

CSeq



1620

1957

CSe₂, CS₂, COS

Treiber E., Gierer J., Rehnström J.,
Almin K.E.

Acta chem.scand., 1957, 11, N 4,
752-753 ()

Uv - und IR - absorption von ...

CSe

PX., 1958, N 6, 16799

1958

CSe_2

- Wentink T., 1952.

J. Chem. Phys., 20, 188

Косебегеуиуи енегг
 CSe_2

1521

1959

CS_2 , CSe_2 , SCSe , SCTe , CO_2 , OCS ,

OCS_2 ($\sqrt{\quad}$ СИМОВНЕ ПОСТ.)

Wentink T.

J. Chem. Phys., 1958, 29, N 1,
188-200; 1959, 30, N 1, 105-115
(англ.)

Трехатомные линейные молекулы.

...

РХ., 1959, N 24, 84882

CSe_2

10

1959

CSe₂ T

Спектр.

Wentink T., Jr., Bauer S. H.,
J. Chem. Phys., 1959, 31, 834.

X

Трехатомные линейные моле-
кулы, содержащие углерод и
кислород, серу, селен или тел-
лур. III - Абс. интенсивность по-
токов σ_3 молекулы CSe₂



CSe_2

исх. газу

Callear A.B., Tyerman W.J.R.
Nature, 1964, 202, 54939, 1326

1964

Некоторые наблюдения в спектре газовой фазы CSe_2

Обсуждение спектров газовой фазы CSe_2
по сравнению с CS_2 ; коэффициенты
поглощения CSe_2 и CSe и Se .

CSe₂
Смесь с азотом,
и ф. CSe

8 Д636. Импульсный фотоллиз селеноуглерода. Cal-
lear A. B., Tyerman W. J. R. Flash photolysis of
carbon diselenid. «Trans. Faraday Soc.», 1965, 61, № 11,
2395—2403 (англ.) 1965

Исследованы спектры поглощения продуктов импульс-
ного фотолиза смесей CSe₂ с азотом, аргонном, кислоро-
дом, пропаном, этиленом и пропиленом. Давление смеси
варьировалось от 25 до 200 мм рт. ст., парциальное дав-
ление CSe₂ менялось от 0,04 до 0,005 мм рт. ст. Импульс
излучения мощностью 2000 J в области 2300 Å приводит
к распаду CSe₂ до CSe X¹Σ (v ≤ 3) и Se(4³P₂, 1, 0) и к
появлению электронно-возбужденных молекул селено-
углерода в состояниях ³Σ_u⁺(³B₂) и ³Δ_u(³A₂), образу-
ющих нестойкие комплексы с этиленом и пропиленом.
Измерены скорости опустошения возбужденных уровней
CSe₂, получены новые системы полос CSe, наблюдалась
колебательная релаксация SSe, вызываемая столкнове-
ниями с атомарным селеном. Обсуждены преддиссоциа-
ция CSe₂ и возмущения в спектре. Библи. 21 назв.

В. Ревин

ф. 1966. 87

Вар - 2968 - 14

CSe₂

L. Wellen H. Z.

1967

Inorg. Chem., 6, N2, 29.

ссыл. пост.

Соотношения между се-
ловыми постоянными
и другими характе-
ристическими велич в
дихалькогенах углеро-
да.

(ссыл. CO₂) III

CSe₂

XIV-1307 1969

Davies P. R.,
Orville - Thomas W. J.

ук. Ж. Мolec. Struct., 3, n 4-5,
436 - 439.

Молекулярное пара-
леллы и симметрия
связи. Ч. 9. Связи час-
ном на- изкоси в

линейных перекаты-
ных молекул.

(соед. CS_2) III

C Se₂

gummi
chaze;

cut. novu.

1969
Davies P. R.,
Dreille - Thomas W. J.

4. Mobe. Street, 4 (2-4),
163.

(Cue. CO₂) III

CSe₂

1969

11 Д323. Колебательный спектр CSe₂. King G. W., Srikameswaran K. The vibrational spectrum of carbon diselenide. «J. Molec. Spectrosc.», 1969, 29, № 3, 491—494 (англ.)

Изучены ИК-спектры (до 90 см⁻¹) и спектры комб. рас. CSe₂, причем использованы молекулы CSe₂⁷⁸, CSe₂⁸⁰ и природная смесь изотопов. Образцы приготовлены реакцией паров хлористого метилена с горячим селеном. Спектры комб. рас. возбуждались He—Ne-лазером. Наблюдены три основные частоты и ряд обертонов и составных частот. Показано, что молекула CSe₂ в основном электронном состоянии линейна. Определены ее силовые постоянные. По расстоянию между P- и R-ветвями произведена оценка вращательной постоянной $B_{v=1}(C-Se) = (2,05 \text{ Å})$.

М. В. Тонков

ш. н.
ш. ш.
ст. р.

ф. 1969. 11Д

CSe_2
 (gas)
 King G.W., Srikantharavan L. 1969
 J. Mol. Spectrosc., 1969, 29, n3, 491-94.

