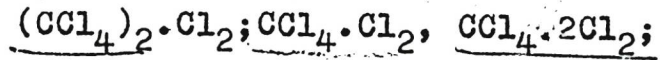
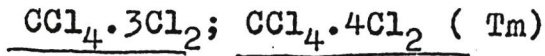


C-cl

1175



1938



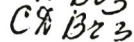
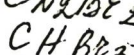
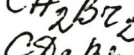
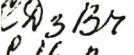
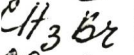
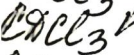
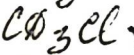
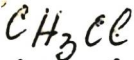
Wheat J.A., II, Browne A.W.

J.Am.Chem.Soc. 1938, 60, 371-2

"The chlorinates. Temperature..."

C.A., 1938, 2820⁶

C C C



Книга Shimanouchi T 1961.
Семь у Yuzuka

Shimanouchi T, Suzuki J.

J. Mol. Spectrosc., 1961,
6 (3), 277-300

Force constants of
Chloro- and Bromoethanes.

(+8) 18

1964

№ 21 Б83. Отнесение молекулярных колебаний гексахлорбензола. Саэки Синносукэ. «Токё когё сикэн-сё хококу, Tokyo kogyo shikensho hokoku, Repts Govt Chem. Industr. Res. Inst. Tokyo», 1964, 59, № 11, 475—479 (японск., рез. англ.)

Исследованы ИК-спектры поглощения газообразного гексахлорбензола в области $4000-300 \text{ см}^{-1}$ и твердого гексахлорбензола в области $300-100 \text{ см}^{-1}$. Измерены следующие частоты: 1396; 1350; 1307; 1053; 1012; 874,4; 696,2; 687,6 см^{-1} . Получены также спектры комб. расс. гексахлорбензола, растворенного в бензоле, CCl_4 и сероуглероде. На основании сопоставления этих спектров между собой и с колебательными спектрами бензола предложено следующее отнесение основных частот к типам симметрии: A_1 1225,372; E_{1g} 213; E_{1u} 1350,696; E_{2g} 1522,340, 322 см^{-1} . М. Ковнер

х. 1965. 21

C - Cl

(A)

| BD - M1428 - IV | 1966

Goines A.F.,
Kay J., ...

Trans. Faraday Soc.,
1966, 62 (4), 874-80

Cl_4C_3

Bop-M 1997-IV

1966

Ito M.

(Vi) Spectrochim acta

1966, 22 no, 1581-1589

C₃Cl₈

Bp - M 1997-IV

1966

Ito M.,

(Vi)

Spectrochim acta, 1966, 22, 1581-1589

C - A

Вильвизкий А. И. 1987

ис. орган. анализ, 3, №12,
2081.

связь

(2)

Мерили разрыва связей
ушерод-гачолен и ушер-
род-водород в молекулах
гачолено-ушерводных на-

рафинированных углеводоро-
дов

(см. С-Н)

Ccl₆

1972.

157439n Electron-diffraction study of the structure of hexachlorocyclopropane in the gas phase. Barzdain, P. P.; Gracheva, N. I.; Alekseev, N. V. (Inst. Elementoorg. Soedin., Moscow, USSR). *Zh. Strukt. Khim.* 1972, 13(4), 717-18 (Russ). The following mol. parameters for hexachlorocyclopropane were found: internuclear distances C-C 1.513 ± 0.009 Å, C-Cl 1.734 ± 0.007 Å, and Cl....Cl 2.858 ± 0.013 Å; the mean-square amplitudes C-C 0.056 ± 0.011 Å, C-Cl 0.076 ± 0.009 Å, and Cl...Cl 0.090 ± 0.012 Å; bond angle Cl-C-Cl $112^\circ \pm 2^\circ$. These values agree well with theoretical considerations on the character of the C-C and C-Cl bonds in this mol. and also with the exptl. results obtained by other investigators. L. Berak

C.A. 1972. 77, N24.

