. L. High-resolution Raman spectra of acetylene, acetylene- d_1 , and acetylene- d_2 . «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 41, № 1, 203—221 (англ.)

С разрешением $\sim 0,3 \text{ см}^{-1}$ исследованы спектры КР молекул C₂H₂, C₂HD и C₂D₂ в газовой фазе. Идентифицированы чисто вращательные спектры и вращательная структура активных в КР основных полос и ряда обертонов, суммарных и разностных тонов этих молекул. Определены значения вращательной и центробежной постоянных, нулевых частот колебаний и нек-рых постоянных ангармоничности. М. Р. Алиев

М. Р.

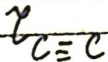
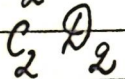
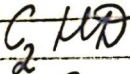
VI

X. 1972.

№

common 3001

1972



52209p) High-resolution Raman spectra of acetylene, acetylene-d₁, and acetylene-d₂. Fast, H.; Welsh, H. L. (Dep. Phys., Univ. Toronto, Toronto, Ont.). *J. Mol. Spectrosc.* 1972, 41(1), 203-21 (Eng). The Raman-active fundamental bands of C₂H₂, C₂HD, and C₂D₂, excited by Hg 4047 and Hg 4358 in a multiple-reflection Raman tube, were photographed with a spectral resolution of ~0.3 cm⁻¹. Extensive rotational structure was recorded for the ν_1 , ν_2 , and ν_3^1 bands of C₂H₂ and C₂D₂ and the ν_1 and ν_2 bands of C₂HD; Q branches only were obtained for the ν_3^1 band of C₂HD and the $2\nu_3^0$ band of C₂D₂. The rotational structures were computer-analyzed to yield values of ν_0 , B_1 , D_1 , and g , the ir value of B_0 being assumed. From the Q branches of hot bands certain anharmonicity consts. x_{ij} could be obtained. A combination of ir and Raman data, which best satisfied a consistency test, was used to obtain the equil. bond lengths, $r_e(\text{C}-\text{H}) = r_e(\text{C}-\text{D}) = 1.0605 \pm 3 \text{ \AA}$ and $r_e(\text{C}:\text{C}) = 1.2033 \pm 2 \text{ \AA}$.

Raman chemistry

C.A. 1972. F6.10

C_2H_2

1972

[4 Д154.] Вращательно-колебательный энергетический обмен. Динамика вращающейся ангармонической четырехатомной молекулы. Hung N a r l C h o w. Rotational-vibrational energy transfer. Dynamics of a rotating anharmonic four-atom molecule. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 12, 5202—5215 (англ.)

Теоретически для заданных начальных значений вращательной энергии и колебательной энергии различных мод исследована динамика перераспределения энергии между типами колебаний в четырехатомной вращающейся линейной симметричной молекуле. При этом внутримолекулярное взаимодействие описывалось тремя потенциалами Морзе. Численные расчеты проведены для молекул C_2H_2 , C_2D_2 и C_2N_2 . Для молекулы C_2H_2 проанализирован также случай, когда в результате перераспределения энергии между модами происходит разрыв связи, т. е. имеет место мономолекулярная реакция диссоциации.

Б. Ф. Горднеев

(ε_i)

Ф. 1973
N 4

(+2)



1972

9 B952. Колебательно-вращательный перенос энергии. Динамика вращающейся ангармонической четырехатомной молекулы. Hung N a r l C h o w. Rotational-vibrational energy transfer. Dynamics of a rotating anharmonic four-atom molecule. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 12, 5202—5215 (англ.)

В рамках классич. теории мономолек. р-ций с использованием потенциальных ф-ций Морзе для всех связей исследованы процессы внутримолек. переноса энергии и диссоциации в линейных симметричных четырехатомных молекулах типа A_2B_2 (деф. кол. не учтены). Выполнены численные расчеты временной зависимости распределения полной энергии (E) по колебательным (E_v) и вращательным (E_R) степеням свободы при различных начальных распределениях энергии по этим степеням свободы для молекул C_2H_2 , C_2D_2 и C_2N_2 . Показано, что при минимальном E_R значение $E_R + E_v$ очень близко к

Л: 1973. №9

(72) X

E_T , причем каждому минимуму на кривой временной зависимости E_R [т. е. на кривой $E_R(t)$] соответствует максимум кривой $E_V(t)$; сумма минимума $E_R(t)$ и максимума $E_V(t)$ близка к $E_T(t)$ при том же значении t , а кинетич. энергия системы обращается в нуль. Вращательная энергия передается вначале одному колебанию, а затем перераспределяется между всеми колебаниями. Расчеты выполнены также для диссоциационного порога этих молекул и показано, что в зависимости от запаса вращательной энергии диссоциировать могут как центральные, так и внешние связи. М. Р. Алнев

C_2H_2

1982

(Л.И.)