Исслед. ИК-сп. (90°) и сп. КР в одн.
 300-1700 cm^{-1} изотоп. равнов. $\text{CSe}_2^{78}(\text{I})$
 $\text{CSe}_2^{80}(\text{II})$, а также образцы природ. сурьм.
 изотопов Se (III). Заметных изотоп. сдвигов
 между γ_i I-III не обнаружено. На основании
 принятой сим. Doch дано отнесение кон. заг.

$\gamma_1(5g^+)$ (КР, генер.)	=	$364 \pm 3 \text{ cm}^{-1}$	$369 = ^{78}\text{Se}$
$\gamma_2(\text{III})$ (ИК)	=	$313 \pm 1 \text{ cm}^{-1}$	$(\text{в тес. изотоп.}) = 80\text{Se}$
$\gamma_3(6g^+)$ (ИК)	=	$1303 \pm 1 \text{ cm}^{-1}$	

а также вычислены сил. кон-ты ($\text{дин.см}^{-1} \cdot 10^{-5}$):

$K_{\text{C-Se}} = 5,91$, $K_2/r^2 = 0,161$ и кон-т. вращения $-0,33$,

и пост. ангармоничности $\chi_{22} = 1 \pm 0,5 \text{ см}^{-1}$.

Из расстояния $6,5 \pm 0,5 \text{ см}^{-1}$ между P-R-ветвями

в полосе $\nu_3 (\delta_u^+)$ вычислено $B_r = 0,025 \pm 0,008 \text{ см}^{-1}$.

откуда определено $r(\text{C-Se}) = 2,05 \text{ \AA}$.

Молекула микеллы.

$1/4$ 80-изотопа;
будет близки к

В естес-т. изомеси б. стабил.
изотопов Se; 78 изотоп составляет
● в естес-т. изомеси микеллы
(^{80}Se).

CSe₂ (газ)

м.п.;
геометр.
сп-р-ра;

оп. 1970. 49

Всп. - XIV - 1692

1969

4 Д367. Анализ системы полос 4500 Å (*R*-системы) селенистого углерода. King G. W., Srikameswaran K. Analysis of the 4500Å absorption system (*R* system) of carbon diselenide. «J. Molec. Spectrosc.», 1969, 31, № 2, 269—291 (англ.)

Исследован спектр поглощения газообразного CSe₂ (2000—4800 Å, разрешение от 150 000 до 600 000) в области т-р от +200 до -42° С. Максимальный оптич. путь составлял 20 м. Спектр состоит из четырех систем полос. Для различных изотопов селена детально проанализирована *R*-система (4800—3950 Å), соответствующая переходу $B_2 - \tilde{X}^1\Sigma_g^+$. В основном состоянии молекула линейна; по структуре *R*-системы установлено,

что молекула CSe_2 в электронно-возбужденном состоянии изогнута. (Угол $\text{Se}-\text{C}-\text{Se}$ равен $125^\circ \pm 20^\circ$). Получены колебательные постоянные; $\nu_2 (\pi_u) = 314,4 \text{ см}^{-1}$, $\chi_{22} = 1,1 \text{ см}^{-1}$ ($\tilde{X}^1 \Sigma_g^+$) и $\nu_2 (a_1) = 180-215 \text{ см}^{-1}$ $\nu_1 (a_1) = 460 \text{ см}^{-1}$ (B_2). Переход $0-0$ не наблюдался, его расчетная частота $21\,900 \pm 400 \text{ см}^{-1}$. В магн. полях $\sim 25\,000 \text{ гс}$ не наблюдалось уширения вращательных линий. Библ. 17.

Р. Душин

БФ - XIV - 1692

1969

CSe₂

55129v Analysis of the 4500 Å absorption system (R system) of carbon diselenide. King, Gerald Wilfrid; Srikameswaran, K. (McMaster Univ., Hamilton, Ont.). *J. Mol. Spectrosc.* 1969, 31(2), 269-91 (Eng). The electronic absorption spectrum of CSe₂ shows 4 discrete systems; 4800-3950 Å. (R system); 4050-3450 Å. (V system); 2600-2100 Å.; and 2100- <2000 Å. In this order, the relative intensities of the 1st 3 systems increase rapidly. The weak ($f \sim 10^{-4}$) R system has been analyzed in detail, by using CSe₂ synthesized from different pure isotopes of Se. The system results from a parallel transition from the $X^1\Sigma_g^+$ linear ground state to a bent upper state of the mol. In the R system, extensive progressions in the bending mode ν_2 are strongly active in both states. In the ground state $\nu_2''(\pi_u) = 313.4$, $x_{22} = 1.1$ cm.⁻¹ for the (80, 80) isotopic species; $\nu_2'' = 313.5$, $x_{22} = 1.2$ cm.⁻¹ for the (78, 78)

C. A. 1969. 71. 12

species. In the excited state, widespread perturbations occur, and only approx. values can be derived for the consts. The bond angle is $125 \pm 20^\circ$; $\nu_1'(a_1)$ is about 460 cm.^{-1} , and $\nu_2'(a_1)$ is in the range $180\text{--}215 \text{ cm.}^{-1}$. The unobserved origin band is calcd. to be at $21,900 \pm 400 \text{ cm.}^{-1}$. The electronic transition is $B_2 \leftarrow \bar{X}^1\Sigma_g^+$, as in the corresponding R system of CS_2 , which has a very similar spectral structure. Although no Zeeman broadening of rotational lines could be detected in bands of the CSe_2 system, this does not exclude the possibility that the B_2 upper state is a component of an 3A_2 state, as is believed to be the case for CS_2 .

