

Ca Ca

IV-7698

1941

C₂Cl₂, CO₂, CCl₄, AsCl₃ (

)

Finbar C., Maccol. O.

Areh. Math. Naturvidenskab 45,
no 3, 8 pp. (1941)

"Molecular - structure ...

C.S., 1942, 6408

to

1

7926 - IV

1942

C_2Cl_2 vapor (mol.str.)

Hassel O., Taarland T.

Tids.Kjemt, Bergvesen Met. 1941, 1,
172-4,

Chem.Zentr. 1942, II, 878

"The structure of ..."

J

C_2Cl_2

Wh. Liep. p. 105

Moreau Claude,
Serre Joiane.

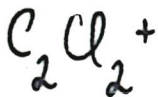
1964

Theoret. chim. acta, 1964, 2,
n1, 40-54.

Электронная структура
фтороацетилена и хлор-
ацетилена.

(ср. C_2F_2)

Х. 1965.8



A.P.

Cohen S.C.

1980

Inorg. Nucl. Chem. Lett.,
6(9), 757.

(см. Нд-орган. соед.) III

CC:CC

XIV-153

1970

(9)

116530p Application of photoelectron spectroscopy. 6. Photoelectron spectra of dihalo acetylenes. Heilbronner, Edgar; Hornung, V.; Kloster-Jensen, Else (Phys.-Chem. Inst., Univ. Basel, Basel, Switz.). *Helv. Chim. Acta* 1970, 53(2), 331-46 (Ger). The photoelectron spectra were recorded for XC:CY (where X and Y are Cl, Br, and I). The 1st 5 bands were assigned in order of increasing ionization potentials to the states $^2\Pi_u$, $^2\Pi_g$, $^2\Pi_u$, $^2\Sigma_g^+$, and $^2\Sigma_u^+$ (where g and u are only valid when X = Y). The 1st 3 states correspond to π -ionization and the last 2 to σ -ionization of the axially sym. lone pairs. The $^2\Pi$ states split under the influence of spin-orbit-coupling into components $^2\Pi_{3/2}$ and $^2\Pi_{1/2}$, where the former has the lower energy. The assignment is confirmed by the size of the split due to spin-orbit coupling, the vibrational fine structure of the bands, and from the zero-differential overlap model used in the calcs. CWJG

C.A. 1970. 72.22

XIV-153

1970

ac = cœ

 γ_i

18 B122. Фотоэлектронные спектры дигалоидацетиленов. Heilbronner E., Hornung V., Kloster-Jensen Else. Die Photoelektron-Spektren der Dihalogen-acetylene. «Helv. chim. acta», 1970, 53, № 2, 331-346 (нем.; рез. англ.)

Измерены фотоэлектронные спектры дихлор-, дибром-, динод-, хлорбром-, хлорнод- и бромнод-ацетиленов. В порядке увеличения ионизац. потенциалов первые пять полос отнесены к состояниям: $^2\Pi_{(u)}$ (1), $^2\Pi_{(g)}$ (2), $^2\Pi_{(u)}$ (3), $^2\Sigma_{(g)}^+$ (4) и $^2\Sigma_{(u)}^+$ (5), где индексы u и g относятся только к центросимм. молекулам. Первые три состояния соответствуют π -ионизации, а два последних — σ -ионизации аксиально симм. неподеленных пар. Под влиянием спин-орбитального взаимодействия $^2\Pi$ -состояния расщеп.

X. 1970. 18

+5



ляются на компоненты $^2P_{3/2}$ и $^2P_{1/2}$, первая из к-рых имеет меньшую энергию. Индивидуальное отнесение полос по состояниям и компонентам проведено по величинам расщепления, вызванного спин-орбитальным взаимодействием, колебательной тонкой структуре полос и на основании простой параметризованной МО модели, при помощи к-рой проведено качеств. обсуждение полученных результатов.

О. Г. Гаркуша

1 Д496. Колебательные спектры дихлоро-, дибромо-,
диiodo-, бромохлоро- и хлоройодоацетилена. КТa-
бос Р. Kloster-Jensen-Else, Christensen

D. H. Johnsen I. The vibrational spectra of dichloro-,
dibromo-, diiodo-, bromochloro- and chloroiodoacetylene.
«Spectrochim. acta», 1970, A 26, № 7, 1567—1580 (англ.)