19 Б69. Исследования изогнутого транс-ацетилен с помощью интегральной теоремы Гельмана — Фейнмана. Melrose M. P., Briggs P. J. Integral Hellmann — Feynman investigations of trans bent acetylene. «Theor. chim. acta», 1972, 25, № 2, 181—188 (англ.)

Интегральная теорема Гельмана — Фейнмана использована для расчета разности энергии линейной и изогнутой ядерной конфигураций молекулы ацетилен в возбужденном электронном состоянии 1A_u . Плотность перехода, соотв-щая волновой функции типа МО ЛКАО, показывает, что изменения энергий орбиталей, диагонализующих плотность перехода, находятся в качеств. согласии с правилами Уолша для определения равновесной

X. 1982. 19.

ядерной конфигурации. В то же время для локализованных МО, построенных из гибридных АО, плотность перехода не согласуется с устойчивостью изогнутой ядерной конфигурации (это противоречит эксперименту). Это означает, что изменение гибридизации по схеме $sp \rightarrow sp^2$ не может быть основной причиной изменения геометрии молекулы ацетилена при электронном возбуждении.

Т. К. Ребани

1972

оттиск 299.7

C₂H₂
XIV-111

Vi; м.и

Ф. 19.13
N 5

5 Д391. Исследование некоторых ИК-полос $^{12}\text{C}_2\text{H}_2$ и изучение влияния колебательно-вращательных взаимодействий. Palmer Kent F., Mickelson Michael E., Rao K. Narahari. Investigations of several infrared bands of $^{12}\text{C}_2\text{H}_2$ and studies of the effects of vibrational rotational interactions. «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 44, № 11, 131—144 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения газообразного ацетилена в области 1,5—15 мк с разрешением 0,04 см⁻¹. Приведены частоты и отнесение колебательно-вращательных линий. В области 15 мк структура связана с колебательной полосой ν_5 , двумя компонентами полосы $2\nu_5-\nu_5$ и тремя — полосы $\nu_4+\nu_5-\nu_4$, уточнены частоты соответствующих переходов. В области 7,5 мк наблюдается полоса $(\nu_4+\nu_5)^2$, разрешенная колебательно-вращательным взаимодействием. Произведено переотнесение линий полосы $\nu_3-\nu_4^1$, вычисление константы q_4 на основании новой нумерации улучшило согласие с теорией. Определено относит. положение компонент c и d состояний Δ и Π , для обоих состояний c -компонента выше, чем d . Приведены вычисленные значения колебательных частот и вращательных постоянных в основном и возбужденном колебательных состояниях. Библ. 7.

М. В. Тонков

C₂H₂

XIV-4234

1972

(u.n)

120181w Several infrared bands of acetylene and studies of the effects of vibrational-rotational interactions. Palmer, Kent F.; Mickelson, Michael E.; Rao, K. Narahari (Dep. Phys., Ohio State Univ., Columbus, Ohio). *J. Mol. Spectrosc.* 1972, 44(1), 131-44 (Eng). Twenty seven ir bands of ¹²C₂H₂ in 7 selected regions were measured with high resolu. vacuum spectrographs. Some of these were studied for the 1st time under high resolu., several mol. consts. were detd. with improved accuracy, and the rotational assignments were cor. in a few instances. The need to det. the relative orientations of the Δ states from exptl. studies has become evident in recent work related to C₂D₂ and C₂HD spectra. In the present investigation, for the 2 Δ states 0000⁰2² and (0011)² the *c* component was higher than the corresponding *d* component. For the 1st time, a Π state was also established to have the same feature; normally, in the case of Π states the Π_d component is higher than the Π_c .

immer 2997

C.A. 1972. 44. 18

20429.4543

Ch1.1.5

 C_2H_2 (v_i, м.и.)
41125XIV 3933
1972

Kazakhazi Rao K. 12 C_2H_2 bands
Assignments of the
at 2.1-2.2 μ . "J. Mol. Spectrosc.",
1972, 41, N 1, 222-225

10

(англ.) 0610 пик.

597 599

603

ВИНИТИ

C₂H₂

~~Y+V-1234~~

1972..

(u.n)

9716f Finer details in the infrared bands of acetylene. Palmer, Kent Friedley (Ohio State Univ., Columbus, Ohio). 1972, 236 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 72-21,000. From *Diss. Abstr. Int. B* 1972, 33(2), 859.