RCKP

CSe₂

20 Б223. Колебательный спектр диселенида углерода. King G. W., Srikaneswaran K. The vibrational spectrum of carbon diselenide. «J. Molec. Spectrosc.», 1969, 29, № 3, 491—494 (англ.)

1969

Исследованы ИК-спектры ~~и~~ и спектры КР в области 300—1700 см⁻¹ изотопич. разновидностей молекулы CSe₂⁷⁸ (I), CSe₂⁸⁰ (II), а также образец с природным содержанием изотопов Se (III). Заметных изотопич. сдвигов между кол. частотами I—III не обнаружено. На

основании принятой симметрии D_{∞h} дано отнесение кол. частот: ν₁(σ_g⁺) (КР, деполяриз.) 364±3; ν₂(π_u) (ИК) 313±1 и ν₃(σ_u⁺) (ИК) 1303±1 см⁻¹, а также вычислены силовые коэф. (дин·см⁻¹×10⁻⁵): K (C—Se)=5,91, K_α/r²=0,161 и коэф. взаимодействия — 0,33 и постоянная ангармоничности для ν₂: x₂₂=1±0,5 см⁻¹. Из расстояния 6,5±0,5 см⁻¹ между P—R-ветвями в полосе ν₃(σ_u⁺) вычислена величина вращательной постоянной B_v=0,025+ +0,008 см⁻¹, откуда определено r (C—Se)=2,05 Å.

А. Александров

спектр

X. 1969. 20

110166m Vibrational spectrum of carbon diselenide. King, Gerald W.; Srikanth, K. (McMaster Univ., Hamilton, Ont.). *J. Mol. Spectrosc.* 1969, 29(3), 491-4 (Eng). The band frequencies and assignments of the ir and Raman spectra of CSe_2 are presented. All 3 fundamental frequencies have been obtained directly. All spectra were taken at room temp. In the ir spectrum, only 2 strong bands are observed. The one at 1303 cm^{-1} possesses 2 intensity max. sep'd. by 6.5 cm^{-1} , and is assigned to the $\nu_2(\sigma_u^+)$ fundamental. The other strong band at 313 cm^{-1} appears as a single peak, and is assigned to the fundamental $\nu_2(\pi_u)$. Weak vapor phase bands are observed at 1666, 1260, 940, and 667 cm^{-1} . No measurable isotopic frequency shifts were observed. In the Raman spectrum, only 1 intense CSe_2 band is observed, at a peak frequency of 364 cm^{-1} for the natural (N, N) mol. and the pure isotopic (80, 80) species and 369 cm^{-1} for the pure isotopic (78, 78) species. This band is assigned to the $\nu_1(\sigma_g^+)$ fundamental. Weak Raman bands were found at 1606, 795, 667, 647, 636, and 631 cm^{-1} . All the assignments can be made on the assumption that CSe_2 is linear in the ground electronic state. The ground state consts. of CSe_2 are given.

DWIN

CSe_2
 ν_1
C.A. 1969. 70. 24

CSe₂

Ramaswamy K., 1969
Srinivasan K.

и. н.
(расчет)

У. Моле. Структ.,
1969, 4, ~ 2-4, 138.



(Ces. CO₂) III

CSe₂.

Bp - 3978 - IX

1972

Simons, G.

referred
c. n.

J. Chem. Phys., 1972, 56,
NG, 4310-4313.

• Coll H₂O; III

40211.7622

Ph, TE, Ch

CSe₂ 40892

1973

1753

Frost D.C., Lee S.T., McDowell C.A.

Photoelectron spectra of OCS_e, CSe, and
CSe₂. "J. Chem. Phys.", 1973, 59, N10, 5484-
5493

(см. OCS_e; III) (англ.) 0042 мик

026 029 0035

ВИНИТИ

40124.4510

TE, Ch, Ph

C. Se 240892

1973

1727

Ray N.K., Parr Robert G. Simple bond-
-charge model for bending force constants
of linear symmetric triatomic molecules.
"J. Chem. Phys.", 1973, 59, N 8, 3934-
-3936

(англ.)

0029 МКК

015 016

0 22

ВИНИТИ

CSe₂

ХЗ-5009

1974

19 Б164. Фотоэлектронный спектр молекулы CSe₂.
Cradock S., Duncan W. The photoelectron spectrum
of CSe₂. «Mol. Phys.», 1974, 27, № 4, 837—841 (англ.)