Получены ИК-спектры в области $4000-50 \text{ см}^{-1}$ дихло-
ро-, дибромо-, диiodo-, бромохлоро- и хлоройодоацетиле-
на в парообразном состоянии и в растворе. При лазер-
ном возбуждении изучены спектры комб. рас. всех со-
единений. Измерены факторы деполяризации. Для каж-
дой из изученных молекул дано отнесение пяти основных
колебаний. Отнесение хорошо согласуется с данными, по-
лученными из расчета силовых постоянных. Для всех мо-
лекул наблюдаема последовательность «горячих» полос
со стороны низких частот основных вал. кол. группы
 $\text{C}\equiv\text{C}$. Библ. 34. Резюме

1970

C2O2

4002

атмос.

Мед. и.

09.19.71. 10

+4

17

1970

C_2Cl_2
 82202m) Vibrational spectra of dichloro-, dibromo, diiodo-, bromochloro-, and chloriodoacetylene. Klaeboe, Peter; Kloster-Jensen, Else; Christensen, D. H.; Johnsen, I. (Dep. Chem., Univ. Oslo, Oslo, Norway). *Spectrochim. Acta, Part A* 1970, 26(7), 1567-80 (Eng). The ir spectra of 3 dihaloacetylenes with equiv. halogens (dichloro-, dibromo- and diiodoacetylene) and 2 with different halogens (bromochloro- and chloriodoacetylene) were recorded at 4000-50 cm^{-1} . They were studied in the vapor phase and in soln., but the less volatile diiodoacetylene was recorded in soln. and as a solid. By using He-Ne laser excitation, Raman spectra of all the compds. were recorded and the depolarization ratio of the bands detd. For each of the mols. the 5 fundamental frequencies were assigned, and they agreed reasonably well with the frequencies derived from a preliminary force const. calcn. A progression of "hot bands" was obsd. at the low frequency side of the $C\equiv C$ stretching fundamental for all the mols.

RCSO

summed 4007

C.A. 1970. 73. 16

C_2Cl_2

1970

Kloster-Jensen Else
at all

Do

Helv. chim. Acta,

1970, 53, 18, 2109-2118

(Cis. C_2H_2) $\overline{II}$

оттиск 4003

1972

10 Д379. Колебательный спектр бромидоацетиленов. Силовые постоянные шести дигалоидоацетиленов. Christensen D. H., Stroyer-Hansen T., Klapoe P., Kloster-Jensen Else, Tucker E. P. The vibrational spectra of bromiodoacetylene Force constants of six dihaloacetylenes. «Spectrochim. acta», 1972, A 28, № 5, 939—951 (англ.)

Исследованы ИК-спектры ($4000-50 \text{ см}^{-1}$) газообразных $\text{BrC}\equiv\text{CJ}$ (I) и $\text{JC}\equiv\text{CJ}$ (II) и раствора I, а также спектры комб. рас. растворов I в CS_2 и CCl_4 . Проведено отнесение полос в I. Анализ интенсивностей основных колебаний I в спектрах комб. рас. и ИК-спектрах позволяет сделать вывод, что несимметричные дигалоидоацетилены имеют симметрию псевдо- $D_{\infty h}$. Проведен сравнительный анализ спектров несимметричных и симметричных дигалоидоацетиленов. Рассчитаны термодинамич. ф-ции — $(G^0 - H_0^0)/T$, S_0 , $(H^0 - H_0^0)/T$ и C_p^0 для Cl_2C_2 , Br_2C_2 , J_2C_2 , BrClC_2 , ClJC_2 , BrJC_2 и наборы силовых постоянных для этих молекул. Силовое поле молекул, содержащих Cl , заметно отличается от поля

других дигалоидоацетиленов. Приведены таблицы измеренных и рассчитанных величин. Библ. 19. Э. В. Б.

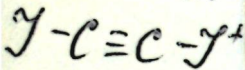
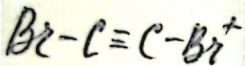
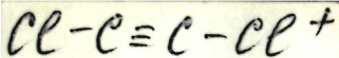
Cl_2C_2

(ν_i , м.н.)

(т.г.р)

Ф.1972.10





Эмиссионные
спектры



х, 1948, N 12

1944

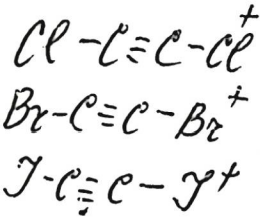
12 Б141. Эмиссионные спектры радикал-катионов $\text{Cl}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{Cl}^+$, $\text{Br}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{Br}^+$ и $\text{I}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{I}^+$: системы полос $\tilde{A}^2\Pi_g \rightarrow \tilde{X}^2\Pi_u$ и затухание состояний $\tilde{A}^2\Pi_g$. Allan Michael, Kloster-Jensent Else, Maier John P. Emission spectra of $\text{Cl}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{Cl}^+$, $\text{Br}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{Br}^+$ and $\text{I}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{I}^+$ radical cations: $\tilde{A}^2\Pi_g \rightarrow \tilde{X}^2\Pi_u$ band systems and the decay of the $\tilde{A}^2\Pi_g$ states. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1977, Part 2, 73, № 10, 1417—1424 (англ.)

