

C_3O_2

6302)

Koke K. A. Reymersen L.H.

1931

J. Phys. Chem. 35, 3025

Reiner untersuchen CO_2 .

Wieder diacetyldaritaric anhydride

von Koke Reymersen.

C_2O_2

Brookway L.D., Pauling &

1933
1934

Proc. Nat. Acad. Sci. Wash, 19, 860, 1934

Исследования, связанные

C_2O_2

Proc. Nat. Acad. Sci. Wash, 20, 336, 1934

CO_2

Hurd, Plazim

1933

JACS, 55, 757.

Метод приготовления CO_2

способу diacetyl tartaric anhydride

CO₂

Boersch H.

1935

Monatsh. f. Chem.
95, 311

И-групп. изменение CO₂

C_3O_2

Le-Fèvre C. & Le-Fèvre J. C.

1935

J. Chem. Soc., 1936

изотермическое явление
 C_3O_2 .

CO₂

Klemenč A.

11935

Atk. Chem. 66, 337

Медь излучает CO₂.

1936

CO_2

Engler, Kolrausch

Z. Phys. Chem. B34, 214

Panion Cheng CO_2 .

$C_3O_2(w)$ · 5423-IV

1936

Thompson and Healey
I. Proc. Roy. Soc. (London) A 157, 331
(1936)

Circ. 500

10

C₂O₂

Lord R.C. Wright W.

11937

J. Chem. Phys., 5, 642.

U.K. a paper on energy C₂O₂.

C₃O₂ (w)

V-5424 | 1937

Thompson H.W., Linnett J.W.

J. Chem. Soc. 1937, 1291-5

"The spectrum and molecular
structure Carbon suboxide, and
evidence for hybrid links".

2

W

C.A., 1937, 7754⁵

C302
структура

W-8323

Macke H, Sutton L.F T.F.S. 47,937, ⁻⁴²1951

методом г. т. н. в. получено

$$C=O = 1.19 \pm 0.03; C-C = 1.28 \pm 0.03$$

из излучений в вакууме

Показано, что молекула имеет
структуру линейную

C.A. 46
2862 f

CO_2

O'Loane Y.K.

11953

Y. Ch. Ph. 21, 672

Исход. галеноид

и.к. область

Сильфид CO_2

C₃O₂ (ν_i)

8545-10

1953

O'Loane J.K.

J.Chem.Phys., 1953, 21, N. 4,
669-674 (*asym*)

Some absorption bands in
the far infrared

PX., 1954, N 3, 14182

1954

BP 5417 - IV

C₃O₂

(V)
Raman

Long D.A., Murfin F.S., Williams R.L.
Proc. Roy. Soc., 1954, A223, 251-66

The Raman...

J

BP 5318-IV

1954

C₃O₂ (str)

Rix H. D.

J. Chem. Phys., 1954, 22, 429-33

The infrared and Raman...

J



Basdiansen O.

1956.



$= 1,279 \text{ Å}$

0

(private communication) ссылка в
статье Stoiceff-a (Canad. J. Phys. 35, 18, 1957)

Измерено $C=C$ расстояние в

C_3O_2 , найдено $z_{C=C} = 1,279 \text{ Å}$

C_3O_2 Реннеб С.И. 1957

ДАН, 117, 14, 648

К вопросу о свойствах гидро-
нужочных уафод-иенорагневых
соединений.

C₃O₂

C. N. R. RAO.
Livingston R.I.

11958

SnCl₄

Dissert. Abstr., XIX, 15, 968.

Молекула, структура неизвестна
между группами экранирована

C₃O₂ : линейная, симметричная структура
C-C = 1.28 ± 0.013 Å
C-O = 1.16 ± 0.013 Å.

SnCl_4 - Գծրաձորա. Գրգռիչ $Z_{\text{Sn-Cl}} = 2,31 \pm 0,01 \text{ \AA}^2$

1958

C_3
 C_{2h} nos.

Potential constants of carbon suboxide. K. Venkateswarlu and M. G. Krishna Pillai (Annamalai Univ., Annamalai Nagar, India). *Z. physik. Chem.* (Frankfurt) 18, 391-5(1958)(in English).—Wilson's F-G matrix method has been applied to C_3O_2 , by assuming a nonlinear centrosymmetric structure belonging to the point group C_{2h} , and the force consts. have been evaluated. Force consts. given are: f_D , 9.76; f_d , 16.50; f_α , 0.6639; f_β - $f_{\beta\beta}$, 0.5978; f_{Dd} , 0.3000; f_{DD} , 0.650; $f_{d\alpha}$, 0.8405; $f_{d\beta}$, 0.8405, in 10^5 dynes/cm.

H. H. Jaffé

C.A.1961:55:6:5122i-5123a

C_3O_2

сир.
посл.

Venkareswartha K

Pillai M. G. Krishna

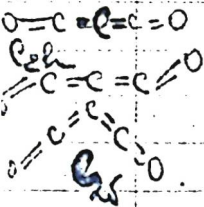
1958

Zs. Phys. Chem. 18, 112, 391-5

Электронные колебательные
 C_3O_2

Сир. посл. C_3O_2 были рассмотрены
по методу "Вильсона" для
неинерционных колебаний модели C_2H .

Dooh



Ф-60-1-241

Зеруверт дискутирован. 3 сфизурь. Для первого
21 в раман сиеуре доашинь Дари Дарь мивинь
Згаурт, для Зей - все 9. Результат ранний
работ не позволяли сделать правильный вывод
Недавно Long и др [2] и Kix [3] вновь исследовали
Амюр Co_2 , причем в работе [2] пришли к выводу
о линейной структуре, а Kix обратил внимание
на нелинейную структуру. Результаты исследований
Раман сиеуре и сиеуре и.к. позволяют сделать
вывод 3 сфизурь. И 4 сфизурь доашинь мивь Згаур
в Раман сиеуре [2] нами 5, [3] - 4 так-то газ
доашинь Дарь обнаружены или 1. Концентрация, газура
Синтез антимони при 2200 и 828 см⁻¹
внесены и симметрии. Колба антимония Sg
она состоит из D_{2h} или типа Ag для C_{2h} сфизурь

а линия при 574 см^{-1} - к гидрирован. коал.
 при 2, у дна линейной модели, и в дн
 линзаобразной модели.

Для линейной модели доминирует
 и.к. сиреневый сен. зонд, две из коф. // коал.
 с расщеплением $\sim 11 \text{ см}^{-1}$ между P и R ветвями
 а 2 другие - $\perp$ коал с P, U и R ветвями.

Зонд и др. с коал. корн. коэф. расщепл.
 коал. при $2258, 1570, 550$ и 198 см^{-1} к
 сен. коал. линиям, а (●) сиреневые коал.
 рассматриваем как объект и коал. коал.

Однако Rix не нашел нам' разделения между R. R
связью хотя он использовал прибор высокого разрешения.
Поэтому, он пришел к выводу, что линейные
группы не образуют цепи. Более того, полевые
при 742 и 1050 см⁻¹ не объяснены Лонд-ом и др.
Rix внес к неплоским колебаниям группа D_{3h}
для речной группы C_{2h}. Дополнительно к
сказанному Rix отметил согласие между
результатами дифракции. Измерения,
выполненные Майе и Султан-ом (1972) и
Смелюком. данными полученными
им в сауре, (см. [1]), а также Кларка
с помощью C. с. с. C=C=C, что является
подтверждением существования или молекул C_{2h}

C ₃ O ₂	Venkateswarlu, Pillai	13
-------------------------------	-----------------------	----

Різ заг смед. Фнесение загга:

2185	} Ag	1550	} Au	2258	} Bu
817		780		1670	
577				635	

В издании работы Симова проф. С. О. З.
вычислен газ C_2H модели на сен. газеф,
рекомендуемому Р. И. О. М. по методу Wilson'a



fd, fd, fd, fp fdo. fdo fdo fdo fdo fdo

One Ag E mapping

$$\begin{bmatrix} f_{00} + f_{00} \\ f_{00} \\ f_{00} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} f_{00} \\ f_{00} \\ d f_{00} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} d f_{00} \\ d f_{00} \\ d^2 f_{00} \end{bmatrix}$$

One Bu

$$\begin{bmatrix} f_{00} - f_{00} \\ f_{00} \\ d f_{00} \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} f_{00} \\ f_{00} \\ d f_{00} \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} d f_{00} \\ d f_{00} \\ d^2 f_{00} \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ d^2 f_{00} \end{bmatrix}$$

Y mapping:

$$\begin{aligned} \frac{A_g}{g} \quad y_{11} &= \mu_c ; \quad y_{22} = \mu_0 + \mu_c \\ y_{33} &= \frac{\mu_0}{d^2} + \mu_c \left[\frac{1}{d} + \frac{3}{2d^2} - \frac{2 \cos d}{2d} \right] \end{aligned}$$

$$y_{12} = \mu_c \cos d$$

$$y_{13} = - \left[\frac{\mu_c \sin d}{d} + \frac{\mu_c \cos d}{2 \sin d} \right] \quad y_{33} = - \mu_c \sin d / d$$

H_2O_2

Venkateswarlu, P. Elai

4

Dr. B. V.

$$g_{44} = 3\mu_c; \quad g_{55} = \mu_0 + \mu_c \quad g_{22}$$

$$g_{66} = \frac{\mu_0}{d^2} + \frac{\mu_c}{\sin^2 \alpha} \left[\left(\frac{1}{2} - \frac{\cos \alpha}{d} \right)^2 + \left(\frac{1}{d} - \frac{\cos \alpha}{2} \right)^2 + 2 \cos \alpha \left(\frac{1}{2} - \frac{\cos \alpha}{d} \right) \left(\frac{1}{d} - \frac{\cos \alpha}{2} \right) \right] + \frac{2\mu_c (1 + \cos \alpha)}{d^2 \sin^2 \alpha}$$

$$g_{27} = 4\mu_c/d^2; \quad g_{45} = \mu_c \cos \alpha; \quad g_{46} = -\mu_c \sin \alpha/d$$
$$g_{47} = 0; \quad g_{56} = -\mu_c \sin \alpha/d; \quad g_{57} = 0; \quad g_{67} = 0.$$

Makara

Caffare.

$$\tau_{c=c} = 1.28$$

$$\tau_{c=0} = 1.19 \text{ A}$$

$\angle c=c=0=150^\circ$

концентрация 10^5 г/м^3

$$\sqrt{D} = 9,26$$

$$\sqrt{d} = 16,50$$

$$\sqrt{2} = 0,6639$$

$$\sqrt{p-p_p} = 0,5877$$

$$\sqrt{2d} = 0,3000$$

$$\sqrt{2D} = 0,650$$

$$\sqrt{2d_1} = 0,8405$$

$$\sqrt{d_1} = 0,8405$$

таблица

Расс.

Наша

577

577

810

817

2202

2185

559

559

635

635

1580

1580

2271

2271

6302 Иматенварли, Рилли 5

Тонд и гр. предсказание мин. модели, расценки
симв. ност. fD и fDD , ценностное значение fD и fDD
из кривой по данным Halverson-a и Williams-a [6]
 fD -варьируется в разумных пределах и
выделяется соответствующий индекс fDD .
Эти расчеты выполнялись зад. листом
таблиц. В табл. II сравниваются данные
для мин. модели [2] и наши данные зад. листом
дефектной обработки нашей работы с
того же сим. ност. н-м. Кривая из табл. IV
к. л. предположений, как у Нонга и гр. [2].

Trans. 2

Mea.	$\frac{1}{d}$	$\frac{1}{d^2}$	$\frac{1}{L}$
C ₃ O ₂	16,5	9,76	0,6639
C ₃ O ₂ [23]	15,5	12,15	0,2390 0,86

Shurepaxia

2. Long R.A., Marfin R.S., Williams R.L., Proc. Roy. Soc. L A223, 251, 1954
3. Rix H.D., J. Chem. Phys. 22; 429, 1954
4. Muzale H., Sutton J.E., Trans. Far. Soc., 47 937, 1951.
5. Wilson E.B., J. Ch. Ph., 7, 1046, 1939; 9, 76, 1941
6. Halverson F., Williams R.L., J. Ch. Ph., 15, 552, 1947

BF₃

Cyvin S. J. (Сювин)

1959.

C₃O₂

[BCP - 5415 - IV]

" 35"

Tidsskr. kemi, bergvesen og
metallurgi, 1959, 19, 14, 83-85 (нояб., декаб.)

X

Корреляция между спектрометрич.
и рентгенографическими данными.

Расчет корреляция между
микро-размерами и стандартными

определенным методом. Размеры, определен-
ные Силер. и эн. град. измерениями. Приводятся
такие примеры для мол.-л. СБЗ, СК
бензола, а также. Кратко рассмотрены также
различия в измерениях неоргани-
ческих соединений. Предлага-
ется использовать эн. град. данные для
определения свойств соединений не-
органических ВБЗ.

CO_2 ($\tau_{\text{C-C}}$, $\tau_{\text{C-O}}$)

ВФ-IV-5416

1959

Livingston R.W., Rao C.N.R., Ramachandra
J. Amer. Chem. Soc., 1959, 81, 52, 285-287 (англ)

Строение молекулы негидрокси углерода

РЖХ, 1959, 15, 52358

WV (OP) 2

CO_2 Miller F.A., Carlson G.L., 1959
White W.B.

Spectrochim. Acta, 1959, 15, 709

Используется с разрешением
от 70 до 400 cm^{-1} .

1959

C_3
 C_3O_2

Pitzer, Clementy
JACS, 1959, 81, 4477

Осн. соед. C_3 'Et

ацетилен реакция

C_3O_2

Stoicheff B.P.,

1959

Advan. Spectry, 1959, 1, 124.

C_3O_2 Miller F.A., 1962.

Paper A311, Preprints of International Symposium on Molecular Structure and Spectroscopy, Tokyo, September, 1962.

C_3O_2

Plyler E.K.

1962

Список

Internat. Sympos. molec. Struct.
and Spectrosc. Tokyo, 1962,
S.C., S.A., C 307/1 - C 307/4.

Определение молекулярных
постоянных из спектров
с высокой разрешенностью.

Х-1963-22

1969

C₃O₂

mass-spect

Mass spectrum of carbon suboxide. Thomas J. Hirt and James P. Wightman (Pennsylvania State Univ., University Park). *J. Phys. Chem.* 66, 1756(1962). The mass spectrum of C₃O₂ (24 peaks, *m/e* 12 to 70) is reported.
Raymond C. Ferguson

C.A. 1969. 57. 13

15960 e

C₃O₂

Масс-спектр

1962

24 Б65. Масс-спектр недокиси углерода. Hirt Thomas J., Wightman James P. Mass spectrum of carbon suboxide. «J. Phys. Chem.», 1962, 66, № 9, 1756 (англ.)

Получен масс-спектр недокиси углерода при понижающем напряжении 50 в, токе эмиссии электронов 50 μ а и ускоряющем напряжении 1750 в. Основные пики в масс-спектре принадлежат ионам $C_3O_2^+$, C_2O^+ , CO^+ , C_2^+ , C^+ с относительными интенсивностями 94,5, 100, 27, 13,3, 26. Ю. Ходеев

X. 1963. 241

6302
6 Б108. Силовое поле Юри — Бредли. Молекула C_3O_2 . Venkateswarlu K., Thanalakshmi R. Urey — Bradley force field: C_3O_2 molecule. «Current Sci», 1962, 31, № 5, 186 (англ.)