Исследован фотоэлектронный спектр молекулы CSe₂,
полученной при пропускании хлористого метилена над
расплавленным селеном при т-ре 600° в атмосфере азо-
та. В спектре CSe₂ наблюдаются 6 полос. Первая по-
лоса имеет дублетную структуру со спин-орбитальным
расщеплением 2100 см⁻¹ (соотв-щее расщепление для ио-
нов CO₂⁺ и CS₂⁺ 180 и 436 см⁻¹), что соответствует
термам ²Π_{g1/2} и ²Π_{g3/2} иона CSe₂⁺. Как и в молекуле CS₂
последний занятый уровень 1π_g в молекуле CSe₂ являет-
ся несвязывающим. Вторая полоса с хорошо разрешен-
ной колебательной структурой имеет значение аднаба-

фотоэл.
спектр

ХЗ-5009

Х. 1974 N 19

тич. ПИ 11,45—12,0 эв и возникает в результате ионизации с уровня $1\pi_u$. Полосы с ПИ 13,61 эв и 15,87 эв со значит. интенсивностями относятся к двум из четырех возможных σ -уровней. Две оставшиеся полюсы с ПИ 12,75 эв и 15,3 эв относятся к термам симметрии $^2\Pi_u$, возникающим из конфигурации $1\pi_g^2 2\pi_u^1$. Остальные полюсы той серии лежат в пределах 18—21 эв. Обсуждаются различные варианты основного и возбужденных состояний иона CSe_2^+ . Отмечается большое сходство в фотоэлектронных спектрах молекул CSe_2 , CO_2 и CS_2 . Обнаружено соответствие между фотоэлектронными и электронными спектрами в близкой ультрафиолетовой и видимой областях. Электронные спектры молекул CS_2 и CSe_2 близки друг другу, однако соответствующие переходы в CSe_2 сдвинуты на $\sim 6000 \text{ см}^{-1}$ в красную сторону.

С. Долин

CSe_2

№ 4-5009;
XIV-5634

1974

фотоэлектронный
спектр

(9 Д374.) Фотоэлектронный спектр CSe_2 . Gaudin S., Duncan W. The photoelectron spectrum of CSe_2 . «Mol. Phys.», 1974, 27, № 4, 837—841 (англ.)

В фотоэлектронном спектре HeI молекулы CSe_2 зарегистрированы 6 полос, 4 из которых аналогичны наблюдаемым в спектрах CO_2 и CS_2 полосам ионизации с орбиталей $1\pi_g$, $1\pi_u$, $2\sigma_u$, $2\sigma_g$. Слабые запрещенные полосы с потенциалами ионизации 12,75 и 15,3 эВ, соответствующие одновременной ионизации и возбуждению иона, обусловлены процессом «встряхивания» характерным для фотоэлектронных спектров, полученных при помощи рентгеновского и резонансного излу-

47/1974. N 9

(+1) М.С. 

чения HeII . Обсуждаются структура полос, электронная конфигурация и геометрия молекулы в состояниях, проявляющихся в спектре. Библ. 8. В. А.

40422.8159

Ph, TE, Ch

CSe₂

35247

19.74

02.11.4600

Suzuki_Kenji, Egelstaff P.A. Molecular correlation functions in liquid carbon disulfide and carbon diselenide. "Can. J. Phys.", 1974, 52, N 3, 241-245

(англ., рез. франц.)

0093

076 078

005

ВИНИТИ

CSe₂

*4-8406

1975

(y)

147377c Vacuum ultraviolet spectrum of carbon diselenide. Craddock, Stephen; Donovan, R. J.; Duncan, W.; Gillespie, H. M. (Dep. Chem., Univ. Edinburgh, Edinburgh, Scot.). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1975, 71(1), 156-61 (Eng). Rydberg series leading to the first ionization potential were obsd. in the vacuum-uv spectrum of CSe₂ at 130-210 nm. The abrupt variation in intensity in the continuum at 203 nm was interpreted as a resonance due to configuration mixing of a Rydberg state and an appropriate disocn. continuum. The vibrational structure at long wavelength was assigned and the effects of spin-orbit coupling and configuration mixing on the obsd. spectrum were discussed.

C.A. 1975. 82. N22

44-15753

1976

CSe₂

V 4 Д364. Ридберговские состояния молекулы CSe₂.
Greening F. R., King G. W. Rydberg states of
carbon diselenide. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 61, № 3,
459—466 (англ.)

Спектр поглощения молекулы CSe₂ получен в области
длины волн больше 1300 Å и проанализирован с ис-
пользованием результатов расчета ридберговских тер-
мов молекулы методом модельного потенциала. Показа-
но, что низшие состояния симметрии ¹Π_u и ³Π_u явля-
ются ридберговскими, что, по-видимому, относится и к
состоянию ¹Π_g. Никаких признаков наличия в исследо-
ванной области энергий валентных состояний той же
симметрии не обнаружено. Наимизшее состояние сим-
метрии ¹Σ_u⁺ носит смешанный валентно-ридберговский
характер. Большинство полос спектра отнесено к рид-
берговским сериям (npσ_u), (npπ_u) и (nfλ_u). Для двух
низших потенциалов ионизации молекулы получены зна-
чения: 76 785 и 74 645 см⁻¹. Библ. 24. В. С. Иванов

У. Эйман

Ф. 1977 N 4

CS₂

#15753

1976

ры
7 Б143. Ридберговские состояния диселенида углерода. Greening F. R., King G. W. Rydberg states of carbon diselenide. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 61, № 3, 459—466 (англ.)

