

C_2J_4

C_2Cl_4 , C_2Br_4 ($\tau_{c.c.}$, $\tau_{c.c.}$, $\tau_{c.c.}$)
 $\angle Cl-C-Cl$, $\angle Br-C-Br$

Strand T.G.,

Acta Chem. Scand, 1967, 21(8), 2111-18

Electron diffraction investigation
of gaseous tetrachloroethylene
and tetrabromoethylene
CA, 1968, 68, 18, 34022c

C₂I₄

BP - XIV - 620

1968

14307s Vibrational spectra and force constants of tetraiodoethylene. Forneris, Roberto; Bassi, Darwin (Univ. Sao Paulo, Sao Paulo, Brazil). *J. Mol. Spectrosc.* 1968, 26(2), 220-6 (Eng). The ir and Raman spectra of C₂I₄ are reported. The ir spectra of Nujol mulls, KBr pellets, and solns. were investigated at 5-125 μ . The Raman spectra of the solid and solns. were obtained with qual. depolarizations. The assignments, for V_h symmetry, are: a_{1g} , 1448, 181, 106; b_{1g} , 780, 146; b_{1u} , 225; b_{2g} , 418; b_{2u} , 638, 94, and b_{3u} , 525, 129 cm^{-1} . A set of force consts. was calcd. for the planar vibrations by using a modified Urey-Bradley force field. The results are in fairly good agreement with the ones obtained for the other 3 ethylene tetrahalides. RCKP

(L.K. & P. A. ...)
C. A. ...

(V. ...)
C. A. ...

C. A. 1968. 69.4

C₂I₄

ИК-, КР-
спектры,
v_i

X. 1969. 6

1968
6 Б194. Колебательные спектры и силовые постоян-
ные тетраiodэтилена. Forneris Roberto, Bassi
Darwin. Vibrational spectra and force constants of
tetraiodoethylene. «J. Molec. Spectrosc.», 1968, 26, № 2,
220—226 (англ.)

В области 5—125 μ измерены ИК-спектры поглощения
(суспензия в нуйоле, таблетки KBr, р-ры в ацетоне и
сероуглероде) тетраiodэтилена (I); измерены также
спектры КР I в тв. состоянии и в р-рах и определены
степени деполяризации линий в спектрах КР. Предложе-
но отнесение частот (в предположении симметрии V_h):
 a_{1g} , 1448, 181, 106; b_{1g} , 780, 146; b_{1u} , 225; b_{2g} , 418; b_{2u} , 638,
94; b_{3u} , 525, 129 cm^{-1} . Силовое поле (модель Юри—Брэд-
ли: $K_{\text{C-C}}$ 6,46, $K_{\text{C-I}}$ 1,57, $H_{\text{I-I}}$ 0,033, $H_{\text{C-I}}$ 0,035, $F_{\text{I-I}}$ 0,36,
 $F_{\text{C-I}}$ 0,51, C 0,23, H 0,34, h 0,12, (везде мдин/А) при
значениях структурных параметров... $\text{C}=\text{C}$ 1,34 А, $\text{C}-\text{I}$
2,15 А, угол $\text{I}-\text{C}-\text{I}$ $115^\circ 30'$), перенесенное с др. моле-
кул галогенидов тетраэтилена, хорошо описывает экс-
перим. спектр I. Б. Рассадни

C₂I₄

γ_i

XIV-1427

1969

91909n Vibrational spectra and assignments of tetraiodoethylene. Flourie, E. J.; Jones, William Denver (San Diego State Coll., San Diego, Calif.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1969, 25(3), 653-9 (Eng). The ir, far ir, and Raman spectra of C₂I₄ are given with assignments of all the active fundamental vibrations and observed combination and overtone bands. A tentative assignment of the torsion mode is made based on the assignment of observed combination bands. The fundamental frequencies are assigned as A_g: 1490, 184, 110; A_u: 53; B_{1g}: 775, 149; B_{1u}: 226; B_{2g}: 422; B_{2u}: 639, 95; B_{3u}: 525, 131, all in cm.⁻¹ An observed enhancement of B_{1g} intensities in the Raman spectrum is ascribed to vibronic interactions. RCSQ

C. A. 1969. 70. 20

1969

 C_2I_4

Chem. Abst.