Для молекулы C_3O_2 принята зигзагообразная модель с центром симметрии, принадлежащая к группе C_{2h} . Для нее составлена потенциальная функция типа Юри — Бредли с шестью силовыми постоянными, вычисленными по эксперим. значениям семи частот плоских колебаний. Дано отнесение всех девяти частот колебаний к типам симметрии. М. Ковнер

X. 1963. 6

C_3O_2 Сил. поле.
газиф.

1 Д57. Силевое поле Юри-Брэдли: молекула C_3O_2 .
Venkateswarlu K., Thanalakshmi R. Urey-
Bradley force field: C_3O_2 molecule. «Current Sci.», 1962,
31, № 5, 186 (англ.)

Для молекулы C_3O_2 принята зигзагообразная модель
с центром симметрии, принадлежащая к группе C_{2h} .
Для нее составлена потенц. ф-ция типа Юри—Брэдли,
содержащая шесть силовых постоянных. Они вычисле-
ны по опытным значениям семи частот плоских колеба-
ний. Дано отнесение всех девяти частот колебаний к
типам симметрии. М. Ковнер

фз. 1965. 18

1962

C₃O₂C₃O₂

W. B. Guenther

Urey-Bradley force field: the C₃O₂ molecule. K. Venkateswarlu and R. Thanalakshmi (Annamalai Univ., Annamalainagar). *Current Sci. (India)* 31, No. 5, 186(1962). The mol. parameters and observed frequencies of C₃O₂ are given and force consts. are evaluated on the basis of a Urey-Bradley force field.

W. B. Guenther

CA. 1962.57-9

10540c

1963

10 Д193. ИК-спектры поглощения недоокиси углерода и малонитрила в твердом аргоновом растворе. Ames L. L., White David, Mann D. E. Infrared absorption spectra of carbon suboxide and malononitrile in solid argon matrices. «J. Chem. Phys.», 1963, 38, № 4, 910—917 (англ.)

Получены ИК-спектры в области $440-4400 \text{ см}^{-1}$ недоокиси углерода и малонитрила в среде твердого аргона при $t = 2$ и 20°K . Спектры сравниваются с ИК-спектрами B_2O_3 и спектрами малонитрила и C_3O_2 в газовой фазе. Показано, что молекула C_3O_2 принадлежит к группе симметрии $D_{\infty h}$. Указано, что исследования ИК-спектров твердых растворов в-в при низкой t могут быть более полезны при колебательном анализе сложных молекул, чем ИК-спектры паров этих соединений. Библ. 17 назв.

Д. Глебовский

ф. 1963. 109

1963

 C_3O_2 (B_2O_3)

Infrared absorption spectra of carbon suboxide and malononitrile in solid argon matrixes. L. L. Ames, David White (Ohio State Univ., Columbus), and D. E. Mann. *J. Chem. Phys.* 38, 910-17(1963). The infrared spectra of C_3O_2 and malononitrile isolated in solid Ar matrixes at low temps. were measured, 410-4400 cm^{-1} . The matrix spectra of C_3O_2 support the linear sym. model. A comparison of the matrix spectra and vibrational assignments of the 3 isoelectronic mols. C_3O_2 , $CH_2(CN)_2$, and B_2O_3 favors a large apex angle in B_2O_3 . CA

1963, Aug. 13. (page 10) Ames.

Had carbon to do with it.

C.A. 1963.58.7

6346.e

$V_1 (Zg^+)$ 2200 б)

$V_2 (Zg^+)$ 832 б)

$V_3 (Zu^+)$ 2282

$V_4 (Zu^+)$ 1594.

$V_5 (Fig)$ 548 б)

$V_6 (Fiu)$ 536

$V_7 (Fiu)$ 192 с)

б) . рамка сисид. многогр.

в) сираторице

2200

832

2258

1575

578

549

198

но патр
Лондон

с) ч.к. Снежр
6 case. 10/200

1963

24 Б184. Инфракрасные спектры поглощения недоокиси углерода и нитрила малоновой кислоты в матрицах твердого аргона. Ames L. L., White David, Mann D. E. Infrared absorption spectra of carbon suboxide and malononitrile in solid argon matrices. «J. Chem. Phys.», 1963, 38, № 4, 910—917 (англ.)

В области $400-4000 \text{ см}^{-1}$ измерены ИК-спектры поглощения недоокиси углерода (I) и динитрила малоновой к-ты (II), изолированных при низких т-рах (4 и 20°K) в матрицах твердого аргона. Показано, что матричный спектр I согласуется с линейной симметричной моделью (точечная группа $D_{\infty h}$). Сравнение матричных спектров и частот нормальных колебаний трех изоэлектронных молекул I, II и B_2O_3 свидетельствует в пользу большого угла $\text{B}-\text{O}-\text{B}$ в B_2O_3 .

Резюме авторов

X. 1963. 24

C_2O_3 ; C_3O_2

(ΔH_f)
(D_o)

Bq-7364-1V

1963

Carbon suboxide. R. Botter (Centre Etudes Nucl., Saclay, France). *Advan. Mass Spectrometry, Proc. Conf., 2nd, Oxford, 1961* 2, 540-54 (Pub. 1963). A mass spectrometric study of this mol. gives the mass spectrum, the ionization potential of the mol., and appearance potentials of both pos. and neg. fragment ions. These quantities permit an estimate of the bond dissoen. energies and of the heat of formation. V. H. Dibeler

C.A. 1963. 59.9
9444g

15 Б145. Новые данные по колебательным спектрам некоторых неорганических молекул. Miller F. A. Recent results on the vibrational spectra of some inorganic compounds. «Pure and Appl. Chem.», 1963, 7, № 1, 125—129 (англ.)

Изучены ИК-спектры (ИКС) и спектры комб. расс. (СКР) PCl_5 симметрии D_{3h} . Найдены две новые активные ИК-частоты 299 и 273 см^{-1} и дана новая интерпретация частот (см^{-1}): $393, a_1'$ (СКР (п.)); $446, 299, a_2'$ (ИКС) $580, 273, 100 e'$ (СКР, ИКС); $280, e''$ (СКР). Получены ИК-спектры и спектры комб. расс. ионного кристалла $\text{PCl}_4^+ \cdot \text{PCl}_6^-$. Спектры ионов разделены, проведена интерпретация частот: PCl_4^+ : $459, a_1$ (СКР (п.)); $171, 1g$ (СКР); $658, 252, f_2$ (СКР, ИКС). PCl_6^- : $360, a_{1g}$ (СКР (п.)); $281, 1g$ (СКР); $449, <62, f_{1u}$ (ИКС); $150, f_{2g}$ (СКР). Для C_3O_2 снят спектр комб. расс. в области $70-300 \text{ см}^{-1}$. Отсутствие полос в этой области, а также измеренный ИК-спектр и неправильный контур линий подтвердили вывод, что молекула C_3O_2 имеет не линейную, а изогнутую *транс*-конфигурацию. В $\text{C}(\text{CN})_3$ более

1963

БФ - IV - 8486
БФ - IV - 518-IV

х. 1964. 15

высокая электроотрицательность азота по сравнению с С, а также данные ИК-спектров и спектров комб. расс. $\text{KC}(\text{CN})_3$ и $\text{ClC}(\text{CN})_3$ дают основание считать, что ион $\text{C}(\text{CN})_3^-$ имеет плоскую структуру. Спектроскопически исследованы молекулы $\text{Si}(\text{NCO})_4$, $\text{Si}(\text{NCS})_4$, $\text{P}(\text{NCO})_3$; $\text{PO}(\text{NCO})_3$. Установлено, что системы $\text{Si}^-\text{N}^+=\text{C}=\text{O}$ и $\text{Si}^-\text{N}^+=\text{C}=\text{S}$ имеют линейную структуру за счет значительной двоевязанности атомов Si и N, что обусловлено взаимодействием неподеленной пары электронов N с 3d-орбитой Si. $\text{P}(\text{NCO})_3$ и $\text{PO}(\text{NCO})_3$ образуют тригон. пирамиду симметрии C_{3v} .
Л. К.



C₃O₂

ΔI-514C-IV
BSP-549-IV

196
N 24 B74. - Доказательство линейного строения недоокиси углерода. — Carbon suboxide structure proven linear. «Nat. Bur. Standards Techn. New Bull.», 1964, 48, № 3, 48—49 (англ.)

Получены спектры поглощения высокого разрешения в области 3200 см^{-1} и идентифицирована полоса, соответствующая $\Sigma_u - \Sigma_g$ -переходу в линейной молекуле. Вычисленный из спектральных данных момент инерции хорошо совпал с величиной, определенной из электронографич. измерений.

Ю. Мошковский

X.1964.24

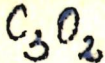
1964

Vibrational spectra of carbon suboxide (C_3O_2) for different aggregation states. A. P. Aleksandrov, V. I. Tyulin, and V. M. Tateyskii. Optika i Spektroskopiya 17(1), 38-44(1964). An investigation was made of the infrared absorption spectra ($400-4600\text{ cm}^{-1}$) of gaseous (1-100 mm. pressure in cell) and solid C_3O_2 (at -140°) and of the Raman spectra of liquid and solid C_3O_2 . The results in the main agree with the observations made by Lafferty, *et. al.* (CA 60, 2455d). A. P. Kotloby

C_3O_2
Chemist

11-9336

C.A. 1064.61.11
12796 B



колебательный
спектр

11-9336

12 Д181. Колебательные спектры недоокиси углерода (C_3O_2) в различных агрегатных состояниях. Александров А. П., Тюлин В. И., Татевский В. М. «Оптика и спектроскопия», 1964, 17, № 1, 38—44

Исследованы ИК-спектры газообразной и твердой недоокиси углерода и спектры комб. рас. ее в жидкой и твердой фазе. Исчезновение ряда полос ($635, 780, 1665 \text{ см}^{-1}$) в ИК-спектре при переходе в-ва из газообразного в твердое противоречит отнесению этих полос к основным колебаниям молекулы. Изменения в спектрах при изменении агрегатного состояния в-ва хорошо согласуются с предложенным отнесением для линейной модели молекулы ($D_{\infty h}$) и противоречат отнесению к зигзагообразной модели молекулы (группа симметрии C_{2h}). Полосы, отсутствующие в ИК-спектре твердого в-ва, отнесены к т. наз. «теплым полосам» и разностным частотам, интенсивность которых сильно зависит от т-ры. Отмечена трудность отнесения к линейной модели полос 2450 и 3200 см^{-1} в ИК-спектре газа.

1964

ф. 1964. 128

C_3O_2
спектр

1V-9336

2 Б105. Колебательные спектры, недоокиси углерода (C_3O_2) в различных агрегатных состояниях. Александров А. П., Тюлин В. И., Татевский В. М. «Оптика и спектроскопия», 1964, 17, № 1, 38—44

Изучены ИК-спектры газообразной и твердой и спектры комб. расс. жидкой и твердой недоокиси углерода. Исчезновение ряда полос ($635, 780, 1665 \text{ см}^{-1}$) в ИК-спектре при переходе в-ва из газообразного в твердое противоречит отнесению этих полос к основным колебаниям молекулы. Это, в свою очередь, противоречит предлагаемому отнесению наблюдаемых спектров к зигзагообразной модели молекулы (группа симметрии C_{2h}). Наоборот, изменения в спектрах при изменении агрегатного состояния в-ва хорошо согласуются с предложенным отнесением для линейной модели молекулы ($D_{\infty h}$). Полосы, отсутствующие в ИК-спектре твердого в-ва, отнесены к так называемым «теплым полосам» и разностным частотам, интенсивность которых сильно зависит от т-ры. Сдвиг частот, происходящий в спектре при переходе в-ва в твердое состояние, согласуется с принятым отнесением для линейной модели.

1964

ж. 1965. 2

Трудностью при отнесении наблюдаемых спектральной модели остается, как и ранее, отнести 2450 и 3200 см^{-1} в ИК-спектре газа. Однако ошибочность вывода о том, что анализ тонкой структуры этих полос приводит для зигзагообразной молекулы к углу между связями $\text{C}=\text{C}=\text{O}$, равному

Реферат ав.

АСТС
СИЛ

C₃O₂

1964

creup

Infrared spectrum of gaseous carbon suboxide. Alpha O.
Diallo and Pierre Barchewitz (Chim. Phys., Orsay, France).
J. Chim. Phys. 61(9), 1296-306(1964)(Fr). The spectrum of
C₃O₂ prep'd. by 2 different methods was studied, 250-5000 cm.⁻¹
Most of the frequencies could be interpreted on the basis of
D_{∞h} symmetry. John W. Ward

C.A. 1965. 62. 5
4785 gh

C_3O_2

спектр

IV-9594

1964

V16 B161. Инфракрасный спектр недоокси углерода в газообразном состоянии. Diatto Alpha O., Barchewitz Pierre. Spectre infrarouge du sous-oxyde de carbone à l'état gazeux. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1964, 61, № 9, 1296—1306 (франц.)

В области $5000-250\text{ см}^{-1}$ изучен ИК-спектр поглощения газообразной C_3O_2 (I), полученной двумя различными способами. При помощи теоретич. анализа нормальных колебаний по методу Вильсона дано отнесение большей части наблюдаемых колебательных частот для симметрии $D_{\infty h}$. Обсуждена проблема положения и структуры полос, затрудняющих интерпретацию спектра I в газовой фазе. Особое внимание уделено двойной полосе, частоты компонент которой расположены по обе стороны от значения 832 см^{-1} , соответствующего колебания ν_2 в спектре комб. расс. Тонкая структура указанной полосы обусловлена Q-ветвями колебательных переходов $\Sigma_g^+ - \pi_g$, взаимодействующих с возбужденными гармонич. уровнями колебания ν_7 . Резюме авторов

ж. 1965. 16

BCP-9720-IV

1964

C302

Linearity of carbon suboxide confirmed. W. J. Lafferty and A. G. Maki (Natl. Bur. of Stds., Washington, D.C.). *Chemistry* 37(7), 19-23(1964). The National Bureau of Standards used a specially built, high resolution spectrometer and concluded that C suboxide is linear, as predicted by valence theories.

RCTT

(Cipyrtyr)

C.A. 1964 G. NG 6412 e

C_3O_2

структура

У 11 Д199. Определение структуры недоокиси углерода из ИК-спектра высокого разрешения. Lafferty Walter J., Maki Arthur G., Plyler Earle K. High-resolution infrared determination of the structure of carbon suboxide. «J. Chem. Phys.», 1964, 40, № 1, 224—229 (англ.)

В области $3142-3195 \text{ см}^{-1}$ получены при высоком разрешении спектры поглощения молекулы C_3O_2 , обусловленные переходами типа $\Sigma_u - \Sigma_g$ и $\Pi_g - \Pi_u$. Выполненный анализ тонкой структуры полос показывает, что молекула C_3O_2 обладает симметрией $D_{\infty h}$. Постоянная молекулы $B_0 = 0,073206 \pm 0,00002 \text{ см}^{-1}$. Центр полосы $\Sigma - \Sigma$ лежит при $\nu_0 = 3169,883 \text{ см}^{-1}$. Большое число «горячих полос», слабая зависимость интенсивности полос от температуры и большое значение постоянной l -удвоения ($q'' = 0,00017 \div 0,00043 \text{ см}^{-1}$) указывают, что частота дефкол. ν_7 должна лежать в области $25-70 \text{ см}^{-1}$.