C.A. 1973. 78. N2

1972

 C_2H_2

4 Б72. Эффект Реннера в четырехатомных молекулах. Petelin A. N., Kiselev A. A. The Renner effect in four-atomic molecules. «Int. J. Quant. Chem.», 1972, 6, № 4, 701—716 (англ.; рез. франц., нем.)

Рассмотрен эффект Реннера (взаимодействие электронного и колебательного угловых моментов) в электронных ${}^1\Pi$ -состояниях линейных молекул X_2Y_2 и X_2YZ . Построена матрица электронно-колебательной энергии, и методом возмущений во втором приближении получены ф-лы для энергии уровней. Показано, что для молекул X_2Y_2 энергия зависит от двух, а для молекул X_2YZ — от трех параметров электронно-колебательного взаимодействия. Результаты использованы для анализа колебательной структуры электронного перехода ${}^1\Pi_u \rightarrow {}^1\Sigma_g^+$ молекул C_2H_2 и C_2D_2 и вычислены частоты колебаний и параметры взаимодействия для этих молекул.

М. Р. Алнев

(vi)

X. 1973. №4.


 (+1) ☒

1972

 C_2D_2 C_2H_2

(M.N.)

81366p Renner effect in four-atomic molecules. Petelin, I. N.; Kiselev, A. A. (Inst. Phys., Leningrad State Univ., Leningrad, USSR). *Int. J. Quantum Chem.* 1972, 6(4), 701-16 (Eng). The theory of the Renner effect in X_2Y_2 and X_2YZ linear mols. is considered. The Renner equations were obtained with the help of the Born-Oppenheimer method. These equations contain 2 Renner parameters for an X_2Y_2 mol. and 3 Renner parameters for an X_2YZ mols. By assuming these parameters to be small enough, an approx. soln. of the Renner equations was obtained with the help of perturbation theory. Some general qual. results are obtained in the 1st order of the perturbation theory; the 2nd order calcns. are made for some specific cases. The theoretical results are used to consider exptl. data concerning the vibrational structure of the $^1\Pi_u - ^1\Sigma_g^+$ electronic transition in C_2H_2 and C_2D_2 . The frequencies of the bending vibrations and the Renner parameters were calcd. for the electronic $^1\Pi_u$ -state mentioned.

C.A. 1972. 44. 12

1972

C_2H_2
 C_2D_2

2 Д101. Эффект Реннера в четырехатомных молекулах. Petelin A. N., Kiselev A. A. The Renner effect in four-atomic molecules. «Int. J. Quant. Chem.», 1972, 6, № 4, 701—716 (англ.; рез. франц., нем.)

(V)

Рассматривается теория эффекта Реннера для линейных молекул типа X_2Y_2 и X_2YZ . С помощью метода Борна—Оппенгеймера выведены ур-ния Реннера. В случае молекулы X_2Y_2 эти ур-ния содержат 2, а в случае молекулы X_2YZ — 3 параметра Реннера. Предполагая эти параметры достаточно малыми, авторы получили по теории возмущений решение ур-ний Реннера. Обсуждены качеств. следствия из свойств решений, найденных в первом порядке. Расчеты во втором порядке выполнены для некоторых частных случаев. Результаты использованы для интерпретации наблюдаемой колебательной структуры электронного перехода $^1\Pi_u \rightarrow ^1\Sigma_g^+$ в молекулах C_2H_2 и C_2D_2 . Вычислены частоты колебаний изгиба и параметры Реннера для электронного состояния $^1\Pi_u$.

Т. К. Ребане

Риср-1973-2

C₂H₂

ommuca 2948

1972

(Vi)

(120225) Spectrum of acetylene in the 5- μ region. Pliva, Josef (Dep. Phys., Pennsylvania State Univ., University Park, Pa.). *J. Mol. Spectrosc.* 1972, 14(1), 145-64 (Eng). Three $\Pi_u - \Sigma_g^+$ bands, $2\nu_4 + \nu_3$ at 1959.697 and 1940.003 cm⁻¹ and $3\nu_3$ at 2169.166 cm⁻¹, accompanied by 15 $\Sigma^+ - \Pi$, $\Sigma^- - \Pi$, $\Delta - \Pi$, and $\Pi - \Pi$ "hot" bands occurring in the region between 1830 and 2250 cm⁻¹ were measured and analyzed. The $\Sigma_u^+ - \Sigma_g^+$ band $3\nu_4 + \nu_3$ at 2560.600 cm⁻¹ was also measured. The upper states of many of the transitions investigated are involved in strong vibrational-rotational interactions causing some effects not previously seen in the vibration-rotation spectra of simple linear mols. The results obtained were combined with the available information from other regions of the spectrum to calc. an internally consistent set of consts. for the ground state, for the Π -states 0001⁰0¹ and 0000¹1¹ as well as for the various higher excited states of the bending vibrations of C₂H₂.