74202e Potential energy constants of the tetraiodoethylene molecule. Tillu, A. D.; Sathianadan, K. (Poona Univ., Poona, India). *J. Univ. Poona, Sci. Technol.* 1969, No. 36, 133-6 (Eng). A normal coordinate anal. of the C_2I_4 mol. was carried out with the Wilson *F-G* matrix method by using a general quadratic potential function. A set of potential energy constns. is reported. The anal. supports the vibrational assignment given by R. Forneris and D. Bassin (1968). The C:C and C-I stretching constns. are 6.46 and 2.85 millidynes/A., resp. Values of all major constns. are compared with those reported by G. de Alti, *et al.* (1965), or C_2F_4 , C_2Cl_4 , and C_2Br_4 . Results are discussed in terms of observed frequencies and calcd. force constns. of the ethylene tetrahalides. Both stretching constns. decreased with increasing halide at. wt. The const. which represents the magnitude of electronic binding between the 2 C atoms is independent of mass of the halogen. When expressed in mass-weighted coordinates, the bending modes are enhanced at the expense of the stretching modes on increasing at. wt. of the halogen in these compds:

FBJN

C.A. 1969. 4. 16

$C_2 F_4$

Cybin S. J.

1970

Czech. J. Phys.,

20(4), 464.

средне-кв.
амплитуд,
поиск.

(см. $C_2 F_4$) III



C₂J₄

23 Б239. Новые данные о колебательном спектре и нормально-координатном анализе тетраиодэтилена. Forneris Roberto, Uehara M. New results on the vibrational spectrum and normal coordinate analysis of tetraiodoethylene. «J. Mol. Struct.», 1970, 5, № 6, 441—447 (англ.)

1970

Х/У-1436

сим. и.

Исследованы КР- и ИК-спектры C₂J₄ в крист. состоянии и в р-ре в CS₂. Проведен расчет нормальных колебаний молекулы (симметрия V_h) с использованием потенциального поля Юри—Бредли. Табулированы значения силовых постоянных и распределение потенциальной энергии колебаний. Проведено след. отнесение полос: тип a_{1g}, вал. кол. C=C 1467, вал. кол. C—J 183, ножничн. кол. CJ₂ 106; тип b_{1g}, вал. кол. CJ+маятн. кол. CJ₂ 780 и 148; тип b_{1u}, веерн. кол: CJ₂ 218; тип b_{2g}, веерн. кол. CJ₂ 423; тип b_{2u}, вал. кол. C—J 638, маятн. кол. CJ₂ 94; тип b_{3u}, вал. кол. C—J 525, ножничн. кол. CJ₂ 129 см⁻¹. Колебания типа g активны в КР-спектре, а типа u — в ИК-спектре.

Ю. В. К.

Х. 1970. 23

XIV-1436

1970

C₂I₄v_i

(30429w) New results on the vibrational spectrum and normal coordinate analysis of tetraiodoethylene. Forneris, Roberto; Uehara, Miyoshi (Dep. of Chem., Univ. of Pittsburgh, Pittsburgh, Pa.). *J. Mol. Struct.* 1970, 5(6), 441-7 (Eng). New results are presented on the Raman spectrum of C₂I₄ (solid and soln. in CS₂) obtained with He-Ne 6328 Å laser excitation. Several new bands have been obsd., including a formerly unreported fundamental (ν_3, b_{2g}). Previous ir spectra have been confirmed and extended with the observation of the far ir spectrum of a soln. of C₂I₄ in CS₂. A normal coordinate anal. has been carried out, including the detn. of the potential energy distribution among the vibrational fundamentals. This allowed a better comparison with corresponding results for the other 3 ethylene tetrahalides than has previously been possible. RCBF

C.A. 1970. 73. 6

C_2F_4

см. н.