Измерены возбужденные электронным ударом в газовой фазе эмиссионные спектры радикал-катионов $\text{X}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{X}^+$ ($\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}$ и I). На основании сравнения с фотоэлектронными спектрами системы полос в спектральной области 360—860 нм отнесены по $\tilde{A}^2\Pi_g \rightarrow \tilde{X}^2\Pi_u$ электронным переходам катионов дигалогеноацетиленов. Сопоставлены тонкие колебательные и спин-орбитальные структуры, проявляющиеся в эмиссионных и фото-

электронных спектрах. В кривых затухания $\tilde{A}^2\Pi_g$ -состояний обнаружена неэкспоненциальность, причем долгоживущая компонента на 2 порядка слабее по интенсивности по сравнению с короткой компонентой. Из разрешенных по времени эмиссионных спектров и вспомогательных экспериментов установлено, что обе компоненты затухания относятся к $A^2\Pi_g$ -состояниям катионов дигалогеноацетиленов. О. Г. Каркуша



1977



спектр
излучения

(+2) ☒

р. 1978, 15

5 Д361. Спектры излучения катион-радикалов: $\text{Cl}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{Cl}^+$, $\text{Br}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{Br}^+$ и $\text{I}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{I}^+$: система $\tilde{A}^2\Pi_g \rightarrow \tilde{X}^2\Pi_u$ и распад состояния $\tilde{A}^2\Pi_g$. Allan Michael, Kloster-Jensen Else, Maier John P. Emission spectra of $\text{Cl}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{Cl}^+$, $\text{Br}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{Br}^+$ and $\text{I}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{I}^+$ radical cations: $\tilde{A}^2\Pi_g \rightarrow \tilde{X}^2\Pi_u$ band systems and the decay of the $\tilde{A}^2\Pi_g$ states. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1977, Part 2, 73, № 10, 1417—1424 (англ.)

В области 360—860 нм исследованы спектры излучения катион-радикалов $\text{X}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{X}^+$ ($\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$), возбуждаемых в зоне пересечения молекулярного пучка соответствующего дигалондацетилен (ДГА) (при давл. $(1\div 5) \cdot 10^{-4}$ мм рт. ст.) пучком электронов с энергией ≈ 30 эв. С использованием данных о спин-орбитальном расщеплении ДГА и о тонкой колебательной структуре фотоэлектронных спектров соответствующих ДГА наблюдаемое излучение приписано переходам $\tilde{A}^2\Pi_g \rightarrow \tilde{X}^2\Pi_u$. Другой разрешенный переход $\tilde{B}^2\Pi_{u,g} \rightarrow \tilde{A}^2\Pi_{g,u}$, попадающий в случае $\text{I}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{I}^+$ в исследованную спектральную область, не был обнаружен. Квантовый

выход этого перехода, а также запрещенного перехода $B^2\Pi_{u, u} \rightarrow X^2\Pi_{u, u}$ оценен как $\leq 10^{-5}$. Исследование кинетики распада состояния $\tilde{A}^2\Pi_g$ показало наличие двух компонент — быстрой ($\tau \simeq 13 \div 50$ нсек) и медленной ($\tau \simeq 850 \div 4000$ нсек). Интенсивность медленной компоненты на $\simeq 2$ порядка меньше интенсивности быстрой. Времена затухания обеих компонент не зависят ни от давления газа, ни от энергии возбуждающих электронов. Сделан вывод, что, как и в случае катион-радикалов моногалондацетиленов, неэкспоненц. распад состояния $\tilde{A}^2\Pi_g$ обусловлен сильным взаимодействием этого состояния с безызлучательными уровнями основного состояния катиона ($X^2\Pi_u$). Библ. 10. С. Л.

Calla

1977

86: 146101f Efficiency of intramolecular vibrational energy redistribution in model systems: chloroacetylene. Hase, William L.; Sloane, Christine S. (Dep. Chem., Wayne State Univ., Detroit, Mich.). *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* 1977, 81(2), 207-9 (Eng). A classical trajectory study was made of chloroacetylene disson. at 134 kcal/mol. Three different initial state selected energy distributions were studied. The calcn. method and results are described.