CH_2Cl ; CHCl_2 ; CH_2F , CCl_3 (I, A.P., ΔH)
C-Cl; C-F (Do) XIV 3927 1972

Lossing F. P.,
Bull. Soc. chim. belg., 1972,
81, N1-2, 125-34

10 4

1973
[$\text{Cl}_2\text{C}:\text{CCl}$. Lyubarskii M. V.
Rogovtseva T. A.
- CCl_3] Khim. Vysokomol. Soedin. Neftkhim.
1973, 14-15 (Russ)
Thermochemistry of hexachlorobuta-
(ΔH_f) diene and hexachloropropylene.

C.A. 1974. 80. N 23. 132582c.

30417.4732

Ch, TE

C-Cl

Введ.

40771 пост

1973

Williams Robert C., Taylor James W. Chlorine kinetic isotope effect models. I. isotopic dependence in nominal C-Cl stretching vibrations of aliphatic chlorides and vibrational analysis of the tert-butyl chloride ground state. "J. Amer. Chem. Soc.", 1973, 95, N6, 1710-1714 (англ.)

843 845 847 0854 ПИК ВИНТИ

1974

2957

 C_3Cl_8

12 Б72. Конформационный анализ. VII. Молекулярная структура колебания газообразного октахлорпропана (C_3Cl_8) по данным электронографии в сопоставлении с полуэмпирическими (методом молекулярной механики) расчетами. Fernholt Liv, Stølevik Reidar. Conformational analysis. VII. The molecular structure and torsional oscillations of gaseous octachloropropane (C_3Cl_8) as determined by electron diffraction and compared with semi-empirical (molecular mechanics) calculations. «Acta chem. scand.», 1974, A 28, № 9, 963—973 (англ.)

молек.
Структ.
Колебаний
(χ_e)

Методом газовой электронографии при t -ре $160^\circ C$ изучена молекула октахлорпропана C_3Cl_8 . Найдены след. значения межъядерных расстояний (r_g , Å) и углов ($\angle_\alpha$): C—C 1,657 (30), C—Cl (b— CCl_3) 1,764 (12), C—Cl (b > CCl_2) 1,812 (40), $\angle CCC$ $119,0^\circ$ (4,0), $\angle CCCl$ (b— CCl_3) $110,4^\circ$ (1,0) и $\angle CCCl$ (b > CCl_2) $104,5^\circ$ (1,0).

X. 1975. N 12

Группы $-\text{CCl}_3$ находятся в шахматном положении (симметрия C_{2v}) относительно группы $>\text{CCl}_2$. Значения структурных параметров, полученные полуэмпирич. расчетом методом молек. механики, удовлетворительно согласуются с эксперим. величинами. Показано, что из электронографич. данных можно оценить диагональные силовые постоянные крут. кол., если приближенно известно остальное силовое поле. Сообщ. VI см. РЖХим, 1974, 23Б103.
В. Спиридонов

$C\equiv C \equiv C - C \equiv C\equiv C$

[49-9688]

1975

22 Б185. Колебательные спектры и силовые поля дихлор-, дибром- и диододиацетиленов. Klaboe P., Kloster-Jensen Else, Bjarrov E., Christensen D. H., Nielsen O. F. The vibrational spectra and force fields of dichloro-, dibromo- and diiododiaetylene. «Spectrochim. acta», 1975, A31, № 7, 931—943 (англ.)

Измерены ИК-спектры и спектры КР $C\equiv C \equiv C - C \equiv C\equiv C$ (I), $BrC \equiv C - C \equiv CBr$ (II) в области 50—4000 cm^{-1} и $IC \equiv C - C \equiv CI$ (III) в области 200—4000 cm^{-1} . Для I измерены ИК-спектр газа и спектр КР жидкости, II и III изучены в р-рах CCl_4 , CS_2 , C_6H_6 и CH_2Cl_2 . Зарегистрированы также низкот-рные ИК- и КР-спектры кристаллов I и II. В предположении точечной группы симметрии молекул I—III $D_{\infty h}$ предложено отнесение их основных колебаний. При отнесении использованы результаты расчета нормальных колебаний, в к-ром в кач-ве исходного приближения были использованы силовые поля моногалодидиацетиленов. Из значений основных частот I—III рассчитаны термодинамич. функции H° , G° , S° , C_p° . Б. В. Локшин

колеб.
спектры,
сил. полей.
м.г.ор.