К. Василевский

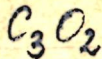
1964

1393

8215-16

16

ф. 1964. 112



снелитр нол.
всикоро
наппевенар

$\Sigma_u - \Sigma_g$
 $\Pi_g - \Pi_u$

3142-3195 cm⁻¹

Vi

C.A. 1964-603

2455 de

BP-8215-IV

1964

High-resolution infrared determination of the structure of carbon suboxide. Walter J. Lafferty, Arthur G. Maki, and Earle K. Plyler (Natl. Bur. of Stds., Washington, D.C.). *J. Chem. Phys.* 40(1), 224-9(1964). High-resolution spectra were obtained and the vibration-rotation absorption spectrum was analyzed for a $\Sigma_u - \Sigma_g$ and a $\Pi_g - \Pi_u$ transition in C_3O_2 between 3142 and 3195 cm⁻¹. The absorption region studied contains a parallel combination band and a series of assocd. hot bands. The successive hot bands are displaced toward high frequencies in such a manner that the $\Sigma - \Sigma$ and $\Pi - \Pi$ bands are relatively free of overlapping lines. The mol. must have $D_{\infty h}$ symmetry with $B_0 = 0.073206$ cm⁻¹. The large no. of hot bands, the variation of intensity with temp., and the large value of the l -doubling const. q all indicate that the lowest frequency bending mode must be of very low energy.

RCJO

C₃O₂

✓ 24 Б132. Определение структуры недоокиси углерода из инфракрасного спектра высокого разрешения. Lafferty Walter J., Maki Arthur G., Plyter Earle K. High-resolution infrared determination of the structure of carbon suboxide. «J. Chem. Phys.», 1964, 40, № 1, 224—229 (англ.)

В области 3142—3195 см⁻¹ получены при высоком разрешении спектры поглощения молекулы C₃O₂, обусловленные переходами типа $\Sigma_u - \Sigma_g$ и $\Pi_g - \Pi_u$. Выполненный анализ тонкой структуры полос показывает, что молекула C₃O₂ обладает симметрией $D_{\infty h}$. Постоянная молекула $B_0 = 0,073206 \pm 0,00002$ см⁻¹. Центр полосы $\Sigma - \Sigma$ лежит при ν_0 3169,883 см⁻¹. Большое число «горячих полос», слабая зависимость интенсивности полос от т-ры и большое значение постоянной e -удвоения ($q'' = 0,00017 - 0,00043$ см⁻¹) указывают, что частота деф. кол. ν_7 должна лежать в области 25—70 см⁻¹.

К. Василевский

1964

РФ-8915-IV

х. 1964.24

C_3O_2
 $S_{230^\circ K}$
→

McDonnell L.A.

Diss. Abstrs, 1964, 25, №3, 1603

(Rice University, 1964) Houston
Энтронпия и связанные Термодин.
св-ва н-валерьев. кис-ты и неорганич.
углерода; определение низшей вен-
ding частоты неорганич. углерода

Калориметрические: $S_{230^\circ K} = 62,12 \pm 0,15 \text{ э.е.}$

Оценка: $\rightarrow 61,6 \pm 2,6 \text{ см}^{-1}$

~~Исходные данные~~
~~Исходные данные~~

Термодинамич. св-ва n-valeric acid и CO_2 определялись экспериментально методом изотермической калориметрии. Температурно-объемная зависимость CO_2 газа не наблюдается при $160.962 \pm 0.002^\circ\text{K}$ и газа не наблюдается при 230°K (измеренные экспериментально) ^{Величина} не использованы для определения абсолютной энтропии CO_2 в газообразном состоянии при давлении 1 атм. при температуре 230°K и давлении 1 атм. равной 62.12 ± 0.15 кал/моль. Это значение энтропии было использовано для определения значения низкой

C₃O₂

McDonnell L.A. 1964

$D = 61.6 \pm 2.6 \text{ cm}^{-1}$

газот деформационного колебания, т.е.
сравнение жидкостно-механической наблюдательной
эрозии с жидкостно-механической
механизмом деформационного колебания
на основании акустических исследований
механических свойств газа для всех газот
кроме газот деформационного колеба
ния. Разница между жидкостно-механи-
ческими значениями S и расчет-
ными "can be removed" в случае, если
наибольшая частота газот деформационного
колебания имеет значение $61,6 \pm 2,6 \text{ см}^{-1}$

C_3O_2

P_2

monomer P_2
 P_2 monomer
70 cm^{-1}

C.A. 1964.60.8
8785f

AC 913-IV

1964

The infrared spectrum of carbon suboxide. Foil A. Miller and W. G. Fateley (Mellon Inst., Pittsburgh, Pa.). *Spectrochim. Acta* 20(3), 253-66(1964)(in English). The infrared spectrum of gaseous and solid C_3O_2 was examd. from 70 to 4000 cm^{-1} . Because impurity bands were a problem in the past, strenuous efforts were made to obtain an authentic spectrum. Samples were prepd. by 3 different methods: (1) by dehydration of malonic acid with P_2O_5 , (2) by dehydration of malonic acid- d_4 with P_2O_5 , and (3) by pyrolysis of diacetyl tartaric anhydride. All three gave samples with quant. identical infrared spectra. In addn., only traces of impurities were found by gas chromatography. The spectrum reported here is, therefore, surely that of pure C_3O_2 . The range 70-400 cm^{-1} was examd. with very thick gas and solid samples in an effort to locate the lowest fundamental. It was not observed, and is surely outside this region. The spectrum of the gas from 400 to 4000 cm^{-1} was examd. with a resolution of 0.5-1 cm^{-1} . Six of the seven fundamentals for the linear form are known with certainty, and the seventh is believed to be below 70 cm^{-1} . Nonetheless, there are many features of the spectrum which are still unexplained, and the analysis is far from satisfactory.

RCSQ

			Long	Ex	Miller Table
1. C=O cm	δ_g^+	R(p) -	2200	2190	2200
2. C=C cm			832	828	830
3. C=O asym	δ_u^+	- J R(II)	2258	2258	2258
4. C=C asym			1575	1570	1573
bend	δ_g	R(dp), -	578	577	577
bend			549	635*	550
bend	δ_u	- J R(I)	(198)	551	?

→) the groups in chemistry CO2

C_3O_2

спектр ИК.

М 913-IV

1964

13 Б186. Инфракрасный спектр поглощения недоокиси углерода. Miller Foil A., Fateley W. G. The infrared spectrum of carbon suboxide. «Spectrochim. acta», 1964, 20, № 3, 253—266 (англ.)

Исследован ИК-спектр C_3O_2 в газ. и кристаллич. состоянии в области $70—400\text{ см}^{-1}$ с разрешением $0,5—1\text{ см}^{-1}$. Спектр кристаллич. C_3O_2 исследовался при осаждении на охлажд. подложку при 100°K , а также в аргоновой матрице (500:1) при 4°K . Образцы C_3O_2 готовились тремя методами: а) дегидратацией малоновой к-ты с P_2O_5 ; б) гидратацией тетрадейтеромалоновой к-ты с P_2O_5 ; в) пиролизом ангидрида диацетилвинной к-ты. Спектры всех образцов количественно идентичны. Только следы примесей обнаружены методом ГХ. Частота

ж. 1966. 13

636 см^{-1} , относимая ранее к основному колебанию, не проявляется в спектре при низких t -рах и отнесена к разностному тону. В результате анализа спектра однозначно определено 6 основных колебаний C_3O_2 . Предполагается, что седьмое колебание имеет частоту ниже 70 см^{-1} . В ИК-спектре газ. C_3O_2 имеется 5 полос с тонкой структурой; эти полосы не обнаруживаются в тв. состоянии. Обсуждается возможность отнесения этих полос к основным колебаниям линейной C_3O_2 , находящейся в равновесии с более стабильной транс- C_3O_2 . Я. Кимельфельд

C₃O₂

(4)

5 Д287. ИК-спектр субоксида углерода. Miller Foil A., Fateley W. G. The infrared spectrum of carbon suboxide. «Spectrochim. acta», 1964, 20, № 3, 253—266 (англ.)

Исследован ИК-спектр газообразного и твердого C₃O₂. (I) в области 70—4000 см⁻¹. Образцы готовились тремя различными методами и во всех случаях спектры оказывались почти идентичными, что свидетельствует об отсутствии влияния каких-либо примесей на вид спектров. В области 400—4000 см⁻¹ спектры измерены с разрешением 0,5—1 см⁻¹ и обнаружены 6 из 7 основных частот; одна низшая частота не найдена в интервале 70—400 см⁻¹ и, вероятно, находится ниже 70 см⁻¹ (возможные значения: 25 или 63 см⁻¹). Найденные значения других основных частот и комбинаций, а также интерпретация полученных результатов на основе модели O=C=C=C=O с симметрией D_{∞h} носят предварительный характер и содержат ряд противоречий, которым еще не найдено удовлетворительного объяснения.

В. Никитин

1964

М-913-IV

ф. 1966. 58

C₃O₂

сцеп,
силовое
покрытие,
г. орунны

BQP - 9791 - IV

1964

Mean amplitudes of vibration and thermodynamic functions of carbon suboxide. G. Nagarajan (Oklahoma State Univ., Stillwater). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 2(6), 179-84(1964). A comprehensive crit. study of the results of earlier investigations on the vibrational spectra as well as mol. structure of C₃O₂, possessing a linear sym. structure with the point group $D_{\infty h}$, was made by employing the vibrational and mol. structural data for the mol. newly reported. The force consts. were also calcd. from the secular equations constructed following Wilson's method. The computed values of the mean amplitudes of vibration have been compared with those obtained from the electron diffraction studies and those available in the literature. The mol. thermodynamic functions at a no. of temps. in the range 100-2000°K. have also been calcd. on the basis of a rigid rotator, harmonic oscillator approxn. G. F. Goethel

ABF-56-11-11

2ms

C.A. 1964.61.11

12.784

ⓧ

C_3O_2

(м. ф.)

ВФ-11-45-11

16 Д100. Средние квадратичные амплитуды колебаний и термодинамические функции закиси углерода. Nagarajan G. Mean amplitudes of vibration & thermodynamic functions of carbon suboxide. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1964, 2, № 6, 179—184 (англ.)

Решена задача о норм. колебаниях молекулы C_3O_2 . Молекула считалась линейной с симметрией $D_{\infty h}$. Найдена матрица силовых постоянных в координатах симметрии и определены 10 силовых постоянных в естественных колебательных координатах. Дано отнесение частот по типам симметрии. Вычислены элементы матрицы средних квадратичных амплитуд колебаний в координатах симметрии и определены величины средних квадратичных амплитуд колебаний в естественных координатах для двух т-р 0 и 298° К. Средние квадратичные амплитуды колебаний связей $C=C$ и $C=O$ при $T=298^\circ K$ сопоставлены с эксперим. данными по дифракции электронов. Согласно удовлетворительное. В приближении гармонич. осциллятора и жесткого ротатора проведен расчет термодинамич. ф-ций при 23 значениях т-ры в интервале 100—2000 К. В. Березин

1964

ВФ-97-91-11

р. 1965. 62

W-9825-

1964

C_3O_2

Pitzer K. S., Strickler S. J. 2

C_3

J. Chem. Phys., 1964, 41, 730 (W. 2)

используе-

Атомов в канбазевоных сис-
тем назовенных

расши-

раств

и измерении $V_f = 50 \text{ cm}^3$ для C_3O_2

и измерении 70 cm^3 для C_3 сс.

используе

1964

C₃O₂ (P)

сироб. ное.

= C = quacy.

N₂

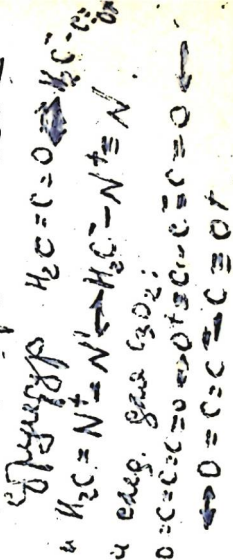
' Abnormalities in vibrational potential constants. Kenneth S. Pitzer and S. J. Strickler (Rice Univ., Houston, Texas). J. Chem. Phys. 41(3), 730-2(1964). A summary is presented of potential consts. for =C= valence-angle bending in a no. of linear or quasilinear mols. These consts. can vary over a wide range, with certain mols. having abnormally low values. One such low value in C₃O₂ helps to explain the infrared spectrum of that mol. A very low value in C₃, obtained from spectroscopic measurements, conflicts with thermodynamic data. RCJO

C. A. 1964 C₃ N₂ 64/124

ноч, 1012

C ₃	0,035	C=C=C
CO ₂	7,7	O=C=O
NO ₂	6,6	O=N=N
C ₃ O ₂	6,6	O=C=C
H ₂ CO	3,1	C=C=C
H ₂ CCO	1,86	H ₂ =C=C
H ₂ CNN	5,7	C=C=O
H ₂ CCR ₂	0,27	H ₂ =C=N
H ₂ CTCH ₂	5,3	C=N=N
H ₂ CTCH ₂	2,3	H ₂ =C=C

Кислород газовой
жидкости и газовой
жидкости и газовой
жидкости и газовой
жидкости и газовой



1965

Entropy and related thermodynamic properties of carbon suboxide. Lee A. McDougall and John E. Kilpatrick (Rice Univ., Houston, Tex.). *J. Chem. Phys.* 42(7), 2311-21(1965)(Eng).

The heat capacity, the temp. of fusion ($160.962^{\circ} \pm 0.002^{\circ}\text{K.}$), the heat of fusion ($1290.9 \pm 0.4 \text{ cal./mole}$), the vapor pressure, the heat of vaporization, and the entropy of the ideal gas at 1 atm., 230°K. ($62.12 \pm 0.15 \text{ cal./degree mole}$) were detd. for C suboxide. The known structure and the 6 known fundamental vibrations lead to a calcd. entropy of $54.33 \text{ cal./degree mole}$, exclusive of the unknown 7th fundamental. The unobserved, doubly degenerate bending mode must have a frequency of $\sim 61.6 \pm 2.6 \text{ cm.}^{-1}$.

RCJQ

C.A. 1965.62.11

12515e-15516a

C₃O₂

44-869-IV

1965

$\nu = 63 \pm 2$

C₂(CN)₂
~~110~~

C₂(CH₃)₂
 $\nu = 194$

Observation of the lowest bending frequencies of carbon suboxide, dicyanoacetylene, diacetylene, and dimethylacetylene. Foil A. Miller, Donald H. Lemmon, and R. E. Witkowski (Mellon Inst., Pittsburgh, Pa.). *Spectrochim. Acta* 21(10), 1709-16(1965)(Eng). Frequencies of the lowest bending modes of 3 long linear mols. were observed in the far-ir spectrum for the 1st time. For C suboxide that band is at $63 \pm 2 \text{ cm.}^{-1}$, and is very weak. A rationalization for its amazing lowness and weakness is offered. For dicyanoacetylene the band is at 107 and strong, for diacetylene at 221.5 cm.^{-1} and strong. For dimethylacetylene (194 cm.^{-1} , strong) some of the features recently reported by Kopelman (CA 61, 10191a) could not be duplicated.

RCSQ

+2 lines

C.A. 1965. 63.12
15730 gh

☒

C_3O_2

IV - M - 1666 - 87

1966

6 Д233. Спектр недоокиси углерода в вакуумной
УФ-области. Bell S., Varadaraian T. S.
Walsh A. D., Warsop P. A., Lee J., Sutcliffe L.
Spectrum of carbon suboxide in the ultraviolet. «J. Molec.
Spectrosc.», 1966, 21, № 1, 42—47 (англ.)