XIV-4243

C.A. 1972.44.18

C_2H_2

оттис 2998

1972.

10 Б239. Спектр ацетилена в области 5 микрон.
Pliva Josef. Spectrum of acetylene in the 5-micron
region. «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 44, № 1, 145—164
(англ.)

Изучена вращательная структура 18 вращательно-колебательных ИК-полос ацетилена (I) в области $1830—2250\text{ см}^{-1}$ (три полосы переходов типа $\Pi_u \Sigma_u^+$ и полосы $2\nu_4 + \nu_5$ при $1959,697$ и $1940,003\text{ см}^{-1}$ и полоса $3\nu_5$ при $2169,166\text{ см}^{-1}$, сопровождаемые 15 «гор.» полосами $\Sigma^+—\Pi$, $\Sigma^-—\Pi$, $\Delta—\Pi$ и $\Pi—\Pi$). Измерена также $\Sigma_u^+—\Sigma_g^+$ полоса I $3\nu_4 + \nu_5$ при $2560,600\text{ см}^{-1}$. Верхние состояния многих исследованных переходов участвуют в сильных вращательно-колебательных взаимодействиях, вызывающих нек-рые эффекты в области G-ветвей, к-рые ранее не наблюдались во вращательных колебательных

(м.п.; ν_i)

XIV-14243

X. 1973. № 10

спектрах простых линейных молекул. Полученные результаты соединены с доступной информацией из др. областей спектра I. На основе этих данных вычислен и затабулирован внутренне согласованный набор молек. постоянных I в основном состоянии, в II-состояниях 0001^10^0 и 0000^01^1 , а также в различных высших возбужденных состояниях деф. кол. I. По резюме

C_2H_2

4 Д225. Молекулярные постоянные для деформационных колебаний ацетилена $^{12}C_2H_2$. Pliva Josef. Molecular constants for the bending modes of acetylene $^{12}C_2H_2$. «J. Mol. Spectrosc.»; 1972, 44, № 1, 165—182 (англ.)

С учетом кубических и квартичных членов ангармоничности в потенц. ф-ции и эффектов колебательно-вращательного взаимодействия вплоть до 4-го порядка получены общие ф-лы для гамильтониана и его матричных элементов в базисе жесткого волчка и гармонич. осциллятора для молекул типа ацетилена. Приведены выражения постоянных ангармоничности, l -удвоения и l -резонанса через молекулярные параметры. Составлена программа для расчета частот колебательно-вращательных переходов и молекулярных постоянных, основанная на методе наименьших квадратов. Из частот ~1200 линий вычислены значения 40 молекулярных постоянных для $^{12}C_2H_2$, характеризующих деформационные колебания ν_4 и ν_5 , их взаимодействие между собой и их взаимодействие с вращением.

М. Р. Алиев

min.

Ф. 1973
N 4

1972!

5667 м.м.м.

C₂H₂

1972

(M.N)

120186b Molecular constants for the bending modes of acetylene. Pliva, Josef (Dep. Phys., Pennsylvania State Univ., University Park, Pa.). *J. Mol. Spectrosc.* 1972, 44(1), 165-82 (Eng). The problem of the bending vibrations and of the vibrational l-type resonance in C₂H₂ is briefly reviewed and the vibration-rotation energy matrix is given in explicit form for various higher excited states of the bending modes ν_4 and ν_5 . New extensive data available for the mol. of ¹²C₂H₂ are used to obtain a set of vibrational, vibration-rotation coupling, and centrifugal consts. in the 4th-order energy expression for the excited bending states. A set of 40 mol. consts. capable of reproducing a total of ~1200 vibrational-rotational energy levels with a std. deviation of 0.006 cm⁻¹ is tabulated.

number 2999

C.H. 1972. 44. 18

C₂H₂

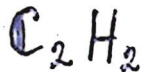
1972

(M.N)

120186b Molecular constants for the bending modes of acetylene. Pliva, Josef (Dep. Phys., Pennsylvania State Univ., University Park, Pa.). *J. Mol. Spectrosc.* 1972, 44(1), 165-82 (Eng). The problem of the bending vibrations and of the vibrational *l*-type resonance in C₂H₂ is briefly reviewed and the vibration-rotation energy matrix is given in explicit form for various higher excited states of the bending modes ν_4 and ν_5 . New extensive data available for the mol. of ¹²C₂H₂ are used to obtain a set of vibrational, vibration-rotation coupling, and centrifugal consts. in the 4th-order energy expression for the excited bending states. A set of 40 mol. consts. capable of reproducing a total of ~1200 vibrational-rotational energy levels with a std. deviation of 0.006 cm⁻¹ is tabulated.

original 2999

C.H. 1972. 44. 18



(м.п.)