1

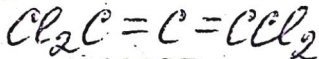
45

м.г.ор.
3.5

Х. 1975
N 22

60617.1883

TC, Ch, Ph



41197

(и.к. - классиф.)

1976

4537

Snider A. Monroe Jr., Krause Paul
F., Miller Foil A. Vibrational spectra
and assignments for tetrachloro- and tet-
raiodoallene.^{и.к.}

"J. Phys. Chem.", 1976, 80, N 11, 1262-
1265 (англ.)

0643 пик

621 625 635

ВИНИТИ

C_3Cl_4
 C_3J_4

Отпуск 12057 . 1981

12 Д489. Анализ нормальных координат и средние амплитуды колебаний в соединениях C_3X_4 ($X=Cl, J$). Normal coordinate analysis and mean amplitudes for C_3X_4 ($X=Cl, J$) compounds. Diaz G. «Spectrosc. Lett.», 1981, 14, № 5, 347—355 (англ.)

Проведен анализ норм. координат основных колебаний в молекулах C_3Cl_4 и C_3J_4 . Значения колебательных частот, вычисленные с помощью упрощенного силового поля, использованы для интерпретации опубликованных эксперим. спектров. На основании известных колебательных частот проведено уточнение силовых постоянных, позволившее достичь полного совпадения расчетных и наблюдаемых частот. Вычислены равновесные межатомные расстояния в молекулах C_3Cl_4 и C_3J_4 , а также средние амплитуды колебаний при $t_{ре}$ 0 и 298 К.

М.П.,
межатом.
расст.,
средние
амплитуды
колебаний

(+1)

Ф. 1981, 18, N 12.

C₃Cl₄

cm mull 12057

1981

Calc. norm.
Di

95: 88301u Normal coordinate analysis and mean amplitudes for C₃X₄ (X = Cl, I) compounds. Diaz, G. (Dep. Quim., Univ. Chile, Valparaiso, Chile). *Spectrosc. Lett.* 1981, 14(5), 347-55 (Eng). Normal coordinate anal. of C₃Cl₄ and C₃I₄ was carried out on the basis of general valence force field, using Wilson's FG matrix method. Approx. vibrational frequencies were calcd. from the very simple force field, and then used as an aid in tentative assignments of obsd. frequencies from the literature. The force fields were refined by adjustments to the exptl. bands assigned as fundamentals. Calcd. mean amplitudes for both mols. are reported.

(+1)

C.A. 1981, 95, N10

C₄Cl₄

[Ommuck 12252] 1981.

Fleming G. D., et al.

Kb. cell.
paeres

cell. noet.

Z. Naturforsch., 1981,
A36, 759-762.

C₃Cl₄

Number 12252

1981.

Fleming G. D., et al.

Kb. max.
pact,
con. not.

Z. Naturforsch., 1981,
A36, 759-62.

C_3Cl_4
 C_4Cl_4

1981

Fleming G.D., et al.

мономер,
циркули,
ссыл. поет.

Z. Naturforsch., 1981,
A 36, N 7, 759 - 762.

● / сс. C_2H_4 ; III)

C₆Cl₆

1981

фотоэлектр
спектры

р. 1982,
18, w1.

1 Д706. Фотоэлектронные спектры и неэмпирические расчеты хлорбензолов. 1. Хлорбензол и дихлорбензолы. Photoelectron spectra of and Ab initio calculations on chlorobenzenes. 1. Chlorobenzene and dichlorobenzenes. Rušćić Branko, Klasinc Leo, Wolf Andreas, Кнор Jan V. «J. Phys. Chem.», 1981, 85, № 11, 1486—1489 (англ.)