Изучен спектр поглощения недоокиси углерода C_3O_2 в
области 1200—3400 Å. Проанализирована система полос
при 1780 Å, состоящая из девяти широких полос с интер-
валами $\sim 385\text{ см}^{-1}$. Из рассмотрения электронной струк-
туры молекулы C_3O_2 , а также данных по ее ИК-спектру
поглощения сделан вывод, что молекула недоокиси угле-
рода в основном состоянии линейна. Библ. 15.

С. Бурейко

м. и.

07. 1967. 62

C₃O₂

IV - 11-1666-BF

1966

(manip)

Spectrum of carbon suboxide in the ultraviolet. S. Bell, T. S. Varadarajan, A. D. Walsh, P. A. Warsop (Queen's Coll., Dundee, Scot.), J. Lee, and L. Sutcliffe. *J. Mol. Spectry.* 21(1), 42-7(1966)(Eng). Studies have been made of the absorption spectrum of C₃O₂ in the near and far uv regions. The interpretation of a band system around 1780 Å. is discussed particularly, in the light of comments on the ir spectrum and the electronic structure of the C₃O₂ mol. RCKP

C. A. 1966. 65. 12

17913 h - 17914a

1966

 C_3O_2

и.ф.

I Д526. Импульсный фотолиз недоокиси углерода.
Deyillers Claude. Photolyse-éclair du sous-oxyde de
carbone. «C. r. Acad. sci.», 1966, C262, № 21, 1485—1488
(франц.)

При импульсном фотолизе C_3O_2 обнаружены полосы переходного поглощения C_3 и двух неидентифицированных соединений, одно из которых, по-видимому, является первичным, а другое — вторичным продуктом фотолиза, причем оно не образуется из первого. Показано, что кинетич. поведение первичного продукта идентично поведению соединения, образующегося в ходе фотолиза C_3O_2 при 3000 Å.

сп. 1967. 12

1966

С₃О₂
и др.
фотолит

2 Б722. Импульсный фотолиз недоокиси углерода. Devillers Claude. Photolyse-éclair du sous-oxyde de carbone. «С. т. Acad. sci.», 1966, С262, № 21, 1485—1488 (франц.)

При импульсивном фотолизе С₃О₂ обнаружены полосы поглощения С₃ и 2 неидентифицированных соединений, одно из к-рых, по-видимому, является первичным, а другое — вторичным продуктом фотолиза, причем оно не образуется из первого. Показано, что кинетич. поведение первичного продукта идентично поведению соединения, образующегося в ходе фотолиза С₃О₂ при 3000 А.
По резюме автора

X. 1967.2

C₃O₂ (J)

[BCP - M1069 - IV]

1966

mess
nowhere.
6 byes.

Vacuum-ultraviolet absorption spectrum of carbon suboxide. Hongsuk H. Kim and John L. Roebber (Northeastern Univ., Boston, Mass.). *J. Chem. Phys.* 44(4), 1709-10(1966)(Eng). The absorption coeffs. of C₃O₂ were measured in the spectral range 1100-2000 Å. A broad absorption band with a max. at 1580 Å. is the most prominent feature; it is ascribed to an allowable $V \leftarrow N$ transition. The weaker 1780-Å. band has vibrational structure. The assignments of the bands are discussed. An ionization potential of 10.60 ± 0.03 eV. was deduced. The results are discussed in relation to the photochem. decompn. of C₃O₂.

Graham S. Pearson

C.A. 1966. 64. 11
15191 f

1966

2 Б723. Фотохимическое получение C_3O_2 из CO.
Liuti G., Dondes S., Harleck P. Photochemical
production of C_3O_2 from CO. «J. Chem. Phys.», 1966, 44,
№ 10, 4051—4052 (англ.)

При фотосенсибилизированном ртутью $Hg(6^1P_1)$ раз-
ложении (λ 1849А) или прямом фотолизе (йодная лам-
па, $\lambda=2062А$) CO образуются CO_2 и C_3O_2 (газ: или
в форме полимера). Высказано предположение, что
указанные продукты получают с участием колебатель-
но-возбужденных молекул CO^* в $A^3\Pi$ -состоянии

(6,06 эв): $Hg^* + CO \rightarrow Hg + CO^*$ или $(CO + h\nu \rightarrow CO^*)$
 $CO^* + CO \rightarrow CO_2 + C$; $C + CO + M \rightarrow CO_2 + M$; $CO + C_2O + M \rightarrow$
 $\rightarrow C_3O_2 + M$; $C_3O_2 \rightarrow$ полимер.

А. Шведчиков

фотолиз

X. 1967. 2

C₃O₂

139 - 947M - IV

1966

10 Д135. Электронная конфигурация, молекулярная поляризуемость и абсолютные интенсивности в спектрах

комбинационного рассеяния C₃O₂ (колебания типа Σ_g^+).
Nagaran G. Electronic configuration, molecular polarizability and absolute Raman intensities of Σ_g^+ modes of carbon suboxide. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1966, 4, № 3, 97—102 (англ.)

Для молекулы C₃O₂ принята линейная модель. Для каждой связи вводится потенц. ф-ция вида

$$V = - \left[A_1 g \delta \left(x - \frac{a}{2} \right) + A_2 g \delta \left(x + \frac{a}{2} \right) \right],$$

в которой δ — дельта-ф-ция, x — координата движения вдоль линии связи, A_1 , A_2 , g — мощности источников для двух атомов 1 и 2 и для атома водорода, a — длина связи. С этой потенц. ф-цией решено уравнение Шрёдингера и найдены волн. ф-ции для связей

Электрон.
Конфигур.

ф. 1966. 102

СС и СО. Из решения следует ф-ла для продольной поляризуемости связи $\alpha_{\parallel} = 4nA_{12}(\langle x^2 \rangle)^2/a_0$, n — порядок связи, A_{12} — средняя квадратичная мощность источников, a_0 — борковский радиус и $\langle x^2 \rangle$ — среднее квадратичное положение электрона связи. Продольная, поперечная и средняя поляризуемости молекулы равны 72,034; 75,934 и $51,954 \cdot 10^{-25}$ см³. Получена также ф-ла для производной поляризуемости по длине связи. Для связей СС и СО они равны 1,999 и $1,712A^2$. Эти значения близки к соответствующим значениям, найденным из интенсивностей в спектре СО₂. Сделан вывод о переносимости значений поляризуемостей и их производных в рядах соединений с одинаковыми связями.

М. Ковнер

C3O2

M. Kang
C. A. 1966. 65.3

B9P-947 M-LV

1966

✓ Electronic configuration, molecular polarizability, and absolute Raman intensities of Σ_g^+ modes of carbon suboxide. G. Nagarajan (Univ. of Maryland, College Park). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 4(3), 97-102(1966)(Eng). The electronic configuration for the ground state of C₃O₂ possessing a linear sym. structure is given on the basis of the Lewis Langmuir octet rule as modified by Linnett (CA 55, 24218b). Bond polarizabilities, mol. polarizability, and polarizability derivs. corresponding to abs. Raman intensities of totally sym. C:O and C:C stretching vibrations in the ground electronic state were calcd. by the Lippincott-Stutman method by employing the δ -function model of chem. binding. The parallel component of the C:O bond can be transferred readily from C₃O₂ to similar systems having carbonyl groups with 2 pairs of electrons, $2p_y^2$ and $2p_z^2$, on the O atom. Polarizability derivs. can be transferred from 1 mol. system to another having similar chem. bonds with nearly equal internuclear distances. The electrophilic addn. reactions of acetylenic systems are compared to those of the ethylene system.
Margarete Lindsley

C. A. 1966. 65.3
3201 f9

C₃O₂

1966

Infrared and Raman spectra of carbon suboxide in condensed phases. Wm. Hayden Smith and George E. Leroi (Princeton Univ., Princeton, N.J.). *J. Chem. Phys.* 45(5), 1767-77(1966) (Eng). Ir and Raman spectra of liquid, cryst., and matrix-isolated C₃O₂ have been obtained in the region 20-4000 cm⁻¹. A previously unreported solid-solid transition has been observed at 115 ± 5°K., and possible structures for both cryst. phases have been inferred from the spectroscopic results. The π_u central-C bending mode ν_7 has been identified in the liquid phase at 72 ± 2 cm.⁻¹. The problem of disappearing sum bands is discussed, and a revised vibrational assignment and force-const. analysis for C₃O₂ is presented. RCJQ

C.A. 1966. 65. 9

13038 de

2 Д222. Спектры комбинационного рассеяния и ИК-спектры C_3O_2 в конденсированной фазе. Smith Wm. Hayden, Leroi George E. Infrared and Raman spectra of carbon suboxide in condensed phases. «J. Chem. Phys.», 1966, 45, № 5, 1767—1777 (англ.)

Исследованы спектры комб. рас. и ИК-спектры ($4000-20\text{ см}^{-1}$) жидкого и кристаллич. C_3O_2 в интервале т-р $10-250^\circ\text{K}$, а также в матрице Ag. В области $115\pm 5^\circ\text{K}$ описаны не наблюдавшиеся ранее фазовые переходы, и на основе ИК-спектров предложены структуры для обеих твердых фаз. Приведены таблицы частот и дано отнесение полос к внутренним и внешним колебаниям в кристаллах. Обсуждается строение элементарных ячеек низко- и высокотемпературных кристаллич. модификаций. К ножничному колебанию ν_7 центрального С-атома отнесена полоса 72 см^{-1} . Рассмотрен анализ колебательного спектра C_3O_2 и получена система силовых постоянных. Библи. 25 назв.

Э Броун

C_3O_2
energy
(mapure)

W.H. Smith,
G. E. Leroi, (1966, 45p.) 1966
(TR-2; AD-634999); Cesti:
HC \$2,00 / MF \$0,5

Infrared and raman
spectre of carbon
suboxide in condensed
phases.

W66-29672

C_3O_2

Smith Wm. H.,
Herol G. B.

1966

спектр

J. Chem. Phys., 45, n 5, 1778.

Спектр комбинационного
рассеяния и ИК-спектр

C_3S_2 .

(см. C_3S_2)

1966

C₃O₂

Cleaning

5823e Mean amplitudes of vibration, shrinkage effects, and Coriolis coupling coefficients of carbon suboxide. Venkateswarlu, K.; Mariam, S.; Sarma, Y. Anantarama (Kerala Univ., Alwaye, India). *Acta Phys. Pol.* 1966, 30(6), 913-19 (Eng). A review of previous ir, Raman, and diffraction measurements indicates that the C₃O₂ mol. has a linear structure belonging to the point group $D_{\infty h}$. The parallel and perpendicular mean-sq. amplitudes of vibration about the equil. values of the interat. distances were calcd. The perpendicular amplitudes were used to calc. the "shrinkage effects" for various atom pairs in the C₃O₂ mol.; shrinkages of 0.0073-0.0299 Å. were calcd. Coriolis coupling coeffs. were calcd. by using the C-matrix method.

M. A. Aia

C.A. 1968. 69.2

C_3O_2

8 Д143. Средние амплитуды колебания, эффекты сокращения и постоянные кориолисовой связи в C_3O_2 .
Venkateswarlu K., Mariam S., Sargam Y. Anantarama. Mean amplitudes of vibration, shrinkage effects and Coriolis coupling coefficients of C_3O_2 . «Acta phys. polon.», 1966, 30, № 6, 913—919 (англ.)

1966

молек.

носит.

Теория матриц среднеквадратичных амплитуд колебаний (Morino Y., Kuchitsu K., Shimanouchi T. «J. Chem. Phys.», 1952, 20, 726) применена к молекуле C_3O_2 . Рассчитаны среднее квадратичные значения параллельных и перпендикулярных амплитуд для межатомных расстояний. Значения параллельных амплитуд сравниваются со значениями, полученными методами электронной дифракции. Перпендикулярные амплитуды использовались для вычисления эффектов сокращения. С использованием метода С-матрицы вычислены коэф. кориолисовой связи. Результаты приведены в таблицах. Приводится также таблица параметров молекулы C_3O_2 (взятых из работ различных авторов), которые использовались в расчетах.

В. А. Морозов

оп. 1967. 89

C₃O₂

1966

3 Б706. Фотолиз C₃O₂ при 3000А в присутствии олефинов. Willis Clive, Bayes Kyle D. The photolysis of carbon suboxide at 3000 Å in the presence of olefins. «J. Amer. Chem. Soc.», 1966, 88, № 14, 3203—3208 (англ.).

Исследован фотолиз (Фл) C₃O₂ в газовой фазе монохроматич. светом с λ 3000А в присутствии различных олефинов (Ол): C₂H₄, C₃H₆, *изо*-C₄H₈, *цис*-2-C₄H₈ и *транс*-2-C₄H₈. Предполагается, что при Фл C₃O₂ первичным промежуточным продуктом являются молекулы C₂O, к-рые присоединяются к Ол, давая циклопропилидин или циклопропилидинкетен: C₂O + Ол → I* (1), I* + М → продукты не аллильного типа (2), I* → аллен + изомеры (3), где I* — промежуточный продукт присоединения C₂O к Ол. В присутствии O₂ идет р-ция: C₂O + O₂ → СО + СО₂ (4). С увеличением давл. Ол или инертного газа выход аллена падает. Отношение k_4/k_1 изменяется с 2,2 до 95 в ряду *изо*-C₄H₈ < *транс*-2-C₄H₈ < *цис*-2-C₄H₈ < C₃H₆ < C₂H₄. Обсуждают возможную природу промежуточных продуктов Фл.

А. Шведчиков

X. 1967. 3

1967

 C_3O_2 ν_i

65632t Infrared spectrum of carbon suboxide. Region 1-2.5 microns. Region 2-15 microns. Classification of carbon suboxide vibrational bands. Kuiper, G. P.; Sill, G. T.; Cruikshank, D. P.; Fink, Uwe (Univ. of Arizona, Tucson, Ariz.). NASA Contract. Rep. 1967, NASA-CR-97962, 201-7 (Eng). Avail. CFSTI. From *Sci. Tech. Aerosp. Rep.* 1969, 7(3), 566. Lab. tests of the spectrum of C_3O_2 in the region of 1-15 μ are presented in order to establish the most suitable tests for the presence of this gas on Venus and Mars. An uv test for C_3O_2 in the Venus atm. and the classification of C_3O_2 vibrational bands are also mentioned.

TCSL

C.A. 1969. 71. 14

C_3O_2

энергетич.
уровни;

ИК-спектр

х. 1968. 8

ВД-М-11-2006 1987

8 Б51. Потенциал деформационных колебаний $C-C-C$ и инфракрасный спектр недоокиси углерода. Redington R. L. The $C-C-C$ bending potential and the infrared spectrum of carbon suboxide. «Spectrochim. acta», 1967, A 23, № 6, 1863—1873 (англ.)

На основе теории квазилинейных молекул рассчитаны низлежащие энергетические уровни молекулы C_3O_2 . Показано, что двучленная потенциальная функция $V(\alpha) = V_2\alpha^2 + V_4\alpha^4$ хорошо передает наблюдаемое поглощение, обусловленное деформационными колебаниями $C-C-C$, а также позволяет предсказать тонкую структуру полос. Дано отнесение линий в ИК-спектрах и спектрах КР молекулы C_3O_2 и указаны пути дальнейшего уточнения результатов. Е. М. Шусторович

1967

4 Д130. Деформационный потенциал С—С—С и ИК-спектр C_3O_2 . Redington R. L. The C—C—C bending potential and the infrared spectrum of carbon suboxide. «Spectrochim. acta», 1967, A 23, № 6, 1863—1873 (англ.)