Измерен электронный спектр поглощения диселенида углерода в УФ-области и методом модельных потенциалов рассчитаны энергии возбужденных состояний. Наблюдавшиеся в спектре полосы отнесены к переходам в различные возбужденные валентные и ридберговские состояния. Слабая система в наиболее длинноволновой части спектра отнесена к переходу $B_2 - X^1\Sigma_g^+$. Предполагается, что B_2 состояние является компонентой 3A_2 состояния (как и в случае CO_2 и CS_2). Система в области 3885 Å связывается с переходами в 1B_2 и 1A_2 компоненты валентного $^1\Delta_u$ состояния с изогнутой

(м.п., т)

х. 1977 № 4

конфигурацией молекулы. Выделены четыре развитые
 и интенсивные ридберговские серии — $pr\sigma_u(\sigma_n =$
 $\lambda = 76\,785 - R/(n-2,42)^2 \text{ см}^{-1}, n=6-10; \sigma_n = 74\,645 - R/$
 $/(n-2,40)^2 \text{ см}^{-1}, n=6-10)$ и $n/\lambda_n(\sigma_n = 76\,785 - R/(n-$
 $0,12)^2 \text{ см}^{-1}, n=4-10; \sigma_n = 74\,645 - R/(n-0,10)^2 \text{ см}^{-1},$
 $n=4-9)$. Наблюдались также др. ридберговские пе-
 реходы: $5s\sigma_g(2000 \text{ Å}), 5p\pi_u(^1\Sigma_u^+ - 2340 \text{ Å } ^3\Sigma_u^- -$
 $1791 \text{ Å}), 6p\pi_u(^1\Sigma_u^+ - 1471,5 \text{ Å}, ^3\Sigma_u^- - 1519 \text{ Å})$. Систе-
 ма в области 2340 Å обнаруживает колебательную
 структуру ($\sim 200 \text{ см}^{-1}$), обусловленную, вероятно, либо
 $\nu_1(\sigma_g^+)$, либо $\nu_2(\pi_u)$. Значения двух самых низких
 потенциалов ионизации равны: $76\,785$ и $74\,645 \text{ см}^{-1}$.
 В. М. Ковба

CSe₂

85-15753

1976

85:70277z Rydberg states of carbon diselenide. Greening, F. R.; King, G. W. (Dep. Chem., McMaster Univ., Hamilton, Ont.). *J. Mol. Spectrosc.* 1976, 61(3), 459-66 (Eng). The electronic absorption spectrum of CSe₂ was measured down to 1300 Å, and analyzed with the aid of model potential calcns. of the Rydberg terms. The lowest excited ¹Π_u and ³Π_u states are Rydberg states; there is no exptl. evidence for addnl. valence states of this symmetry. The lowest excited ¹Σ_u⁺ state has mixed valence-Rydberg character. The main features of the spectrum can be analyzed as (nρσ_u), (nρπ_u), and (n/λ_u) Rydberg series. The lowest ionization potentials of the mol. are at 76,785 and 74,645 cm⁻¹.

J. Pugb.
Cocmaru.

C.A. 1976. 85 v10

45-18219

1977

CSe₂

17 Б120. Фотоионизационная масс-спектрометрия CSe₂. Radler K., Berkowitz J. Photoionization mass spectrometric study of CSe₂. «J. Chem. Phys.», 1977, 66, № 5, 2176—2182 (англ.)

фото-
ионизация

Измерены фотоионизационные спектры CSe₂ (с образованием CSe₂⁺ и Se⁺) в области длин волн $\lambda=600-1140$ Å с разрешением 0,15 Å. На основании анализа обнаруженных в спектрах CSe₂⁺ четырех ридберговских серий сходящихся к трем различ. пределам найдены след. значения энергий состояний CSe₂⁺: $X^2\Pi_{g,1/2}-9,524$ эв; $B^2\Sigma_u^+-13,633$ эв и $C^2\Sigma_g^+-15,899$ эв. Для энергии спин-орбитального расщепления в X состоянии получена величина $0,266 \pm 0,002$. Симметрия ридберговских состояний определялась по величинам квантовых дефектов. По величине порога образования Se⁺ определена теплота образования CSe₂ (г, 298°) $\Delta H = +62,0$ ккал/моль и энергия разрыва связи C—SeD₀ = 135 ± 2 ккал/моль. Полученное для величины порога появления CSe⁺ значение показывает, что потенциал ионизации CSe больше 10,94 эв. Обсуждены возможные механизмы фрагментации CSe₂⁺. По резюме