Получены HeI- и HeII-фотоэлектронные спектры хлорбензола (I), 1,4-, 1,3- и 1,2-дихлорбензолов (II—IV). Первые 4 вертикальные потенциалы ионизации (ПИ) I—IV равны (в эВ): I—9,07, 9,64, 11,31, 11,67; II—8,97, 9,84, 11,37, 11,50; III—9,14, 9,70, 11,47, 11,58; IV—9,08, 9,64, 11,26, 11,70. Приведена интерпретация фотоэлектронных спектров I—IV вплоть до ПИ 24 эВ. Спектры идентифицированы при помощи неэмпирич. расчетов (в базисе ГФ) энергий МО I—IV, анализа относит. интенсивностей HeI- и HeII-спектрах, анализа колебательной структуры полос. Первые 2 ПИ I—IV относятся к МО, локализованным на бензольном кольце, 3 и 4 ПИ I и 3—6 ПИ II—IV соответствуют удалению электронов неподеленных пар атомов хлора. Библи. 28. Ю. В. Чижев

C₄Cl₄

(Ommuck 15680)

1982

Diaz G.,

запомн.
случ.
но не

и
среднее
анализ.
коэффици.

Z. Naturforsch., 1982,
37a, 1292-1294.



CCl_5

(om. 17791) 1983

Dines T. J., French M. J.,
et al.

ИК-спектры
и спектры
КР

J. Raman Spectrosc.,
1983, 14, N 4, 225-231.

(сер. CCl_4 ; III)

$\mathcal{U}_p \mathcal{C}_n^q$

1985

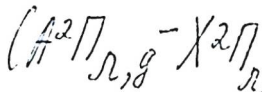
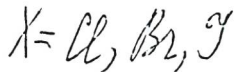
$q = \pm 1; p = 1 \div 4$ Leleyter Mireille,
 $n \leq 10$. Joyes Pierre.

стабильность
кластеров.

Surf. Sci. 1985,
156(2), 800-13.

(ср. $\mathcal{F}_p \mathcal{C}_n^q; \underline{\text{III}}$)

1986



105: 142566z Spectroscopic characterization of molecular radical cations: the $A^2\Pi_{n,g} \leftrightarrow X^2\Pi_{n,u}$ transition of $X-C \equiv C-X^+$, $X = Cl, Br, I$. Klapstein, D.; Maier, J. P. (Dep. Chem., St. Francis Xavier Univ., Antigonish, NS Can. B2G 1C0). *NBS Spec. Publ. (U. S.)* 1986, 716, 423-40 (Eng). Three techniques, gas-phase emission and laser excitation spectroscopies and absorption spectroscopy in a matrix; can be used to study the transitions between the ground and lower excited states of mol. radical cations. The 3 techniques are complementary. While the emission spectra provide information concerning the vibrational energy levels of the cationic ground state, the laser excitation and matrix absorption spectra provide the corresponding information for the lowest excited states. Typical spectra from these 3 techniques and the information which can be deduced from them are illustrated for the $A^2\Pi_{n,g} \leftrightarrow X^2\Pi_{n,u}$ transition of $XC \equiv C-X^+$ ($X = Cl, Br, I$).

C.A. 1986, 105, N16

CCl_4

1986

106: 41390c The formation of CCl_4^- in gamma radiolysis of methyleyclohexane(MCH)- CCl_4 at 4.2 K. Suwalski, Jan P.; Kroh, Jerzy (Inst. Radiat. Chem., Tech. Univ. Lodz, 93-590 Lodz, Pol.). Bull. Pol. Acad. Sci., Chem. 1986, 34(5-6), 267-74 (Eng). Radiolysis of methyleyclohexane- CCl_4 solns. at 4.2 K produced CCl_4^- (absorption max. ~ 354 nm) and CCl_4^+ (weak absorption band 420-435 nm) ions. Warming the irradiated samples to 77 K resulted in the decay of CCl_4^- . The spectrum of the heated sample indicated the presence of CCl_3 radicals (370 nm) and CCl_4Cl complex (450-470 nm).