Для расчета низколежащих энергетич. уровней недокси углерода C_3O_2 использована теория квазилинейной молекулы. Энергии уровней вычислены по методу ВКБ. Показано, что потенц. ф-ция для деформационного колебания С—С—С, промежуточная между гармонич. и четырехстепенной, объясняет особенности ИК-спектра C_3O_2 . Вид потенц. ф-ции $V(\alpha) = V_3\alpha^2 + V_4\alpha^4$ подобран в соответствии с наблюдавшейся частотой деформационного колебания ($\nu_7 = 63 \text{ см}^{-1}$ и обертоном 214 см^{-1}). Объяснена обнаруженная тонкая структура полосы, исчезающая при понижении т-ры. Подтверждено, что молекула C_3O_2 линейна в основном и деформирована в возбужденных состояниях. Библ. 17. С. Ф. Б.

C_3O_2

W-39-11-2606

ср. 1968. 4

C3O2

B9-IV-AP-2606

1967

vi

unc. unimp

69031m The C—C—C bending potential and the infrared spectrum of carbon suboxide R. L. Redington (Utah State Univ., Logan). *Spectrochim. Acta, Part A* 23(6), 1863-73(1967) (Eng). The theory of the quasi-linear mol. derived by Thorson and Nakagawa (CA 55: 7950i) is used to calc. the low lying energy levels of C suboxide. A potential function intermediate between harmonic and quartic for the C—C—C bending vibration leads to an explanation of the peculiar ir spectrum. The two-term potential function ($V(\alpha) = V_2\alpha^2 + V_4\alpha^4$) is fitted to the observed absorptions for the C—C—C bending mode and is found to predict "fine structure" bands with the observed spacings. The nature of the ir spectrum is discussed, and an assignment for the fine structure bands is proposed. 16 references.

RCSQ

C.A. 1967. 67. 14

1967

 C_3O_2

4 Д243. Спектр поглощения недоокиси углерода в вакуумной УФ-области. Roebber John L., Lagabee J. C., Huffman R. E. Vacuum-ultraviolet absorption spectrum of carbon suboxide. «J. Chem. Phys.», 1967, 46, № 12, 4594—4600 (англ.)

(7)
Исследован спектр поглощения (600—2000 Å) недоокиси углерода C_3O_2 в смеси с He при парциальном давлении C_3O_2 0,4 мм рт. ст. Изучены ридберговские серии $ns \leftarrow \pi$ в области 1050—1650 Å, сходящиеся к первому ионизационному потенциалу при 10,60 эв. Определены величины квантовых дефектов для различных серий. Диффузная структура трех ридберговских полос предположитель-

оп. 1968. 4

но отнесена к колебательным прогрессиям симметричных вал. частот $C=C$ и $C=O$ (равно как и система 14 полос при 1780 Å), хотя не исключена их принадлежность двум другим ридберговским сериям. Ниже 1000 Å обнаружены 2 сильные диффузные полосы (600 и 870 Å), отождествление которых не произведено. В предположении линейности молекулы C_3O_2 рассчитаны диаграмма энергетич. уровней и схема термов. Библ. 31. С. Ф. Б.

1967

C₃O₂

спектр

λ:

11 Б102. Спектр поглощения недоокиси углерода в вакуумной ультрафиолетовой области. Roebber John L., Larrabee J. C., Huffman R. E. Vacuum-ultraviolet absorption spectrum of carbon suboxide. «J. Chem. Phys.», 1967, 46, № 12, 4594—4600 (англ.)

Спектр C₃O₂ исследован в области 2300—600 А с применением источника непрерывного фона. Приведен обстоятельный обзор ранее выполненных исследований и подробное описание методики и техники эксперимента. Для области 2000—1050 А измерены коэф. поглощения. В области 1650—1050 А обнаружена ns←π-серия Ридберга $\nu = 85\,500 - R/(n-a)^2$; $a=1,00$; $n=3-10$. Она сходится к первому потенциалу ионизации 10,60 эв. Полосы 1370, 1272 и 1234 А имеют диффузную, вероят-

X. 1968. 11

но колебательную, структуру с коротковолновой стороны, которую можно объяснить частотами вал. кол. ν_1' ($C=O$) и ν_2' ($C=C$) $\sim 2120-2200$ и 700 см^{-1} верхнего состояния, хотя не исключено, что проявляются еще две серии Ридберга с $a=0,76; 0,96$ и $n=3,7; 4-5$. В области ниже 1000 А , которая исследована впервые, найдены две широкие, диффузные, очень сильные полосы при 870 и 660 А . Они пока не отнесены. Детально исследована и обсуждена структура полосы 1780 А , в которой обнаружено 14 колебательных максимумов. Вполне определенного отнесения седлать пока невозможно. Предполагается, что характер поглощения может быть объяснен как прогрессия за счет деф. кол. с частотой 400 см^{-1} .

Э. Морозов

1947

C302

37910f Vacuum-ultraviolet absorption spectrum of carbon suboxide. John L. Roebber, J. C. Larrabee, and R. E. Huffman (Northeastern Univ., Boston, Mass.). *J. Chem. Phys.* 46(12) 4594-600(1967)(Eng). Absorption coeffs. of C suboxide were measured from 2000 to 1050 Å. photoelec. and the absorption spectrum was photographed from 1000 to 600 Å. The background light sources were the H₂, He, and Ar continua. The region 1650-1050 Å. is dominated by a $ns \leftarrow \pi$ Rydberg series converging to the 1st ionization potential at 10.60 eV. Diffuse structure on the short-wavelength side of 3 of the Rydberg bands is probably caused by vibrational progressions in the C:C and C:O symmetric stretching frequencies but may be due to 2 other

J.M.

C.A. 1947. 17.8

fragmentary Rydberg series. Several very strong diffuse bands are present below 1000 Å. which have not yet been assigned. A system of 14 bands around 1780 Å. may be a vibrational progression in a 400 cm.^{-1} bending mode or a vibrational sequence. Neither the exptl. evidence nor theoretical considerations allow a definite assignment to be made. However, the gradual emergence of the vibrational structure from the underlying continuum strongly supports the progression explanation. RCJQ

ВЗР - М - 102 - 15

1968

C₃O₂

структура

Электронно-
графич

7 Д148. Влияние изменения температуры на амплитуды колебаний и эффекты сокращения в субоксиде углерода. Изучение методом дифракции электронов в газе. Almenningen A., Arnesen S. P., Bastiansen O., Seip H. M., Seip R. The effect of temperature variation on the amplitudes of vibration and shrinkage effects in carbon suboxide studied by gas electron diffraction. «Chem. Phys. Letters», 1968, 1, № 12, 569—574 (англ.)

Исследована дифракция электронов в газообразном C₃O₂ при т-рах 237 и 508° K. По кривым радиального распределения интенсивности определены равновесные значения длин связей, расстояний между несвязанными атомами и средние квадратичные амплитуды колебаний этих величин. Они обнаруживают сильную зависимость

ф. 1968. 72

от т-ры. При указанных т-рах и при 290°K вычислены эффекты сокращения расстояний между всеми парами несвязанных атомов. Для теоретич. расчета кривой распределения интенсивности составлена потенц. ф-ция вида $V(\alpha) = V_2\alpha^2 + V_4\alpha^4$, в которой $2\alpha = \pi - \angle C = C = C$. Значения V_2 , V_4 определялись по методу наименьших квадратов, причем различным значениям V_2 , V_4 соответствуют различные значения угла α , при котором потенц. энергия минимальна. Значения равновесного угла α находятся в пределах $0-16^{\circ}$. Обсуждается возможность определения колебательной т-ры для деформационного колебания.

М. А. Ковнер

C_3O_2

м.п.

Л. 1968. 17

103
1111-1111-1111

1968
/ 17 Б208. Расчет влияния изменений температуры на средние амплитуды колебаний и эффекта сокращения в недокиси углерода из спектроскопических значений. Brunvoll J., Cyvin S. J., Elvebredd I., Hagen G. Effect of temperature variation on mean amplitudes of Vibration and shrinkage effects in carbon suboxide calculated from spectroscopic data. «Chem. Phys. Letters», 1968, 1, № 12, 566 (англ.)

В сравнении со значениями, полученными методом электронной дифракции, из спектроскопич. данных рассчитано влияние изменения т-ры (0—1000° К) на колебания и геометрию молекулы недокиси углерода C_3O_2 . По известным ИК-спектрам поглощения и силовым константам состояний Σ_g^+ и Σ_u^+ вычислены средние амплитуды колебаний связей $C=O$, $C=C$, $C \dots O$, $C \dots C$ и $O \dots O$. По величинам частот и силовых постоянных в состояниях Π_g и Π_u оценено влияние эффекта сокращения при симметричном колебании.

С. Ф. Б.

1968

B7D-XIV-613

C3O2Cpegene
Armed
Kobasaka

108094b Effect of temperature variation on mean amplitudes of vibration and shrinkage effects in carbon suboxide calculated from spectroscopic data. J. Brunvoll, S. J. Cyvin, I. Elvebredd, and G. Hagen (Tech. Univ. Norway, Trondheim, Norway). *Chem. Phys. Lett.* 1(12), 566(1968)(Eng). Mean amplitudes of vibration and shrinkage effects were calcd. for 10 vibrations in C_3O_2 at 12 temps., 0-1000°. Results are tabulated. FBJN

C.A. - 1968. 68. 24

C3O2

Омтмен из в канке Simmons 1969

Braun W. Bass A. M.
Davis D. D., Simmons J. D.

и и нулевей.
грозом

Proc. Roy. Soc. A, 1969

312, 417-34.

1969

 C_3O_2

1 Б19. Электронная структура недоокиси углерода.
 Olsen John F., Burnelle Louis. The electronic
 structure of carbon suboxide. «J. Phys. Chem.», 1969, 73,
 № 7, 2298—2304 (англ.) (Ш.м.р. г.м.р.)

Расширенным методом Хюккеля и методом полного пренебрежения дифференц. перекрыванием (ППДП) вычислены полная и орбитальные ϵ_i энергии, атомн. заряды и порядки связей молекулы C_3O_2 . Расчет выполнен для линейной конфигурации и для ряда изогнутых конфигураций вплоть до значения угла $CCC=90^\circ$. Показано, что метод ППДП дает сравнительно правильное распределение электронного заряда в C_3O_2 . Согласно этому ме-

кв. см.
 расчет;
 электрон.
 структура

X. 1970. 1

тоту центральный атом углерода обладает большим отрицательным зарядом, а порядки связей $C=C$ значительно ниже порядка этиленовой $C=C$ —связи. Эти результаты подтверждаются малой величиной частоты ν деф. кол. угла $\angle CCC$ (63 см^{-1}). Анализ зависимости ϵ_i низколежащих орбиталей по Хюккелю от угла $\angle CCC$ также приводит к низкой величине ν . Результаты расчета по обоим методам согласуются с эксперим. данными по масс-спектру, УФ-спектру поглощения и по фотолизу C_3O_2 .

М. Р. Алиев

53744t Electronic structure of carbon suboxide. Olsen,
John F.; Burnelle, Louis (New York Univ., New York, N.Y.).
J. Phys. Chem. 1969, 73(7), 2298-304 (Eng). The CNDO/2
(CNDO/2 is complete neglect of differential overlap, new version)
and the extended Hueckel M.O. (XHMO) methods have been
applied to linear and bent configurations of C_3O_2 . The CNDO/2
method was found to give a satisfactory description of the elec-
tronic charge distribution in the mol. It indicates the presence
of a large neg. charge on the central C atom, with a corresponding
redn. in the CC π -bond population. These features provide an
explanation for the low frequency of the bending vibration about
the central C atom. The expressions obtained for the highest
occupied and lowest unoccupied mol. orbitals are found to ex-
plain the dissocns. which C_3O_2 undergoes in the mass spectrum
and in photochem. reactions. The variation of the XHMO
orbital energies with the apex angle also provides some insight
into the low resistance to bending in this mol., and the resulting
orbital energy diagram can be utilized to make predictions con-
cerning the structure of the ions and of some low-lying excited
states of the mol. The CNDO/2 orbital energies appear not to
lend themselves to such a discussion. RCKG

C. A. 1969. H. 12

C_3O_2

Pickett H. M.,
Strauss M. Z.

1969

вращающ.
колеб. с
вращением

J. Chem. Phys., 1969,
51, ⁴ 3, 952.

● (см. C_3O_2) I

C_3O_2

ВФР-560-XIV

1969

3 Б54. Молекулярные постоянные C_3X_2 ($X=O, S$) и C_4H_4 . Ramaswamy K., Srinivasan K. Molecular constants of C_3X_2 ($X=O, S$) and C_4H_4 molecules. «J. Molec. Struct.», 1969, 3, № 6, 473—481 (англ.)

Произведен расчет силовых коэф. линейных ($D_{\infty h}$), молекул C_3O_2 (I) и C_3S_2 (II) и молекулы бутатриена (III) (точечная группа симметрии D_{2h}) в приближении общего валентно-силового поля на основании литературных данных по геометрии и частотам колебаний. Вычисленные силовые коэф. растяжения связей и их взаимодействия для I и II значительно выше определенных ранее (РЖХим, 1967, 7Б125 и 7Б126). Этот факт авторы связывают с большой π -делокализацией для I и II. Вычислены величины двух среднеквадратич. амплитуд колебаний

X-1970. 3

+2

17

μ (C—X) и μ C—C) I и II при 298, 16° К. Для I μ (C—X) и μ (C—C) удовлетворительно согласуются с данными предшествующего расчета (РЖХим, 1968, 17Б208). Для III предсказана не наблюдавшаяся экспериментально частота кол. $\nu_B = 382 \text{ см}^{-1}$ и рассчитаны значения трех среднеквадратич. амплитуд колебаний μ (C—H), μ (C₁—C₂), μ (C₂—C₃), согласующиеся с электроннографич. данными (РЖХим, 1963, 4Б44). Вычислены постоянные центробежного растяжения III: $D_h = 1,64$ (или 1,02) $D_j = 1,65$, $D_{jh} = -3,30$, $R_5 = 0,43$, $R_6 = -0,04$ и $\delta_j = 0,87 \text{ Мгц}$. Определены также значения 12 постоянных кориолисова взаимодействия S^x_{ij} для III. А. Александров

C₃O₂

mod. no. 1.

chem. no. 1.

C.A. 1969. 71. 12

Bcp-560-XIV

1969

53746v Molecular constants of C₃X₂ (X = O, S) and C₄H₄ molecules. Ramaswamy, Krishnamachari; Srinivasan, K. (Annamalai Univ., Annamalai Nagar, India). *J. Mol. Struct.* 1969, 3(6), 473-81 (Eng). The potential energy consts. and mean amplitudes of vibration for C₃O₂ and C₃S₂ and the mol. consts. of C₄H₄ have been evaluated by using the method of "characteristic set of valence coordinates." The conventional set of symmetry coordinates lead to abnormally large values for the consts. Hence a different set of symmetry coordinates was chosen which gives a reliable set of force consts. The 2nd set of symmetry coordinates provides better agreement with the exptl. data for both mean amplitudes and rotational distortion consts. of butatriene. The various large values for the C₃X₂ mols. were attributed to the high degree of delocalization in these systems.

RCBF

C_3O_2

12 Д150. Молекулярные постоянные молекул C_3X_2 ($X=O, S$) и C_4H_4 . Ramaswamy K., Srinivasan K. Molecular constants of C_3X_2 ($X=O, S$) and C_4H_4 molecules. «J. Molec. Struct.», 1969, 3, № 6, 473—481 (англ.)