Ж. 1977
N 17

CSe_2^+ (u.n)

75-18219

1977

86:197832c Photoionization mass spectrometric study of carbon diselenide. Radler, K.; Berkowitz, J. (Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *J. Chem. Phys.* 1977, 66(5), 2176-82 (Eng). The photoionization spectrum of CSe_2 was studied with 0.15 Å resolu. Autoionization from 4 series of Rydberg states converging on 3 limits analyzed, yielding the following state energies for CSe_2^+ : $X^2\Pi_{g,1/2}$, 9.524 eV; $B^2\Sigma_u^+$, 13.633 eV; and $C^2\Sigma_g^+$, 15.899 eV. A spin-orbit splitting of 0.266 ± 0.002 eV for the X state is deduced. The symmetry of the Rydberg states is inferred from quantum defects. From the threshold for Se^+ formation, a best combination of $\Delta H_{f,298}(CSe_{2,g}) = +62.0$ kcal/mol and $D_0(CSe) = 135 \pm 2$ kcal/mol is deduced. The onset for CSe^+ yields ionization potential $(CSe) \geq 10.94$ eV. The possible mechanisms for fragmentation are discussed.

● (f2) $CSe(\gamma, D_0)$
☐ $CSe_2(\Delta H_f)$

C.A. 1977 86 N26

CSe₂

ХУ-18219

1977

9 Д245. Фотоионизационное масс-спектрометрическое исследование CSe₂. Radler K., Berkowitz J. Photoionization mass spectrometric study of CSe₂. «J. Chem. Phys.», 1977, 66, № 5, 2176—2182 (англ.)
Методом фотоионизационной масс-спектрометрии в диапазоне длин волн ионизирующего излучения 1350—600 Å измерены относит. сечения образования ионов CSe₂⁺, CSe⁺ и CSe⁺ при фотоионизации CSe₂. Обнаруженные в сечении образования CSe₂⁺ пики при энергии 9,524; 13,633; 15,899 эв соответствуют электронным состояниям этого иона X²Π_{g,1/2}; B²Σ_u⁺ и C²Σ_g⁺. Для состояния X²Π_g найдена величина спин-орбитального расщепления, равная 0,266 эв. По измеренному значению потенциала появления иона Se⁺ найдены термодинамич. константы ΔH_{f,298} (CSe₂) = +62 ккал/моль и D₀ (CSe) = 135 ± 2 ккал/моль. Б. Ф. Гордиев

фотоиониз.

ΔH_f

(+1) CSe₂ (ΔH_f)

Ф 1977 N9

XI

(+1)

м.с.

(+1) CSe (Se)

CSe ommeu b name 1977
CSe₂ Stewart (N4)

Smoes S. Stewart
J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2,
(1977, 73(12), 1746-54,
(80) Determination of the
atomization energies
of the molecules CSe
and CSe₂ ...

CSe₂

1978

Drowart y., et al.

G.D.

"Adv. Mass. Spectrom. Vol. 7A
Proc. 4th Int. Mass
Spectrom. Conf., Florence,
1976." London, 1978,
647-50..

vol. C₃ - III

CSe_2

1979

Ashfold et al. N.R. et al.

Обзор:
спомогательный
информационный

Top. Curr. Chem. 1979,
86, 1-90.



coll. H₂O - 11

CS_2

(number 8737)

1979

Ohwada Ken.

ам. нощ.
парек

Chem. Phys. Lett., 1979,
66, N1, 149-53.

ам. CO_2 - III

C5e2

[omnium 10383] 1980.

Ashfold M. N. R.
et al.

gonu-
gacey, J. Chem. Soc. Faraday Trans. II
1980, 76, 905-914.

CSe₂

1980

Ohwado Ken.

расен

J. Chem. Phys., 1980, 72,

сир.
носм.

N 1, 1-6.

сир CO₂, III

CSe₂

Оттиск 12977

1981

10 Б230. Инфракрасный спектр высокого разрешения и определение структуры диселенида углерода (CSe₂). Maki Arthur G., Sams Robert L. High-resolution infrared spectrum and structure determination for carbon diselenide (CSe₂). «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 90, № 1, 215—221 (англ.)

С разрешением 0,03 см⁻¹ измерены ИК-спектры поглощения молекулы CSe₂, обогащенной изотопом ⁸⁰Se до 99%, в области полос 2ν₁+ν₃ и 2ν₂+ν₃ (2031 и 1922 см⁻¹ соотв.). Проанализирована вращательная структура измеренных полос. Рассчитаны молек. постоянные CSe₂.

С. Б. Осин

М. А.

Х, 1982, 19, N 10.

CSe₂

Оттиск 12977

1981

5 Д401. ИК-спектр высокого разрешения и определение структуры диселенида углерода (CSe₂). High-resolution infrared spectrum and structure determination for carbon diselenide (CSe₂). Maki Arthur G., Sams Robert L. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 90, № 1, 215—221 (англ.)