чекмр
но не использовал

C. A. 1987, 106, N 6

CCl₅⁻

[OM. 22965]

1986

Vetter R., Zülicke L.,

Chem. Phys., 1986, 101,
N 2, 201-209.

струк-
тур.,
эмпирич.,
теорет.
расчет.

$C_4Cl_2^+$ [om. 30490] 1988

Jacox M.E.,

Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 496.

CCl_n^-
($n=1-4$)

от 36436

1991

13 Б1021. Структура анионов CCl_n^- ($n=1-4$) и сродство к электрону соответствующих нейтральных частиц. The structure of the CCl_n^- ($n=1-4$) anions and electronic affinities of the corresponding neutrals / Gutsev G. L., Ziegler Tom // Can. J. Chem.— 1991.— 69, № 6.— С. 993—999.— Англ.

При помощи метода функционала электронной плотности с использованием приближения X_α изучена электронная структура и геометрия основного состояния однократно-заряженных анионов CCl_n^- ($n=1-4$) и Cl_m^- ($m=2,3$), а также соотв-щих нейтр. молекул. Во всех случаях осуществлена полная оптимизация геометрии. Вычислены значения вертикального и адиабатич. сродства к электрону для нейтр. частиц, а также первый ПТ ионизации для анионов. Обсуждены различные каналы диссоциации CCl_4^- . Сделан вывод, что анион CCl_4^- является нежестким,

структура,
Ае

(11) ☒

Х. 1992, N13

Cl_m^- ($m=2,3$)
(структура)

причем глобальный минимум соответствует вытянутому тетраэдру с симметрией C_{4v} . Отмечено, что для рассмотренных соединений использованный метод очень хорошо воспроизводит эксперим. геометрию и дает удовлетворительную оценку электронного сродства (на уровне лучших неэмпирич. расчетов).

В. М. Промыслов

ССН

от 36436

1991

5 Д72. Структура анионов CCl_n^- ($n=1-4$) и электронное сродство соответствующих нейтральных молекул. The structure of the CCl_n^- ($n=1-4$) anions and electronic affinities of the corresponding neutrals / Gutsev G. L., Ziegler T. // Can J. Chem.— 1991.— 69, № 6.— С. 993—999.— Англ.; рез. фр.

В рамках приближенной теории функционала плотности рассчитаны геометрические и электронные структуры основных состояний однозарядных анионов CCl_n^- ($n=1-4$) и Cl_m^- ($m=2, 3$), а также соответствующих нейтральных молекул. Проведена полная оптимизация геометрий всех анионных и нейтральных систем. Рассчитаны величины вертикального и адиабатич. электронного сродства для нейтральных молекул и определены первые потенциалы ионизации анионов. Обсуждены различные каналы диссоциации CCl_4^- . Показано, что CCl_4^- является нежестким и имеет глобальные минимумы, соответствующие структуре вытянутого тетраэдра симметрии C_{3v} .

М.Н.

ф. 1992, № 5

CCl_n^-

1991

12 Д179. Структура анионов CCl_n^- и Cl_n^- ($n=1-4$) согласно результатам расчетов в приближении функционала локальной плотности. Structures of CCl_n^- and Cl_n^- anions ($n=1-4$) according to results of local density functional calculations / Gutsev G. L. // J. Phys. Chem.— 1991.— 95, № 15.— С. 5773—5783.— Англ.

В приближении функционала локальной плотности рассчитаны электронные и геометрич. структуры однозарядных анионов CCl_n^- и Cl_n^- ($n=1-4$), а также соответствующих нейтральных молекул. Для нейтральных молекул рассчитаны величины адиабатического и вертикального сродства к электрону. Для анионов получены значения 1-х потенциалов ионизации. Согласно результатам расчетов анион CCl_4^- может рассматриваться как нежесткий, благодаря наличию нескольких близко расположенных по энергии локальных стационарных точек на его поверхности потенц. энергии.

($n=1-4$)

М.П.