Приближенным методом характеристик. набора валентных координат вычислены силовые коэф., формы колебаний, распределение потенц. энергии колебаний по внутренним координатам и среднеквадратичные амплитуды колебаний (l) молекул C_3O_2 , C_3S_2 , C_4H_4 и постоянные центробежного искажения и кориолисового взаимодействия молекулы C_4H_4 . Расчет выполнен с различными координатами симметрии. Для некоторых недиагональных силовых коэф. получены аномально высокие значения. Результаты расчета l для C_4H_4 за исключением $l(C_2=C_3)$ согласуются с электронографич. данными, а для $l(C_2=C_3)$ получено значение $0,0615 \text{ \AA}$, тогда как эксперим. значение равно $0,039 \pm 0,005 \text{ \AA}$. М. Р. Алиев

Ссыл. и.

1969

Вр-560-111

99.1989. 129

(+2)

[X]

C_3O_2

Вр - 2202-XIV

1969

Ср. ампл.
колеб.

№ 11 Д166. Средние амплитуды колебаний несвязанных пар (O...O) и (S...S) в молекулах C_3O_2 и C_3S_2 . Smith Wm. Hayden. Mean vibrational amplitudes of the (O...O) and (S...S) distances for carbon suboxide and carbon subsulfide. «Chem. Phys. Letters», 1969, 3, № 6, 430—432 (англ.)

Вычислены средние амплитуды колебаний молекулы C_3O_2 в гармонич. приближении с учетом всех внутренних координат при т-рах 240°, 300°, и 500° К. Отмечено значительное отличие между вычисленными и эксперим. значениями амплитуды $l(O...O)$ несвязанной пары ато-



Ф. 1969. 112



модели $O \cdots O$, которое объясняется неприменимостью гармонического приближения. Предложена модель для вычисления $l(O \cdots O)$, учитывающая дополнительно центробежные смещения вдоль перпендикулярных координат. Вычисленные по этой модели значения $l(O \cdots O) = 0,0765, 0,0890$ и $0,1117$ Å согласуются с эксперим. значениями $l(O \cdots O) = 0,0779, 0,0909$ и $0,1286$ Å для т-р $240^\circ, 300^\circ$ и 500° К соответственно. Аналогичный расчет выполнен также для молекулы C_3S_2 и показано, что центробежные эффекты и в данном случае дают существенный вклад в значение $l(S \cdots S)$.

М. Р. Алиев

ВФ-2202-XIV 1969

C₃O₂

Среднеквадр.
амплит.
колебаний

1 Б49. Среднеквадратичные амплитуды колебаний для расстояний (O...O) и (S...S) для недоокси углерода и субсульфида углерода. Smith Wm. Hayden. Mean vibrational amplitudes of the (O...O) and (S...S) distances for carbon suboxide and carbon subsulfide. «Chem. Phys. Letters», 1969, 3, № 6, 430—432 (англ.)

Вычислены среднеквадратич. амплитуды кол. молекулы C₃O₂ (I) при т-рах 240—500° K в гармонич. приближении. Наблюдается большое расхождение (~ в 2 раза) между теоретич. и эксперим. величинами среднеквадратич. амплитуды кол. и для расстояния в (O...O) в I. Обсуждены причины этого расхождения. Аналогичное рассмотрение проведено для C₂S₂. +1 А. Александров

+1

X. 1970.1



C₃O₂

cp. nb. amine.
H₂O₂

C.A. 1969. 71. 14

Bq-2202-XIV

1969

(64314d) Mean vibrational amplitudes of the (O...O) and (S...S) distances for carbon suboxide and carbon subsulfide. Smith, William Hayden (Princeton Univ. Observ., Princeton, N.J.). *Chem. Phys. Lett.* 1969, 3(6), 430-2 (Eng). The observed mean amplitude of vibration for the nonbonded distances of C₃O₂ is not in agreement with the usual harmonic oscillator approxn. calcn. The discrepancy can be understood and approx. calcd. by using a simple model that takes into account the central C bending motion. A similar result is predicted for C₃S₂.
BGJN

1969

 C_3O_2 (газ)

3 Д353. Спектр комбинационного рассеяния газообразного C_3O_2 . Smith William Hayden, Barrett Joseph J. Gas-phase Raman spectra of carbon suboxide. «J. Chem. Phys.», 1969, 51, № 4, 1475—1479 (англ.)

Исследован колебательно-вращательный спектр комб. рас. газообразного C_3O_2 . Измерены относит. интенсивности и степени деполаризации полос и дано отнесение полос в спектре по типам колебаний. Наиболее интенсивная полоса около 127 см^{-1} идентифицирована как колебание $2\nu_7$. На основании анализа этой полосы и других полос с участием колебания ν_7 сделан ряд выводов относительно геометрии молекулы C_3O_2 . Показано, что в предположении о квазилинейном строении молекулы с незначительным барьером по отношению к линейной конфигурации колебательный спектр C_3O_2 как в газообразном, так и в конденсированном состоянии получает удовлетворительное объяснение. Библ. 14. Э. В. Б.

М. И.

строение

09. 1970. 3Д

C₃O₂

расчет

м.и.

61

X. 1971.5

ВФ - 1255 - XIV 1970

5 Б88. Потенциальная функция деформационных колебаний CCC в молекуле C₃O₂. Clark Allan, Seip Hans M. The potential function for the CCC bending in carbon suboxide. «Chem. Phys. Lett.», 1970, 6, № 5, 452—456 (англ.)

В предположении отделимости деформационных колебаний рассчитана потенциальная функция деформационных колебаний C—C—C в молекуле C₃O₂. Энергетич. уровни вычислялись при различных наборах параметров в выражении для потенциала. Предлагается потенциал в виде $V(r) = 2400 r^2 + 14000 / (2,2 + r^2)$, к-рый имеет небольшой максимум $\sim 50 \text{ см}^{-1}$ для $\alpha = 0$ ($2\alpha = 180 - \angle \text{C—C—C}$) и минимум для значения $\alpha = 111^\circ$, что хорошо соответствует эксперим. данным.

С. Долин

C/O
3.2

Вср-1255-XIV 1970

2 Д190. Потенциальная функция деформации угла CCC в C_3O_2 . Clark Allan, Seip Hans M. The potential function for the CCC bending in carbon suboxide. «Chem. Phys. Lett.», 1970, 6, № 5, 452—456 (англ.)

Проанализировано решение уравнения Шрёдингера с потенциалом $V(R) = \frac{kR^2}{2} + \frac{K_B}{c^2 + R^2}$ для деформационного колебания угла CCC в молекуле C_3O_2 без учета взаимодействия этого колебания с остальными. Получены численные значения энергии и волн. ф-ций для ряда низлежащих уровней при различных значениях параметров k , c и K_B . Вычислены частоты и интенсивности полос ν_7 и $2\nu_7$ в ИК-спектрах и спектрах комб. расс. и радиальное распределение интенсивности в спектре

LCCC

потенц. у-н

09. 1971

28

рассеяния электронов. Путём сопоставления результатов расчета с эксперим. данными показано, что все эксперим. данные удовлетворительно описываются потенциалом $V(R) = 2400 R^2 + \frac{14000}{2,2 + R^2} \text{ см}^{-1}$, который имеет максимум с величиной барьера 50 см^{-1} при $\angle \text{CCC} = 180^\circ$ и минимум при $180^\circ < \angle \text{CCC} = 22^\circ$. М. Р. Алиев

C₃O₂

BP-1255-XIV

1970

V_{CCC}

geopopu

6542c Potential function for the CCC bending in carbon suboxide. Clark, Allan; Seip, Hans M. (Dep. Chem., Univ. Manchester Inst. Sci. Technol., Manchester, Engl.). *Chem. Phys. Lett.* 1970, 6(5), 452-6 (Eng). The CCC bending in C₃O₂ has been studied by using results from recent spectroscopic and electron diffraction investigations of the compd. The potential $V(\gamma) = 2400 \gamma^2 + 14,000/(2/2 + \gamma^2)$ (cm⁻¹), which has a small max. of about 50 cm⁻¹ for $\alpha = 0^\circ$ ($2\alpha = 180^\circ - \angle \text{CCC}$) and min. for α of about 11° , seems consistent with most of the available exptl. data. A potential with no barrier for $\alpha = 0^\circ$ is still possible.

Peter Coad

C.A. 1971.74.2

C₃O₂

On. 40716

1970

Mitsutoshi Tanimoto,
Kozo Kuichitsu et al.,

(in) Bull. Chem. Soc. Jap.,
1970, 43, 2776-2785.

Molecular structure and the

Effect of Large - Amplitude
Vibration of Carbon Suboxide
as Studied by Gas Electron
Diffraction.

1970

C₃O₂

diene

chemistry

60505q High-pressure mass spectra and ion chemistry of carbon suboxide. Schilderout, Steven M.; Franklin, J. L. (Dep. of Chem., Rice Univ., Houston, Tex.). *J. Amer. Chem. Soc.* 1970, 92(2), 251-3 (Eng). Subjecting C suboxide, C₃O₂, to electron bombardment in the ion source of a mass spectrometer results in formation of a great variety of pos. ions from ion-neutral reactions at sample pressures up to 0.3 torr. Secondary and higher-order ions identified include C_xO⁺ (x = 3, 4, 5, 6), C_yO₂⁺ (y = 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9), and C_zO₃⁺ (z = 5, 7). From consideration of the pressure dependence of ionic abundances, possible reactions are suggested. Insertion of C atoms from C₃O₂ into reactant ions seems to be an important process. Ion-neutral reactions may provide a path for formation of elemental C, but there is no evidence here that they lead to polymerization of C₃O₂. The rate const. for reaction of C₂O⁺ with C₃O₂ is $(2.1 \pm 0.2) \times 10^{-9}$ cm³/mol.-sec. RCJC

C.A. 1970. 72:12

C_3O_2

ВФ-545-XIV

1970

У 9 Б104. Исследование методом газовой электронографии молекулярной структуры и эффекта колебаний большой амплитуды недоокиси углерода. Tanimoto Mitsutoshi, Kuchitsu Kozo, Morino Yonezo. Molecular structure and the effect of large-amplitude vibration of carbon suboxide as studied by gas electron diffraction. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1970, 43, № 9, 2776—2785 (англ.)

Методом газовой электронографии исследована структура молекулы C_3O_2 (I). Определены длины связей: $r(C=O) = 1,163_2 \pm 0,001_3$ и $r(C=C) = 1,289_4 \pm 0,002_2$ А. Почти во всех случаях несвязанных пар атомов наблюдавшиеся значения средне-квадратичных амплитуд колебаний оказались больше теоретич., что вызвано низким значением частоты деф. кол. ν_7 , значит. вклад в к-рое вносит деф. движение центрального атома С.

А. П. Александров

Мом.
структ.
Di

X. 1971.9

C₃O₂

B9P-545-XIV

1970

(113164g) Molecular structure and the effect of large-amplitude vibration of carbon suboxide as studied by gas electron diffraction. Tanimoto, Mitsutoshi; Kuchitsu, Kozo; Morino, Yonezo (Fac. Sci., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan). *Bull. Chem. Soc. Jap.* 1970, 43(9), 2776-85 (Eng). The mol. structure of carbon suboxide, C₃O₂, has been studied by the sector-microphotometer method of gas electron diffraction. The C=O and C=C distances (r_0) have been detd. as 1.163 and 1.289 Å, resp. The obsd. mean amplitudes for 3 nonbonded atom pairs and their shrinkages are much larger than those expected for ordinary mols. with linear framework. A usual harmonic approxn. up to the quadratic terms of displacements cannot account for the obsd. values in this mol. This indicates that the π_u bending vibration ν_7 has a very low frequency (an effective frequency being

структура
и амплитуда.

C.A. 1970.73.22

about 68 cm^{-1}) and that this vibration is essentially a bending motion of the valence angle of the central C atom, in agreement with recent spectroscopic studies. The effect of the large-amplitude vibration on mean amplitudes and shrinkages has been studied in detail by using a model, which assumes that at. motions take curvilinear paths in the ν_7 vibration with the valley in the potential surface running along the loci of fixed bond lengths. The potential function for this bending motion has been estd. by a least-squares anal. on the obsd. structural parameters. The potential function is given by $V(Q_7) = 23 Q_7^4 - 100 Q_7^2\text{ (cm}^{-1}\text{)}$, where the uncertainties representing random std. errors take the upper and lower signs in the same order and $Q_7 = \sin \alpha / 0.145\text{ (amu}^{1/2}\text{ \AA)}$. The potential rises steeply with increasing angle of bending, $\alpha = 1/2[180^\circ - \angle (\text{C}=\text{C}=\text{C})]$, and appears to have a small hump at $\alpha = 0$. This "quasi-linear" potential function is consistent with the recent exptl. ests. by Seip, *et al.* within exptl. errors, but the double-min. nature of the potential is subject to a further crit. examn. by other exptl. methods. RCQC

1970

C₃O₂

Workman G. L.

Vi

Univ. Rochester, Rochester,
N.Y., 1970, 69. Avail. Univ.
Microfilms, Ann Arbor, Mich.
Order No. 70-17,917.

From Diss. Abstr. Int.,
B, 1970, 31, 4, 1890.

(C.C. COF) W

☒

C_3O_2

Эл.
стр-ие

1971
7 152. Электронное строение молекулы C_3O_2 на основе рентгеноэлектронного спектра и неэмпирического расчета. Bauser H., Pernisz U. Field effect in anthracene crystal. «Chem. Phys. Lett.», 1971, 11, № 2, 213—215 (англ.)

Изучен рентгеноэлектронный спектр молекулы C_3O_2 для газа и тв. тела. Проведен расчет МО этой молекулы методом ССП в гауссовом базисе. На основе расчета и эксперим. относит. интенсивностей получен след. порядок следования валентных уровней: $4\sigma_g$, $3\sigma_u$, $5\sigma_g$, $4\sigma_u$, $6\sigma_g$, $5\sigma_u$, π_u , $1\pi_g$, $2\pi_u$. Спектр твердого образца полностью аналогичен спектру газа, однако расстояние между уровнями $4\sigma_g$, $3\sigma_u$ и $6\sigma_g$, $5\sigma_u$ в тв. теле на 0,5 эв меньше, чем в газе. Для внутренних линий обнаружен большой эффект «стряхивания» электронов. На основе сдвигов внутренних уровней рассчитаны эффективные заряды атомов в молекуле. Для среднего атома углерода получено отрицат. значение заряда.

В. И. Нефедов

X. 1972. 2

C_3O_2

Электр.
стр.-се

9 Б20. Электронное строение недокиси углерода по данным рентгеноэлектронной спектроскопии и неэмпирических расчетов. Gelius U., Allan C. J., Allison D. A., Siegbahn H., Siegbahn K. The electronic structure of carbon suboxide from ESCA and ab initio calculations. «Chem. Phys. Lett.», 1971, 11, № 2, 224—228 (англ.)

Исследованы рентгеноэлектронные спектры (РЭС) газ. и тв. C_3O_2 . Приведены энергии связи (ЭС) остовных и валентных электронов. Орбитальные энергии, рассчитанные неэмпирич. методом ССП МО ЛКАО в базисе объединенных гауссовских функций, сопоставлены с опытными ЭС, на основании чего произведено отнесение орбиталей по типам симметрии. Оцененные по РЭС и вычисленные неэмпирически суммарные заряды на атомах близки друг к другу. Отмечена необычно большая величина отрицат. заряда на центральном атоме С. Подчеркнуто, что положение спектральных полос, относящихся к валентным оболочкам, различно для газовой и тв. фазы. В. Л.