Изучены ИК-спектры (2036—1920 см⁻¹) газообразных молекул CSe₂ (I) и их изотопических (⁸⁰Se) аналогов со спектральным разрешением ~0,03 см⁻¹. Проведен расчет центра полос 2ν₁+ν₃ и 2ν₂+ν₃ I и вращательных постоянных этих полос I. Отмечено, что для основного состояния линейных молекул I величина вращательной постоянной B₀ равна 0,0367831±0,0000100 см⁻¹ при равновесной длине связи C—Se 1,6917±0,0015 Å. Выполнено сопоставление вращательных спектров I и молекул OCS, SCX, SeCX и CX, где X=Se, S и O. Предположено, что наблюдаемое увеличение равновесной длины связи C—X в молекулах OCS обусловлено большей электроотрицательностью атома O по сравнению с атомом Se в I. Библ. 13. И. В. А.

д. н., в.

ф. 1982, 18, №5.

~~на отрыве~~

CSe₂

Omuck 12977 1981

95: 194662x High-resolution infrared spectrum and structure determination for carbon diselenide (CSe₂). Maki, Arthur G.; Sams, Robert L. (Natl. Bur. Stand., Washington, DC 20234 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1981, 90(1), 215-21 (Eng). Measurements are given for the $2\nu_1 + \nu_3$ and $2\nu_2 + \nu_3$ bands (at

2031 and 1922 cm⁻¹, resp.) of an isotopically enriched sample of C⁸⁰Se₂. Band centers and rotational consts. are given for the 2 bands. The ground-state rotational const. is $B_0 = 0.0367831 \pm 0.0000100$ cm⁻¹ and the equil. C-Se bond length is 1.6917 ± 0.0015 Å, slightly smaller than that in OCSe.

UK chemp,
Vi



C.A. 1981, 95, N 22.

CSe₂

номер 12563 | 1981

Откуда К.

кур. работ,

Ze⁻

Spectrochim. acta,
1981, A37, 381-84

CSe_2^{3+}

1984

Morvay L., Cornides I.

Int. J. Mass Spectrom.
Ion Processes 1984,

массспект-
ром. док-во
существован.

62 (3), 263-8.

● (сер. CSe_2^{3+} ; III)

CSe₂

1985

Chae F.T., McDowell
C.A.

cer. no cer.,

J, re;

J. Mol. Struct.
1985, 129 (1-2), 169-
-73.

● (cer. F₂ ; III)

CSe₂

1985

Jasien Paul G.,
Stevens Walter J.

ref. 17.

J. Chem. Phys., 1985,
83, N6, 2984-2989.

(C[•]CO; III)

CSe₂

1988

(Vi, Ze, Se)

108: 121237q The high-resolution Fourier transform spectrum of monoisotopic carbon diselenide (C⁸⁰Se₂) in the ν_2 , ν_3 , and $\nu_1 + \nu_3$ regions: equilibrium, ground, and excited state parameters determined by rovibrational analyses. Buerger, Hans; Willner, Helge (Anorg. Chem., Univ. Wuppertal, D-5600 Wuppertal, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 128(1), 221-35 (En.). The IR spectrum of isotopically highly enriched (94.4% ⁸⁰Se) CSe₂ was recorded with a resolu. of 0.008 cm⁻¹ in the ν_2 range ~310 cm⁻¹ and 0.004 cm⁻¹ in the ν_3 and $\nu_1 + \nu_3$ regions ~1300 and ~1650 cm⁻¹ resp. Data related to the lower states $n\nu_1$ and $m\nu_2$, $n + m \leq 3$, were obtained from an anal. involving 31 vibrational bands comprising a total of 4156 lines with $J_{\max} \leq 220$ which were fit with std. deviations of $(10-97) \times 10^{-5}$ cm⁻¹. Band centers of ¹²C⁸⁰Se₂ were found at $\nu_1 = 369.1331(12)$, $\nu_2 = 313.0539(10)$, and $\nu_3 = 1301.8774(5)$ cm⁻¹. The rotational consts. of the ground and equil. state were detd., $B_0 = 3677.325(8)$ and $B_e = 3683.344(18) \times 10^{-5}$ cm⁻¹, from which the bond lengths were derived, $r_0 = 1.6935536(19)$ and $r_e = 1.692169(3)$ Å. A local perturbation of the (30⁰1) state was obsd., with (43¹0) as supported perturber acting by a $\Delta l = \pm 1$ mechanism. Data are given for ¹³C⁸⁰Se₂, ¹²C⁷⁸Se⁸⁰Se, and ¹²C⁸⁰Se⁸²Se.

C.A. 1988, 108, N14

CSe₂

1988

17 Б1307. Спектр высокого разрешения с преобразованием Фурье моноизотопного C⁸⁰Se₂ в областях ν_2 , ν_3 и $\nu_1 + \nu_3$: параметры основного, возбужденного состояний и равновесные, определенные из анализа колебательно-вращательной структуры. The high-resolution Fourier transform spectrum of monoisotopic C⁸⁰Se₂ in the ν_2 , ν_3 , and $\nu_1 + \nu_3$ regions: equilibrium, ground, and excited state parameters determined by rovibrational analyses. Bürger H., Willner H. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 128, № 1, 221—235 (англ.)