⊕ (4)

ф. 1991, N 12

CCl_n^-

($n=1-4$)

соответствующих различным расположением ядер. Найдено, что CCl_2^- , CCl_3^- и Cl_3^- также имеют несколько возбужденных электронных состояний, стабильных относительно отрыва электрона. Показано, что анион Cl_4^- стабилен относительно диссоциационного канала с низшей энергией.

CCl_n^-

1991

24 Б1088. Структура анионов CCl_n^- и Cl_n^- ($n=1-4$) по результатам расчетов методом функционала локальной плотности. Structures of CCl_n^- and Cl_n^- anions ($n=1-4$) according to results of local density functional calculations / Gutsev G. L. // J. Phys. Chem. — 1991. — 95, № 15. — С. 5773—5783. — Англ.

М.Н.

Методом функционала локальной плотности рассчитан ряд электронных состояний анионов CCl_n^- и Cl_n^- ($n=1-4$) и соотв-щих нейтр. молекул. Оптимизированы геометрич. параметры ряда структур, отвечающих стационарным точкам потенциальных ПВ. Определены значения вертикального и адиабатич. сродства к электрону нейтр. молекул и ПТ ионизации анионов.

(4) [X]

Х. 1991, № 24 Cl_n^-



Результаты согласуются с данными неэмпирич. расчетов и с эксперим. данными. Показано, что анион CCl_4^- является нежестким, его потенциальная ПВ имеет большое число близко расположенных по энергии минимумов. Анионы CCl_2^- , CCl_3^- и Cl_3^- имеют ряд возбужденных состояний, устойчивых к отрыву электрона; Cl_4^- устойчив по отношению к низшему по энергии каналу диссоциации.

А. А. Сафонов

Cl5.

1992

Leitser G.L.,

Chem. Phys. 1992, 166,

u.n.

N 1-2, C. 57-68.

P.d.X. N 22-24, ¹⁹⁹³ 22 5 1038

CU_6^n

1992

$n=0, -1$ и -2 изучен П.А.,

дл. физ. химии, 1992,
м.п. 66, № 8, с. 2112-2117

[Coll.



$(C\bar{n}; \underline{III})$

CC5

1993

Butsen f.h.,

смычка, Ж. Fiz. Khim. 1993,
67(1), 58-64.
Ае

(coll. CC5;

● III)

F: C(35)Cl4

P: 3

6Б1295. Колебательно-вращательная спектроскопия C{35}Cl[4]. Rovibrational spectroscopy of C{35}Cl[4] / Xu Songlin, McDowell R. S., Sharpe S. W., Krohn B. J. // J. Mol. Spectrosc. - 1995. - 173, N 2. - С. 431-441. - Англ.

ИК-спектр поглощения высокого разрешения C{35}Cl[4] измерен в статич. условиях (фурье-спектрометр, разрешение 0,005 см⁻¹, полосы 'ню'[4] и 'ню'[1]+'ню'[4], многоходовая оптич. ячейка) и в сверхзвуковом пучке (перестраиваемый диодный лазерный спектрометр, диапазон 790-810 см⁻¹, полоса 'ню'[3]). Анализ ферми-диады 'ню'[3]/'ню'[1]+'ню'[4] дал значения кориолисовых постоянных 'дзета'[3]=0,621 и 'дзета'[4]=-0,145, к-рые удовлетворяют гармонич. правилу сумм, но из-за возмущения, вызванного резонансом Ферми, не согласуются с внутримолекулярным силовым полем, определенным ранее из анализа изотопных сдвигов CCl[4], изолированного в матрице. Истинное значение 'дзета'[4]=-0,414 получено из анализа невозмущенной полосы 'ню'[4]. Библ. 37.

1995

РМХ 1997

C28 Hy

Sun K.-C.; Chen C.,

1996

Huaxue 1996, 54 (3),

1-9

enrykm.

Do,

Δ, H, Vi,

mer.

pariet

(coll. C28 Hy; III)

Knoppek C

1998

Billespie, R. J.; et al;

(re, 4) Adv. Mol. Struct. Res.
1998, 4, 1-41.