РЖХ, 1972, №9

7761

C_3O_2

1971

4 Б1177. Изучение реакций атомарного углерода $C(2^3P_J)$ методом кинетической спектроскопии поглощения в области вакуумного ультрафиолета. Husain D., Kirsch L. J. Reactions of atomic carbon $C(2^3P_J)$ by kinetic absorption spectroscopy in the vacuum ultra-violet. «Trans. Faraday Soc.», 1971, 67, № 7, 2025—2035 (англ.)

Изучали кинетику исчезновения атомов $C(2^3P_J)$ (I), образованных при импульсном фотолизе C_3O_2 под действием света $\lambda \sim 160$ нм, в присутствии различных газов. За конц-ией I следили по интенсивности поглощения све-

иелл.
фотометр.
X, 1972, 4

та λ 166 нм, создаваемого при переходе $C(3^3P_J^0 \rightarrow 2^3P_J)$
 в зоне СВЧ-разряда в потоке He, содержащего 1% C_2H_2 .
 Определены константы скоростей р-ций при 300° K
 (10^{-11} см³/молекула·сек или 10^{-32} см⁶/молекула·сек).
 $I + NO \rightarrow CN + O$ $7,3 \pm 2,2$; $I + O_2 \rightarrow CO + O$ $3,3 \pm 1,5$; $I + NO_2 \rightarrow$
 $CO + N_2$ (или $CN + NO$) $2,5 \pm 1,6$; $I + H_2O \rightarrow CO + H_2$ (или
 CH_2O) $\leq 3,6 \cdot 10^{-2}$; $I + CO_2 \rightarrow 2CO < 10^{-3}$; $I + CH_4 \rightarrow C_2H_4 <$
 $< 2 \cdot 10^{-4}$; $I + N_2 + M \rightarrow CN_2 + M$ $0,31 \pm 0,15$ ($M = Ar$); $I +$
 $+ H_2 + M \rightarrow CH_2 + M$ $7,1 \pm 2,5$ ($M = He$); $I + CO + M \rightarrow C_2O +$
 $+ M$ $6,3 \pm 2,7$ ($M = He$).

По резюме

C_3O_2

De Kock R. L.;
et al.

1971

(Vi) "J. Amer. Chem. Soc."
1971, 93, N25, 7106-07.

● (cat. C_2O ; III)

C₃O₂

1981

chem. no cm.

55874s Use of the Green function for the vibrational analysis of carbon suboxide. Ramaswamy, K.; Rangarajan, S. (Dep. Phys., Annamalai Univ., Annamalai Nagar, India). *Spectrosc. Mol.* 1971, 20(225), 1-6 (Interlingua). The method of anal. of mol. vibrations by use of Green's function was used in the detn. of potential energy consts., and root-mean-square amplitudes of vibration, for C suboxide. By using rules detd. in this study, values of the fundamental vibrational frequencies were calcd. for several isotopic substitutions. The valence force consts. are detd. The root-mean-square amplitude of vibration at 298.16°K for the C:O bond was 0.03514 Å and that for the C:C bond was 0.03843 Å. -
Forrest F. Cleveland

C.A. 1981. 45 8

C_3O_2

XIV-389

1971

м.н.; в.

11 Д360. Спектр поглощения C_3O_2 в вакуумной УФ-области. II. Влияние низкой температуры и высокого давления инертного газа на полосу 1780 Å. Roebber John L. Vacuum-ultraviolet absorption spectrum of carbon suboxide. II. The effect of low temperature and the effect of high pressure of an inert gas on the 1780-Å band. «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 9, 4001—4013 (англ.)

Изучены спектры поглощения молекулы C_3O_2 в вакуумной УФ-области с разрешением 1 Å при т-рах 298 и 195° K. Варнация т-ры позволила однозначно отнести

Ф. 1971. 11 Д

14 полос перехода $1780 \text{ \AA}$ к прогрессии деф. кол.
 400 см^{-1} возбужденного состояния, в то время как ра-
нее эти полосы приписывались секвенции деф. кол.
 63 см^{-1} основного состояния. Найдено, что в присутст-
вии аргона (100 атм) происходит уширение колебатель-
ной структуры и смещение полосы $1780 \text{ \AA}$ в коротко-
волн. сторону, что свидетельствует о ридберговском ти-
пе перехода. Классифицированы верхние состояния пере-
ходов полос 2650 , 1780 и $1587 \text{ \AA}$. Библ. 49. Ч. I см
РЖФиз, 1968, 4Д243.

В. Александров

C₃O₂

XIV-389

1981

Di,

non.

cr-pa

(132663f) Vacuum-ultraviolet absorption spectrum of carbon suboxide. II. Effect of low temperature and the effect of high pressure of an inert gas on the 1780 Å band. Roebber, John L. (Dep. Chem., Northwestern Univ., Boston, Mass.). *J. Chem. Phys.* 1971, 54(9), 4001-13 (Eng). The gas-phase absorption spectrum of the 1780-Å band of C suboxide was measured photoelec. at both room and dry-ice temps., and in the presence of a high pressure of Ar by using a 1-m vacuum monochromator having a 1.0-Å bandwidth. The addn. of 1500 psi of Ar greatly broadens the vibrational structure and shifts the whole band to higher energies. On cooling from 298 to 195°K, the size of the 14 vibrational bands on the 1780-Å transition remain unchanged relative to each other, but the intensity of the transition is decreased. The constancy in relative size of the vibrational

C.A. 1971. 44. 24

bands at different temps. rules out the possibility that they are a vibrational sequence in the 63-cm^{-1} ground-state π_u bending mode and confirms their assignment as a progression in a 400-cm^{-1} excited-state bending vibration. The decrease in oscillator strength as the temp. is lowered and the regularity of the progression as it passes over the peak of the band imply that the linear-linear vertical transition is forbidden. The effect of the high pressure of Ar on the $1780\text{-\AA}$ band indicates that it is borrowing its intensity from a Rydberg band. The presence of a long progression in a bending mode is strong evidence that the equil. configuration in the excited state is nonlinear. The Herzberg-Teller theory of vibrationally induced electronic transitions and an intermediate neglect of differential overlap-MO calcn. were used to assign the upper states of the 2650- , 1780- , and $1587\text{-\AA}$ bands.

RCJQ

C_3O_2
 C_3S_2

XIV-3898

1972

19 Б114. Отклонение молекулярных пучков недоокиси углерода и тионедоокиси в электрическом поле. Dyke T. R., Klemperer W., Ginsberg A. P., Faisconer W. E. Electric deflection of molecular beams of carbon suboxide and carbon subsulfide. «J. Chem. Phys.», 1972, 56, № 8, 3993—3995 (англ.)

По величине отклонения молек. пучков (МП) C_3O_2 (I) и C_3S_2 (II) в неоднородных электрич. полях доказано линейное строение этих молекул при т-рах 200 и 300 К (I) и 300 К (II). Калибровка аппаратуры осуществлялась по отклонению МП NO_2 (300° К, величина дипольного момента $\mu=0,3D$), потенциалы на 2 квадрупольных линзах менялись от 0 до 25 кв в разных сочетаниях. Максим. отклонение МП I и II показывает, что значения μ I и II не превышают $0,15D$, что соответствует отклонению от линейного расположения атомов в I и II не более, чем на 10° . М. Туркина

молч.

стр-ра

X. 1972. 19

⊕ ⊗

C₃O₂

photoelectron
spectroscopy

C.A 1972 78
v2

1972

9987v High-resolution electron spectrum of carbon suboxide. Rabalais, J. Wayne; Bergmark, Torsten; Werme, L. O.; Karlsson, L.; Hussain, M.; Seigbahn, Kai (Inst. Phys., Univ. Uppsala, Uppsala, Swed.). *Electron Spectrosc., Proc. Int. Conf.* 1971 (Pub. 1972), 425-39 (Eng). Edited by Shirley, David A. North-Holland: Amsterdam, Neth. The high resolu. He I photoelectron (PE) spectrum of C₃O₂ was recorded and vibrational anal. was made. Five PE bands with max. at 10.605, 14.8, 15.8, 16.978, and 17.258 eV with relative intensities of 2, 2.1, 1.3, 0.9, and 2.2, resp., were obsd. The symmetries of the MO's and their adiabatic ionization potentials were $2\pi_u$ (10.605), $1\pi_g$ (14.502), $2\sigma_u$ (15.751), $2\sigma_g$ (16.978), and $1\pi_u$ (17.258 eV). In the region 14.5 to 18 eV where there were two π - and two σ -orbitals, the ordering of the π -orbitals relative to the σ -orbitals obtained from the computations differed from the exptl. findings. The ion was linear in its ground state; however, the higher ionic states had various configurations depending on the symmetry of the ionized electron. The transition to the ground ionic state was dominated by a progression of 2105 cm^{-1} in the totally symmetric stretching frequency ν_1 . Each of these bands was accompanied by $\Delta\nu_u = 0$ sequences in the $\nu_1' \approx 400\text{ cm}^{-1}$. This large increase in ν_1 was attributed to the redn. of the high neg. charge on the central C atom on ionization with a resulting increase in the bending force const.

J. C. Joshi

methane, thio-

C₃O₂

1972

14 Б7. Неэмпирический расчет электронного строения недоокиси углерода. Sabin John R., Kim Myunyoung. Ab Initio calculation of the electronic structure of carbon suboxide. «J. Chem. Phys.», 1972, 56, № 5, 2195—2198. (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе сгруппированных гауссовых функций исследовано электронное строение недоокиси углерода, C₃O₂. Варьировались длины связей (принятые попарно равными) и угол CCC (φ); группировки С—С—О полагались линейными. Показано, что миним. энергией обладает линейная структура (φ=180°) с длинами связей СС и СО 1,332 и 1,243А соотв. (опыт 1,28 и 1,16, 180±5—10°). Приведены орбитальные и полные энергии, заселенности по Малликену. Результаты расчета согласуются с полу-

расчет
сис. п.

V₆

квант. сп. ра

X. 1972.

14

ченными другими авторами и с опытными данными. Центральный атом С и атомы О обладают значительными отрицат. эффективными зарядами ($-0,318$ и $-0,260$), что приводит к большей поляризации связей С—С, чем С—О. Рассчитанные силовые постоянные вал. кол. удовлетворительно согласуются с опытными значениями. Подробно обсуждена причина аномально малого (теор. и эксперим.) значения силовой постоянной деф. кол. группы $\text{C}=\text{C}=\text{C}$. В. Л. Лебедев

C O
32

1972

92199s Ab initio calculation of the electronic structure of carbon suboxide. Sabin, John R.; Kim, Hyunyoung (Quantum Theory Proj., Univ. Florida, Gainesville, Fla.): *J. Chem. Phys.* 1972, 56(5), 2195-8 (Eng). An ab initio LCGO (linear combination of Gaussian orbitals) MO SCF calcn. with geometry search was carried out on C_3O_2 . The structure is linear with C-C and C-O bond distances of 1.332 and 1.243 Å, resp. The electronic configuration was detd. and one-electron properties were calcd. Potential functions are reported and discussed with particular emphasis on the low-frequency bending mode about the central C atom.

 $\text{C} \cdot \text{C} - \text{C}$ $\text{C} \text{C} - \text{O}$

C.A. 1972. 46. 16

C_3O_2

1972

Weber A.,

Develop. Appl. Spectroscopy.
Vol. 10, New-York-London, 1972
I37-I60.

Spaus.
noem.

(ver. $C_2H_2Cl_2$; III)

C_3O_2

1973

Aarons LJ. et.al.

"J.Chem.Soc. Faraday. Trans"

1973, Part 2, 69, N4, 563-568.

(J)

■ (all CH_4 ; III)

C₃O₂

XIV-4888

1973

(Di)

120037v Far infrared and Raman spectra of gaseous carbon suboxide and the potential function for the low frequency bending mode. Carreira, L. A.; Carter, R. O.; Durig, J. R.; Lord, R. C.; Milionis, C. C. (Dep. Chem., Univ. South Carolina, Columbia, S.C.). *J. Chem. Phys.* 1973, 59(3), 1028-37 (Eng). The far-ir spectrum of gaseous C₃O₂ under high resolu. (0.3 cm⁻¹) was investigated (20-80 cm⁻¹). Two series of absorption max. were obsd. resulting from the anharmonicity of the low-frequency bending vibration, ν_7 . In 1 series the max., found to be relatively sharp, were assigned to P-branch bandheads, and in the other the more diffuse peaks were assigned to Q branches for excited state

of lin
cribed
sis

C.A. 1973. 79 N 20

transitions of ν_7 . The Raman spectra of gaseous and solid C_3O_2 were obtained under moderately high resolu. (1.0 cm^{-1}). Several lines had striking fine structure. More than 10 Q branches were obsd. in the Raman spectrum of the gas in the region of $2\nu_7$. The obsd. Q branches in the ir and Raman spectra were assigned with the help of a potential function of the form $V (\text{cm}^{-1}) = (0.728 \pm 0.010) q^4 - (640 \pm 0.36) q^2$, where q is 1 of the reduced polar coordinates q and ϕ . This function leads to a barrier to the linear configuration of $14 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$ with the lowest energy level at 19.7 cm^{-1} . Thus, C_3O_2 is linear in the ground vibrational state. The $0 \rightarrow 1$ transition was at 22.2 cm^{-1} . The potential function, transformed to the dimensioned form by using the reduced mass, gives an angle of 10.2° at the shallow potential min. Many of the other Raman bands showed extensive fine structure due to hot band transitions assocd. with ν_7 and it was only possible to locate the ground state transition reliably by observing the corresponding frequency in the solid. The gas-phase entropy of C_3O_2 calcd. with the help of the new assignment for ν_7 agrees reasonably well with the exptl. 3rd-law entropy but there is indication that a small amount of addnl. entropy may be required from a solid-state transition at 120°K with $\Delta H \simeq 50 \text{ cal/mole}$.

С₃O₂
8884-11X
Di:uo:
м.п.
2 Б205. Длинноволновые инфракрасные спектры и спектры комбинационного рассеяния газообразной не-
доокиси углерода и потенциальная функция для низ-
кочастотного деформационного колебания. Carreira L. A., Carter R. O., Durig J. R., Lord R. C.,
Milionis C. C. Far infrared and Raman spectra of
gaseous carbon suboxide and the potential function for
the low frequency bending mode. «J. Chem. Phys.», 1973,
59, № 3, 1028—1037 (англ.)