923
XV - XIX

Ramaswamy K.
Devarajan V.

1971

J. Mol. Struct., 8(3), 325

($Cl_4.C_2Cl_4$; C_2F_4) III

C₂T₄

1976

Merecz P.

(сис. ност.) Nagy. Kem. Lapja,
1976, 31 n 12, 634-636
(венг.)



(сис. C₂H₄; III)

C₂H₄

[common 8009]

1949

Ramaswamy R., Ramanathan P.

J. Mol. Struct., 1949, 51, n 1,
127-132.

cur. nocm.

(cur. C₂H₄; III)

C₂J₄

1982

21 Б135. Фотоэлектронная спектроскопия с возбуждением He-I тетраидэтилена (C₂J₄). Jonkers G., van der Kerk S. M., Mooyman R., de Lange C. A., Snijders J. G. He(I) photoelectron spectroscopy of tetraiodoethylene (C₂J₄). «Chem. Phys.», 1982, 69, № 1—2, 115—119 (англ.)

С использованием источника возбуждения He-I измерен фотоэлектронный спектр (ФЭС) молекулы C₂J₄. Интерпретация ФЭС проведена на основе расчетов электронного строения и потенциалов ионизации (ПИ) C₂J₄ методом Хартри—Фока—Слэтера (ХФС) в базисе двухэкспонентных слейтеровских функций с учетом релятивистских поправок. Релятивистские эффекты, влияющие на ПИ, учитывались в рамках теории возмущений 1-го порядка по величине квадрата постоянной ТС. Нерелятивистским методом ХФС рассчитано также электронное строение фрагментов C₂ и J₄, что позволило в рамках анализа заселенностей МО по Малликену ис-

X. 1982, 19, N 21

C₂

J₄

(сплошные)

следовать зарядовое распределение с C_{2J_4} в терминах орбиталей фрагментов. Для каждого из валентных ПИ исследованы вклады в полную величину ПИ от след. релятивистских поправок: зависимости массы электрона от скорости, дервиновского и спин-орбит. взаимодействий и изменений в потенциале электрон-электронного взаимодействия, обусловленных релятивистскими эффектами. Теор. ПИ хорошо согласуются с эксперим. величинами. —

И. А. Тополь



C₂I₄

1982

11 Д645. HeI-фотоэлектронная спектроскопия тетраидэтилена (C₂I₄). He(I)-photoelectron spectroscopy of tetraiodoethylene (C₂I₄). Jonkers G., Van der Kerk S. M., Mooyman R., De Lange C. A., Snijders J. G. «Chem. Phys.», 1982, 69, № 1-2, 115—119 (англ.)

Получен HeI-фотоэлектронный спектр тетраидэтилена C₂I₄ (I). Вертикальные потенциалы ионизации I равны (в эВ): 8,65; 8,82; 9,58; 10,08; 10,21; 10,33; 10,58; 10,92; 11,72 12,62 14,00 15,80. Спектр интерпретирован с помощью расчетов релятив. методом ХФС—ЛКАО, сравнения с фотоэлектронными спектрами C₂H₃I и цис- и транс-C₂H₂I₂ и использования правила зумм. Установлено, что 2-й потенциал ионизации I связан с удалением электронов с МО, являющейся комбинацией $\pi(C=C)$ и $5p_z$ АО йода. Остальные потенциалы ионизации соответствуют МО, локализованным в основном на атомах йода.

Ю. В. Чижев

фотоэлектр.
спектр

ор. 1982, 18, N 11

C₂F₄

1987

Karunanidhi N.,
Nargai R. Thama-
rai.

Сел. посей.,
косей. центро-
бейсн. иска-
жеснннн,
Корнонне.
посей.

Indian J. Phys., B
1987, 61B(1), 65-7.

( сел. C₂F₄; III)

C₂I₄

[DM. 26741]

1987

Sato N., Inokuchi H.,

Chem. Phys., 1987, 113,
N3, 445 - 454.

фотоспектр.
спектр,
γ;