1973
7 Д363. ИК-полосы комбинационных колебаний $C_2^{12}H_2$, включающих состояние 0000^01^1 . Baldacci, Agostino, Ghersetti Sergio, Rao K. Narahari. Infrared combination bands of $^{12}C_2H_2$ involving 0000^01^1 state. «J. Mol. Spectrosc.», 1973, 48, № 3, 600—603 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения газообразного ацетилена в области $4000-4100\text{ см}^{-1}$ с разрешением, позволившим определить частоты колебательно-вращательных линий Q-ветвей. Наблюдены полосы колебательных переходов $1000^01^1-0000^00$, $0100^03^1-0000^00$, $1001^11^1-0001^11^1$, $1001^11^1-0001^10^0$, $1000^02^2-0000^01^1$, $1000^02^0-0000^01^1$ молекулы $C_2^{12}H_2$ и $1000^01^1-0000^00$ $C_2^{13}D_2$. Приведены частоты наблюдаемых линий. Определены разности вращательных постоянных B , D , H в начальном и конечном состоянии. Отмечены случаи l -резонанса. Параметр резонанса g_{55} , вычисленный из полученных частот, отличается от величины, определенной ранее по ИК-спектрам излучения. Библ. 6. М. В. Тонков

CP 1974 N7

HCC H

1973

Birge Robert R.

" J. Amer. Chem. Soc."
1973, 95, (25), 824I-49.

racem

Ei

(*cas. HCN; in*)

3ax. 247

C_2H_2

Birner Peter, 1973
Köhler Hans-Joachim,
Weiss Cornelius.

расчет
направлен
в расчет
энергии

"Z. Chem." 1973, 13, N5, 184-5.

(связь HCN; III)

1973

 C_2H_2

оттиски 1841.

 $(\nu_5 - \nu_4)$

12 Б225. Разностная полоса $\nu_5 - \nu_4$ ацетилена, $C_2^{12}H_2$, Braund Doris B., Cole A. R. H., Grader F. E. The difference band $\nu_5 - \nu_4$ of acetylene, $^{12}C_2H_2$. «J. Mol. Spectrosc.», 1973, 48, № 3, 604—606 (англ.)

С помощью ЭВМ воспроизведена вращательная структура разностной полосы $\nu_5 - \nu_4$ (колебательный переход типа II—II) $C_2^{12}H_2$ (I), в области 60—200 cm^{-1} , исследованной ранее в дальней ИК-области с учетом удвоения I-типа. Определенные при этом вращательные постоянные для полос ν_4 и ν_5 I согласуются с соответствующими значениями вращательных постоянных I. А. П. Александров

X. 1974 n 12

1973

 C_2H_2

(м.п.)

7 Д365. Разностная полоса $\nu_5-\nu_4$ ацетилена $^{12}C_2H_2$.
 Braund Doris B., Cole A. R. H., Grader F. E.
 The difference band $\nu_5-\nu_4$ of acetylene, $^{12}C_2H_2$. «J. Mol.
 Spectrosc.», 1973, 48, № 3, 604—606 (англ.)

Получен ИК-спектр поглощения газообразного ацетилена в области $65-200\text{ см}^{-1}$ с разрешением $0,3\text{ см}^{-1}$ в слое до 7,4 м при давл. 1 атм, связанный с колебательно-вращательной полосой $\nu_5-\nu_4$ и двумя соответствующими ей горячими переходами. Отмечено l -удвоение линий, большее в P -ветви. Приведены частоты линий полосы $\nu_5-\nu_4$. Вычисленные по этой полосе молекулярные константы хорошо согласуются с более точными данными. Библ. 7.

М. В. Тонков

сп 1974 N 7

C_2H_2

1973
8 Д149. Расчет молекул C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , H_2O_2 , N_2H_4 в приближении двух центров с орбиталями Слэтера. Булычев В. П. «Вестн. Ленингр. ун-та», 1973, № 4, 34—37 (рез. англ.)

м.п.; с.п.

Уд.ч.к.р.

Исследуется применимость метода двухцентрового разложения с минимальным набором слэтеровских атомных орбиталей к расчету молекул вида H_nABH_m . Вычисленные энергии вертикальных электронных переходов, равновесные длины связей и некоторые силовые постоянные удовлетворительно согласуются с эксперим. данными и результатами более сложных расчетов.

Р. 1973

ЛР