80

C.A. 1977, 86 N20

C_2Cl_2

number 5792

1974

Shimonouchi T.

madusa

11

J. Phys. Chem. and Ref. Data,
1977, 6, 993-II02.

CCl_4
 C_2Cl_2

Lomnick 11378 | 1981.

Liška M., et al.

M.M.

J. Mol. Struct., 1981,
72, 177-81

$\text{Cl}(\text{C} \equiv \text{C})\text{Cl}^+$

1981

Maier J. P., et al.

Faraday Discuss. Chem.
Soc, 1981, N 74, 181-189.

$\text{Vi};$

$(\text{cur. Cl}(\text{C} \equiv \text{C})_2\text{H}^+; \text{III})$

Хлорацетилен
 C_2Cl_2

1982

2 Б284. Мазерные измерения в молекулярном пучке сверхтонкой структуры в хлорацетилене-d. Beam maser measurements of hyperfine structure in chloroacetylene-d. Tack Leslie M., Kukolich Stephen G. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 94, № 1, 95—99 (англ.)

На мазерном спектрометре с молек. пучком проведены измерения интенсивностей квадрупольных взаимодействий $eqQ(D) = 208,5 \pm 1,5$ и $eqQ(^{35}Cl) = 79739,5 \pm 1$ кГц и спин-вращательного взаимодействия $C(Cl) = 1,3 \pm 0,1$ кГц (вращательная константа $B = 5186973,9$ кГц) в хлорацетилене-d. Вследствие высокой разрешающей способности установки точность измерения молек. параметров удалось повысить не менее, чем в 20 раз. Описана эксперим. техника и изложены основы теории сверхтонкого взаимодействия двух неэквивалентных ядер.

В. Н. Ключников

дл-дл.

X: 1983, 19, №2

C_2Cl_2

1983

Caballero J. F.,
Wittig C.

гидрохлорид-
бензол

J. Chem. Phys., 1983,
78, N 12, 7169-7174.

(см. C_2Cl_2 ; III)

Cl_2^+

Om. 17128

1983

A27-X27

99: 61258f Emission spectra of rotationally cooled dihaloacetylene cations in the gas phase: $A^2\Pi_{u,g} \rightarrow X^2\Pi_{u,g}$ band systems. Klapstein, Dieter; Maier, John P.; Zambach, Werner (Phys.-Chem. Inst., Univ. Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *Chem. Phys.* 1983, 77(3), 463-75 (Eng). The $A^2\Pi_{u,g} \rightarrow X^2\Pi_{u,g}$, $\Omega = 3/2, 1/2$ emission spectra of rotationally cooled dichloro-, dibromo- and diiodoacetylene cations in the gas phase were obtained. This was achieved by electron-impact ionization of the mol. species seeded in a He supersonic free jet. The effect of the rotational cooling is that the vibronic bands are sharp and the isotope bands are clearly discernible, allowing the spectra to be vibrationally analyzed. The vibrational frequencies of most of the fundamentals could be detd. to within $\pm 1 \text{ cm}^{-1}$ for both the $\Omega = 3/2$ and $1/2$ components of the ground and 1st excited electronic states.

(2)

Br_2C_2^+ , I_2C_2^+

C.A. 1983, 99, N8

CaCl_2^+

от. 19055

1984

10 Л242. Электронные спектры поглощения катионов дигалоацетилен в матрицах неона. Electronic absorption spectra of dihaloacetylene cations in neon matrices. Leutwyler Samuel, Maier John P., Spittel Uta. «Mol. Phys.», 1984, 51, № 2, 437—444 (англ.)

Получены спектры оптич. поглощения ($\tilde{A}^2\Pi_{3/2,g} \leftarrow \leftarrow X^2\Pi_{3/2,u}$) катионов дихлор-, дибром- и диiodацетилен в матрицах неона при 4,5 К. Выполнен анализ колебательной структуры спектров и определены частоты ряда фундаментальных колебаний катионов для электронных состояний $\tilde{A}^2\Pi_{3/2,g}$. Е. Н. Викторова

м.п., №;

(+2) 

фр. 1984, 18, N 10



$\text{CaBr}_2, \text{CaI}_2$

C₂ Cl₂⁺

отм. 19055

1984

21 Б1210. Спектры электронного поглощения катионов дигалоацетиленов в неоновых матрицах. Electronic absorption spectra of dihaloacetylene cations in neon matrices. Leutwyler S. L., Maier J. P., Spittel U. «Mol. Phys.», 1984, 51, № 2, 437—444 (англ.)