(coll. фтотрест Be; III)

1999

F: ClC_{2n+1}N

P: 3

132:63913 Ab initio calculations of structures and vibrational frequencies of linear interstellar molecules XC_{2n+1}N (X = CN, H, F, Cl, Li and n = 0-5).

Liu, Yuming; Ren, Yi; Tian, Anmin

Department of Chemistry, Sichuan University

Chengdu 610064, Peop. Rep. China Sichuan

Daxue Xuebao, Ziran Kexueban, 36(4), 722-725

(Chinese) 1999 The geometric structures of linear

C.A. 2000, 132

interstellar mols. XC_{2n+1}N ($\text{X} = \text{CN}, \text{H}, \text{F}, \text{Cl}, \text{Li}$ and $n = 0-5$) were optimized by quantum chem. at HF/6-31G level. The total energies and bond lengths of the mols., and charge distribution and vibrational frequency of each atom were calcd. The results showed that the total energies of XC_{2n+1}N obeyed homologous linear law, and both the bond lengths of the mols. and the charge distribution of each atom presented certain regularity. The frequency results showed that the XC_{2n+1}N mol. was stable for $\text{X} = \text{CN}, \text{H}, \text{F},$ and Cl , while not stable for $\text{X} = \text{Li}$.

C3C

(Om. 40194)

1999

Pilar Redondo, José R. Redon-
do et al.,

neopem-
narem

Chem. Phys. Lett., 1999,
315, 224-232

1999

F: C3Cl

P: 3

132:185680
its cation.Theoretical study of the C3Cl radical and
Redondo, Redondo, J. R.; Barrientos, C.;Largo, A. Facultad de Ciencias, Departame.
Quimica Fisica, Universidad de Valladolid

Valladolid 47005, Spain

Chem. Phys.

Lett., 315(3,4), 224-232 (English) 1999 A theor.
study of C3Cl and C3Cl+ isomers has been carried
out. The globa min. for C3Cl is a cyclic C2v
species (a three-membered ring with an exoc
chlorine atom). However, a quasi-linear CCCC1
structure is predicted to only 3-5 kcal mol⁻¹
higher. This quasi-linear structure is floppy,

C. F. 2000, 132

since linear arrangement lies only 2-3 kcal mol⁻¹ higher in energy. The cyclic open-chain isomers have dipole moments of 1.986 and 3.363 D, resp. In C₃ global min. is a linear singlet species, the singlet cyclic isomer lying 19 kcal mol⁻¹ higher. The ionization potentials of cyclic and open-chain are estd. to be 9.17 and 8.21 eV, resp., suggesting that these species sh easily ionized if present in the interstellar medium.

1999

F: C3Cl

P: 3

132:185680 Theoretical study of the C3Cl radical
and its cation. Redondo, P.; Redondo, J. R.;
Barrientos, C.; Largo, A. Facultad de Ciencias,
Departamento de Quimica Fisica, Universidad de
Valladolid Valladolid 4700 Spain Chem. Phys.
Lett., 315(3,4), 224-232 (English) 1999 A theor.
study of C3Cl and C3Cl+ isomers has been carried out.
The global min. for C3Cl is a cyclic C2v species (a
three-membered ring with exocyclic chlorine atom).

C.A. 2000, 132

However, a quasi-linear CCCC1 structure is predicted to lie only 3-5 kcal mol⁻¹ higher. This quasi-linear structure floppy, since the linear arrangement lies only 2-3 kcal mol⁻¹ higher in energy. The cyclic and open-chain isomers have dipole moments of 1.986 a 3.363 D, resp. In C3Cl⁺ the global min. is a linear singlet species, the singlet cyclic isomer lying about 19 kcal mol⁻¹ higher. The ionization potentials of cyclic and open-chain C3Cl are estd. to be 9.17 and 8.21 eV resp., suggesting that these species should be easily ionized if present the interstellar medium.