М.П.

С использованием фурье-спектрометра с разрешением 0,004—0,008 см⁻¹ измерены спектры поглощения C⁸⁰Se₂ (94,4% ⁸⁰Se) в обл. полос ν_2 (310 см⁻¹), ν_3 (1300 см⁻¹) и $\nu_1 + \nu_3$ (1650 см⁻¹). Проанализирована вращат. структура 31 полосы (с учетом горячих полос) и по 4156 частотам переходов рассчитаны спектроскопич. постоянные (см⁻¹): $\nu_1^0 = 369,1331(12)$, $\nu_2^0 = 313,0907(11)$, $\nu_3^0 = 1301,8774(5)$, $\omega_1 = 374,4903(29)$, $\omega_2 = 314,378(3)$, $x_{11} =$

Х. 1988, 19, № 17

$= -0,1749(3)$, $x_{22} = 1,2862(6)$, $x_{13} = -4,16326(11)$, $x_{12} =$
 $= -2,9258(11)$, $g_{22} = -1,0054(3)$, $x_{23} = -5,35496(13)$
 $\alpha_1^B = 4,069(14) \cdot 10^{-5}$, $\alpha_2^B = -7,870(3) \cdot 10^{-5}$, $\alpha_3^B =$
 $= 23,7084(2) \cdot 10^{-5}$, $q_2 = 1,0743(13) \cdot 10^{-5}$, $\beta_1 = 0,053(5) \cdot$
 $\cdot 10 \cdot 10^{-10}$, $\beta_2 = 0,246(18) \cdot 10^{-10}$, $\beta_3 = 0,0238(6) \cdot 10^{-10}$, $B_0 =$
 $= 3677,325(8) \cdot 10^{-5}$, $B_c = 3683,344(18) \cdot 10^{-5}$, $D_0 = 14,494$
 $(16) \cdot 10^{-10}$, $D_c = 14,21(4) \cdot 10^{-10}$. Предложен также на-
бор постоянных для $^{13}\text{C}^{80}\text{Se}_2$. Обнаружены возмущения
в состоянии $30^{\circ}1$, вызванные взаимодействием с со-
стоянием $43^{\circ}0$. С. Б. Осин



CSe₂

1988

8 Л200. Фурье-спектр высокого разрешения моноизотопного C⁸⁰Se₂ в областях ν_2 , ν_3 и $\nu_1 + \nu_3$: параметры равновесной конфигурации, основного и возбужденных состояний, определенные в результате колебательно-вращательного анализа. The high-resolution Fourier transform spectrum of monoisotopic C⁸⁰Se₂ in the ν_2 , ν_3 , and $\nu_1 + \nu_3$ regions: equilibrium, ground, and excited state parameters determined by rovibrational analyses. B ü r g e r H a n s, Willner Helge. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 128, № 1, 221—235 (англ.)

М.А.

Изучена колебательно-вращательная (КВ) структура в области полос ν_2 (310), ν_3 (1300) и $\nu_1 + \nu_3$ (1650 см⁻¹) моноизотопной формы C⁸⁰Se₂, наблюдаемая в ИК-спектре поглощения с помощью фурье-спектрометра. С разрешением 0,008 см⁻¹ в области ν_2 и 0,004 см⁻¹ в области ν_3 и $\nu_1 + \nu_3$ измерены положения >4000 линий, образующих КВ структуру 31 составных, обертоновых и горячих полос молекулы. В результате КВ анализа наблюдаемого спектра определены значения молекулярных постоянных для основного и возбужденных К состояний, а также параметры равновесной конфигурации C⁸⁰Se₂. Представлены данные для ряда других изотопных форм CSe₂.

В. К.

ф. 1988, 18, н 8

1989

 $\underline{CSe_2}$ (K) $\underline{C_2Se}$ (K) $\underline{CSe}$ (K) $\underline{CSeH}$ (K)

смагнуті,
 сміхмупа,
 міорім. піву

111: 12675x Electronic structures of polymeric carbon diselenide, carbon monoselenide and dicarbon selenide. Springborg, Michael (Nordisk Inst. Teor. Atomfys., Koebenhavn, DK-2100 Den.). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1989, 39(8), 5327-44 (Eng). Results are reported of first-principles calcns. on single chains of various stoichiometric and geometrical forms of polymeric carbon-selenium compds. It has been proposed that carbon diselenide consists partly of isolated selenium; therefore, $\underline{CSe_2}$, $\underline{CSe}$, $\underline{C_2Se}$, and a $\underline{CSeH}$ polymer were considered. Many of the proposed structures are unstable. The existence of an alternative form is predicted, which according to the calcns. should be stable when only considering a single isolated chain. The calcns. show that it reacts with other compds., of which some could be of interest from a "synthetic metal" point of view. The results are compared with results of similar calcns. on polymeric selenium, carbon chains, polyacetylene, and CSe_2 mols.

c.A. 1989, 111, N 2