Измерены оптич. спектры поглощения в области переходов $\tilde{A}^2\Pi_{3/2g} \leftarrow \tilde{X}^2\Pi_{3/2n}$ катионов дихлор-(I)-, дибром-(II)- и диiod-(III)-ацетилена, полученных фотоионизацией в Ne-матрицах при 4,5 К соотв. молекул. Найдено, что спектры нейтральных I—III в матрицах до облучения не содержат полос поглощения выше 280 нм. Поглощение в области 355—380 нм отнесено к катионам I—III, причем при отжиге матриц наблюдается упрощение спектров. Приведено отнесение колебательных компонент наблюдаемых прогрессий. Сделан вывод, что обнаруженное усиление двухквантовых переходов ν_5 (деф. кол. Π_u) обусловлено резонансом Ферми, а не высокими факторами Франка—Кондона. Колебательный анализ спектров выявляет три или четыре фундаментальных колебания катионов I—III в электронных состояниях $\tilde{A}^2\Pi_{3/2g}$. Т. Б. Ченская

спектр, ν_5

х. 1984, 19
N 21

(+2)

CaBr_2 , CaI_2



$C_2Cl_2^+$

[om. 30490] 1988

Jacox M.E.,

Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 389.

CaCl^+

(DM. 32216) 1989

Forney R., Jakobi M.,
et al.,

$(\tilde{A}^2\Pi_{3/2} - X^2\Pi_{3/2})$ J. Chem. Phys., 1989,
& Ne матрице 90, n1, 600-601.

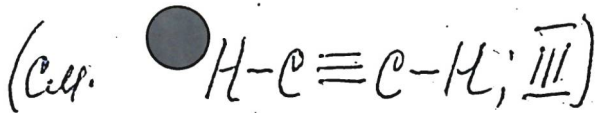




1989

Martin P.S., Yates R.,
et al.

Can. J. Chem. 1989: 67,
n. n. N12. C. 2178-2187.



C_2Cl_2

1990

Anderson A.,
Lefebvre J.H.

Cent. Spectrosc. Lett. 1990.
noct. 23, N 10. C. 1285-1302.

(Cui. ● C_2H_2 ; III)

CCCC

1991

114: 111138t A pyrolysis jet spectroscopic study of the rotationally resolved electronic spectrum of dichlorocarbene. Clouthier, Dennis j.; Karolczak, Jerzy (Dep. Chem., Univ. Kentucky, Lexington, KY 40506 USA). *J. Chem. Phys.* 1991, 94(1), 1-10 (Eng). The rotationally resolved, gas phase vibronic spectrum of dichlorocarbene was recorded using the technique of pyrolysis jet spectroscopy. The rovibronic anal. has established the band origin of the $A^1B_1-X^1A_1$ electronic transition to be at $17,255.67 \text{ cm}^{-1}$. The vibrational frequencies in the ground and excited states are very close to published values from matrix isolation data. The excited state structure has a 131.4° ClCCl angle and a $1.652 \text{ \AA}$ CCl bond length.

$A^1B_1-X^1A_1$

cc.n.

C.A. 1991, 114, N 12

C₂Cl₂

1997

/ 128: 17051b Equilibrium structure and spectroscopic constants of dichloroethyne: an ab initio study. Breidung, Jurgen; Thiel, Walter (Org.-Chem. Inst., Univ. Zurich, CH-8057 Zurich, Switz.). *J.*

Mol. Spectrosc. 1997, 185(1), 115-122 (Eng), Academic. High-level ab initio calcns. with large basis sets are reported for ClC:CCl. Based on CCSD(T)/cc-pVQZ results, an empirically cor. theor. equil. geometry is derived: $r_e(\text{CC}) = 1.2025(6) \text{ \AA}$ and $R_e(\text{CCl}) = 1.635(5) \text{ \AA}$. Correlated harmonic (CCSD(T)/cc-pVQZ) and anharmonic (MP2/TZ2Pf) force fields provide theor. predictions for the fundamental vibrational wavenos. and many other spectroscopic consts. for the 4 most important isotopomers of dichloroethyne.

U.A.

C.A. 1998, 128, N 2

CCCCC

1999

Jayakumar N. Kolan-
daivel P., et al.,

cmp - pa,
cb - ba,
meopem.
pacem

THEOCHEM 1999, 485,
(2-3), 197-202

(all. NCCCH; III)