F: C-Cl

P: 3

2000

132:122171 Computationally Efficient Methodology to
Calculate C-H and C-X^(X = F, Cl, and Br) Bond Dissociation
Energies in Haloalkanes. McGivern, W. Se Derecskei-
Kovacs, Agnes; North, Simon W.; Francisco, Joseph S.

Chemistry Department, Texas A&M University

College Station, TX 77842, USA

J. Phys.

Chem. A, 104(2), 436-442 (English) 2000

A

computationally efficient method for calcg. C-H and C-X
(X = F, Cl, an Br) bond dissocn. energies in haloalkanes
was developed by detg. correcti factors to MP2/cc-pVtz
energies. Corrections for basis set effects were by the
difference in bond dissocn. energies calcd. at the
MP2/cc-pVtz and MP2/cc-pV5z levels, and correlation

C.A. 2000, 132

effects were cor. by calcg. the diffe in energies at the MP2/cc-pVtz and CCSD(T)/cc-pVtz levels. Subsequent corrections for the spin-orbit energy of the at. fragment and zero-point were applied to give a final bond dissocn. energy. The correction factor detd. using CH₄, MeF, MeCl, and MeBr and yield bond dissocn. energies in excellent agreement with exptl. results. This correction may also be bro applied to multihalogen compds., as shown in calcns. of the C-H and C-X b dissocn. energies of CH₂X₂ and CHX₃ (X = F, Cl, and Br) compds., which accurately reproduce exptl. values.

F: C35Cl2

P: 3

134:287152 The rotational spectrum of dichlorocarbene, C35Cl2, observed by molecular beam-Fourier transform microwave spectroscopy. Hansen, N.; Mader, H.; Temps, F. Institut für Physikalische Chemie, Christian-Albrechts-Universität Kiel, Kiel, Germany. Phys. Chem. Chem. Phys. (2001), 3(1), 50-55. in English.

The rotational spectrum of the most abundant isotopomer of dichlorocarbene, C35Cl2, in its $\tilde{X}A1$ ground electronic state was recorded using a mol. beam-Fourier transform microwave spectrometer. The CCl2 was generated by flash pyrolysis in a pulsed free jet expansion using CBr2Cl2 or CHCl2COCl as precursors. Forty three hyperfine structure lines of 6 rotational transitions were recorded in the frequency range 8-40 GHz. The anal. of the obsd. spectrum yielded the rotational consts., the complete 35Cl nuclear quadrupole coupling tensor, and the nuclear spin-rotation interaction consts. In addn., a refined r_0 structure of CCl2 was derived.

2001

2001

$C_n Cl$
 $C_n Cl^+$
 $C_n Cl^-$
 $n = 1 \div 7$

компьютерная,
 Ди, меоп. науки

135: 231938j Theoretical study of $C_n Cl$, $C_n Cl^+$, $C_n Cl^-$ ($n = 1-7$) clusters. Largo, Antonio; Cimas, Alvaro; Redondo, Pilar; Barrientos, Carmen (Departamento de Quimica Fisica, Facultad de Ciencias, Universidad de Valladolid, Valladolid, Spain 47005). *Int. J. Quantum Chem.* 2001, 84(1), 127-135 (Eng), John Wiley & Sons, Inc. The electronic structures, dipole moments, and vibrational frequencies of these clusters were calcd. at the B3LYP/6-311G(d) level. The geometry of all these species (with the only exception of neutral $C_3 Cl$) is predicted to be either a linear or quasi-linear with Cl located at the end of the carbon chain. $C_n Cl$ clusters all have doublet ground states, whereas the anionic clusters, with the only exception of CCl^- , all have singlet ground states. For $C_n Cl^+$ species, n -even clusters have triplet ground states whereas n -odd ones have singlet ground states. An even-odd parity effect (n -even clusters more stable than n -odd ones) was found for both the neutral and anionic species, whereas in the case of the cations the alternation in stability is reversed. The ionization potential (IP) and electron affinity (EA) also exhibit regular variations with the size of the cluster, with n -even clusters having both higher IP and EA than n -odd ones.



C.A. 2001, 135, N76.