Длинноволновый ИК-спектр (20—80 см⁻¹) газ. не-
доокиси углерода C₃O₂ исследован с высоким разреше-
нием (0,3 см⁻¹). Наблюдалось две серии максимумов
поглощения, связанных с ангармоничностью низкочас-
тотного деф. кол. ν_7 . В одной серии максимумы явля-
ются узкими и отнесены к Р-ветвям, а более диффуз-
ные пики приписаны Q-ветвям для возбужденного
состояния переходов ν_7 . С разрешением 1 см⁻¹ полу-
чен спектр КР газа и тв. C₃O₂. Для нек-рых линий

1973

ссылка в журнал
у Журналиста

ж. 1974

№2

обнаружена тонкая структура. В спектре КР в области полосы $2\nu_7$ для газа обнаружено более 10 Q-ветвей. Найденные в ИК- и КР-спектрах Q-ветви отнесены с помощью потенциальной функции вида $V(\text{см}^{-1}) = (0,728 + 0,010)q^4 - (6,40 + 0,36)q^2$, где q — обобщенная полярная координата q или Φ . С этой функцией получена величина барьера для линейной конфигурации $14 \pm 2 \text{ см}^{-1}$ с низшим энергетич. уровнем $19,7 \text{ см}^{-1}$. Т. о., молекула в низшем колебательном состоянии линейна. Переход $0-1$ лежит при $22,2 \text{ см}^{-1}$. Многие др. полосы КР имеют тонкую структуру из-за «горячих переходов», связанных с ν_7 . Установить частоту основного перехода представляется возможным только при сопоставлении со спектром в тв. состоянии. Рассчитана энтропия C_2O_3 в газе с новым значением частоты ν_7 , к-рая хорошо совпадает с эксперим. термодинамич. величиной.

По резюме

C₃O₂

спектр
м. н. в.

д. С. 79. ф.

ф. 1974
N 1

1 Д375. Длинноволновые ИК-спектры и спектры комбинационного рассеяния газообразной закиси углерода и потенциальная функция низкочастотного деформационного колебания. Carreira L. A., Carter R. O., During J. R., Lord R. C., Milionis C. C. Far infrared and Raman spectra of gaseous carbon suboxide and the potential function for the low frequency bending mode. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 3, 1028—1037 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения газообразной C₃O₂ в области 20—80 см⁻¹ с разрешением 0,3 см⁻¹ и спектры комб. рас. газообразной и кристаллич. C₃O₂. Приведены спектры и таблицы частот полос. Наблюдаемая в поглощении серия узких линий связана с кантами Р-ветвей, а серия широких — с Q-ветвями переходов ν_7 с различных возбужденных уровней. Аналогичные серии наблюдаются в спектре комб. рас. Одна из них связана с переходами $2\nu_7$. По наблюдаемым частотам построена потенц. кривая для деформации молекулы вида $V(x) = Ax^4 - Bx^2$ с барьером, высота которого ниже энергии основного колебательного состояния, что указывает на линейное строение молекулы. Вычисленная энтропия C₃O₂ для газовой фазы согласуется с термодинамич. данными. Библ. 32.

М. В. Тонков

1973

8884-11X



(+2)

7.99.

1973

 C_3O_2

7 Б1211. Кинетическое исследование атомов $C(2^1S_0)$ при фотолизе C_3O_2 методом атомной абсорбционной спектроскопии. Husain D., Kirsch L. J. A kinetic study of $C(2^1S_0)$ in the photolysis of C_3O_2 by atomic absorption spectroscopy. «J. Photochem.», 1973, 2, № 3—4, 297—308 (англ.)

фотолиз

Методом абсорбц. атомной спектроскопии с временным разрешением исследована кинетика расходования электронно-возбужденных атомов $C(2^1S_0)$ [по уменьшению поглощения резонансной линии λ 247,8 нм, переход $C(3^1P_1) \rightarrow C(2^1S_0)$], получаемых при импульсном фотолизе ($\lambda \sim 200-300$ нм) C_3O_2 в присутствии инертных газов Q (H_2 , CO, N_2 , CH_4 , He). Рассмотрен механизм фотолиза, согласно которому атомы $C(2^1S_0)$ образуются во втор. р-циях. В перв. акте образуются радикалы C_2O в синглетном ($^1\Delta$ или $^1\Sigma$) состоянии: $C_3O_2 + h\nu \rightarrow C_2O + CO$ или атомы $C[3^1P(\sim 80\%)$ или $^1D(20\%)]$: $h\nu + C_3O_2 \rightarrow 2CO + C$. Атомы $C(2^1S_0)$ не образуются в перв. акте (пороговая λ равна 139,4 нм). Атомы $C(2^1D_2)$ или $C(2^3P_j)$ более р-ционноспособны, чем $C(2^1S_0)$, и вступают в р-ции: $C(2^3P_j) + C_3O_2 \rightarrow 2C_2O$; $C(2^1D_2) +$

2. 1974

N 7

$+C_3O_2 \rightarrow 2C_2O$; $C(2^3P_j) + CO + Q \rightarrow C_2O + Q$. Эффективная
 фотодиссоциация синглетных C_2O приводит к образова-
 нию $C(2^1S_0)$: $h\nu + C_2O(^1\Delta) \rightarrow CO(^1\Sigma) + C(2^1S_0)$ (λ порог.
 278,2—207,7 нм), $h\nu + C_2O(^1\Sigma) \rightarrow CO(^1\Sigma) + C(2^1S_0)$ (λ по-
 рог. 295,5—217,1 нм). Показано, что добавки небольших
 кол-в H_2 , CO , CH_4 , N_2 , достаточных для дезактивации
 $C(2^1D_2)$, почти не меняют выход $C(2^1S_0)$. Из интерн-
 фольмеровских зависимостей $1/[C(2^1S_0)]$ от $[Q]$ оцене-
 ны константы скорости р-ции k ($см^3/молекула \cdot сек$) при
 300° К, разные для $Q = C_3O_2$, He, H_2 , CO , N_2 , CH_4 соотв.
 $1 \cdot 10^{-10}$; $< 2 \cdot 10^{-15}$; $\leq 4 \cdot 10^{-14}$; $\leq 6 \cdot 10^{-14}$; $\leq 3 \cdot 10^{-15}$;
 $\leq 10^{-11}$. Т. к. механизм образования $C(2^1S_0)$ достаточно
 сложен, полученные значения k являются лишь оценоч-
 ными.

А. Шведчиков

ана.
ксац.

1973

 C_3O_2 (крас.)

Vi

Raman -
спектр.

85090h Raman spectra of crystalline carbon suboxide. Smith, William Hayden; Bates, John B. (Princeton Univ. Obs., Princeton, N.J.). *J. Raman Spectrosc.* 1973, 1(1), 83-5 (Eng). Raman spectra of the 2 cryst. phases (phases *I* and *II* at 231 and $<130^\circ K$, resp.) of C_3O_2 were recorded to identify overtones of ν_2 and ν_7 . Bands at 1579 and 1577 cm^{-1} in the spectra of phases *I* and *II* were assigned to the $2\nu_2$ combination vibration. The $2\nu_7$ were not identified. The results are discussed with regard to the ν_2 and ν_7 potentials in condensed phases. A recently proposed structure (D_{2h} with 2 nonequiv. sites) of the *I* form of C_3O_2 is considered in view of the obsd. spectra.

C.A. 1973. 79 N14

C_3O_2

Zahradnik R
Carsky P.

1973

4-1671

спектр.
спектр.

"Collect. Creek. Chem. Communus
1971, 38, N 7, 1876-85

C_3O_2

amuck 2128

1974

Уловит.
супер.

125113x Even-tempered atomic orbitals. VII. Theoretical equilibrium geometries and reaction energies for carbon suboxide and other molecules containing carbon, oxygen, and hydrogen. Bardo, Richard D.; Ruedenberg, Klaus (Ames Lab., Iowa State Univ., Ames, Iowa). *J. Chem. Phys.* 1974, 60(3), 932-6 (Eng). The quality of molecule-optimized even-tempered Gaussian bases (B. and R., 1974) was ascertained from calcns. of the theoretical equilibrium conformations of the mols. H_2 , CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , $MeC\equiv CH$, H_2O , CO , CO_2 , and $HCHO$, and of the energies for the reactions of these mols. at $0^\circ K$ with H_2 and CH_4 . The equilibrium geometry of C_3O_2 was determined and compared to known results.

C. A. 1974. 80 N 22

1974

 C_3O_2

112 Д243. Возбуждения, сопровождающиеся ионизацией в C_3O_2 . Cederbaum L. S. Excitations accompanying ionization in C_3O_2 . «Vacuum Ultraviolet Radiat. Phys. Proc. IV Int. Conf., Hamburg, 1974». [Oxford]—Braunschweig, 1974, 155—156 (англ.)

При помощи ур-ния Дайсона и многочастичной ф-ции Грина получено выражение, описывающее много-частичные возбуждения, сопровождающиеся ионизацией. В качестве примера рассчитываются энергии и интенсивности спутных линий фотоэлектронного спектра молекулы C_3O_2 . Проводится сравнение с эксперим. данными. Отмечаются преимущества описания многочастичных возбуждений на языке ф-ций Грина: нужны только хартри-фоковские расчеты самой системы (данных по иону не надо), автоматически учитываются корреляции в начальном и конечном состояниях, учитываются все возможные конечные состояния иона.

Е. П. Смирнов

ионизация

Ф 1976 №2

1974

C₃O₂

5 B173. Возбуждения, сопровождающие ионизацию в C₃O₂. Cederbaum L. S. Excitations accompanying ionization in C₃O₂. «Vacuum Ultraviolet Radiat. Phys. Proc. IV. Int. Conf., Hamburg, 1974». [Oxford]—Braunschweig, 1974, 155—156 (англ.)

Методом ф-ции Грина определены энергии возбуждения и соотв-щие интенсивности возбуждения или ионизации 2-го электрона в атоме или молекуле при фотоионизац. процессах. Вычисление ф-ции Грина выполнено с помощью матричного ур-ния Дайсона через энергии хартри-фоковских орбиталей. Полученные ф-лы использованы для расчета рентгеноэлектронного спектра молекулы C₃O₂ в области C1s и O1s-линий. Вычисленные энергии и интенсивности для наиболее интенсивных сателлитных линий спектра хорошо согласуются с эксперим. данными.

С. Н. Мурзин

рейтгено
электр.
спектр.

№ 1976 N5

1974

 C_3O_2 потенц.
кривые

V1 Д136. Исследование потенциальной функции для изгиба CCC в недоокиси углерода неэмпирическими методами. Jensen Harald H., Nilssen Edvin Wisløff, Seip Hans M. The potential function for the CCC bending in carbon suboxide studied by ab initio calculations. «Chem. Phys. Lett.», 1974, 27, № 3, 338—341 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в базе гауссовских ф-ций (9s5p1d) для всех атомов исследована потенц. кривая изгиба CCC в недоокиси углерода (C_3O_2) (I). Для линейной формы I проведена оптимизация длин связей и экспонент d-ф-ций. Во всех последующих расчетах проводилась оптимизация геометрии I только по углам CCC и CCO. Показано, что потенц. кривая имеет только один минимум, соответствующий углам CCC и CCO в 180° , но сильно ангармонична. Проведены также расчеты потенц. кривой без учета d-АО. В обоих случаях удовлетворительного согласия с эксперим. данными не достигнуто, однако при учете d-АО форма потенц. кривой ближе к экспериментальной. В. А. Корсунов

ф. 1975
N1

1974

C_3O_2

м.п. τ_e
потенц.
крив.

1 Б17. Неэмпирический расчет потенциальной функции деформационного колебания CCC в недоокиси углерода. Jensen Harald H., Nilssen Edwin Wisloff, Seip Hans M. The potential function for the CCC bending in carbon suboxide studied by ab initio calculations. «Chem. Phys. Lett.», 1974, 27, № 3, 338—341 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе гауссовых функций 9s5p1d, сгруппированном в базис

х. 1975. N1

$4s3p1d$, а также без учета d -АО и с учетом d -АО только центрального атома С, исследовано электронное строение недоокиси углерода C_3O_2 . Приведены энергетич. характеристики, распределения электронной плотности, потенциальные кривые для деф. кол. Равновесные длины связей С—О и С—С найдены равными 1,131 и 1,266 А (опыт 1,163 и 1,289). Обнаружено, что потенциал деф. кол. С—С—С обладает значит. ангармоничностью, что согласуется с опытными данными; установлено, что учет d -АО существенен для получения такого согласия.

В. Л. Лебедев

1974

 C_3O_2

141069p Potential function for the carbon-carbon-carbon bending in carbon suboxide studied by ab initio calculations. Jensen, Harald H.; Nilssen, Edwin W.; Seip, Hans M. (Dep. Chem., Univ. Oslo, Oslo, Norway). *Chem. Phys. Lett.* 1974, 27(3), 338-41 (Eng).: Ab initio calcns. using a (9s5p1d) basis give a high degree of anharmonicity in the C-C-C bending potential for C_3O_2 in agreement with exptl. evidence. The barrier corresponding to the linear form is, however, not reproduced in the present work.

nomencl.
op-448

C.A. 1974. 8/v22

C₃O₂

* 4 - 4080

1974

114397s Auger electron spectrum of carbon suboxide (C₃O₂).
Karlsson, L.; Werme, L. O.; Bergmark, T.; Siegbahn, K.
(Inst. Phys., Univ. Uppsala, Uppsala, Swed.). *J. Electron
Spectrosc. Relat. Phenomena* 1974, 3(3), 181-9 (Eng). The high
resoln. KLL Auger electron spectrum of C₃O₂ gas was recorded.
Assignments, assisted by intensity and energy calcs., are pro-
posed for the peaks in the spectrum. A comparison is made with
the O Auger spectrum of CO. The ground state energy of
C₃O₂¹⁺ is 29.7 eV.

2d. chem

C.A. 1974. 80. N20

C₃O₂

список 3005

1974

McROOBY J.E., HALL G.C.

"J. Amer. Chem Soc."

1974, 96, (26), 7875-7876.

рацем дигрени

40807.1357

Gph, TC, Ch, MGU

39062GR

 C_3O_2 02
*

1974

4-5816

Sheahan Thomas P. - Observation of C_3O_2
during atmospheric reentry.

"Combust. and Flame", 1974, 22, N 2, 243-
251
(англ.)

0102

148 149

154

ВИНИТИ

C_3O_2

ommuc 4011

1975

Cocke D.L;
Gingerich K.A.

(Vi)

Chem. Phys; 1975

294-302

Application of matrix
isolation spectroscopy...

C_3O_2

ЖУ-8384

1975

ВФ-6319-ХIV

(ли.п)

7 Д409. Колебательно-вращательные спектры высокого разрешения закиси углерода. Молекулярные постоянные основного состояния и состояния $2\nu_7^0$. Mantz A. W., Connes P., Guelachvili G., Amiot C. High resolution vibration-rotation spectra of carbon suboxide. Molecular constants for the ground state and $2\nu_7^0$. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 54, № 7, 43—53 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра получены спектры ИК-поглощения газообразной C_3O_2 в области 3000—

Ф 1975 N 7.

5000 см^{-1} с разрешением 0,005 см^{-1} . Приведены частоты наблюдаемых колебательно-вращательных линий, определенные с точностью $\sim 2 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$, и выполнено их отнесение к различным составным переходам с основного уровня и с возбужденного колебательного уровня $2\nu_7^0$. Определены постоянные молекулы в основном состоянии и при возбуждении в ней нескольких колебаний. Энергия уровня $2\nu_7^0$ составляет 60,7022 см^{-1} . Отмечен случай кориолисова резонанса. Библ. 18.

М. В. Тонков

*4-8384

1975

C₃O₂

(н.н.)

BP-6379-XIV

13 Б261. Колебательно-вращательные спектры высокого разрешения недоокиси углерода. Молекулярные постоянные для основного состояния и $2\gamma_7^0$. Mantz A. W., Connes P., Guelachvili G., Amiot C. High resolution vibration-rotation spectra of carbon suboxide. Molecular constants for the ground state and $2\gamma_7^0$. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 54, № 1, 43—53 (англ.)

На вакуумном Фурье-спектрометре получен колебательно-вращательный спектр недоокиси углерода C₃O₂ при т-ре 25° в области частот от 3000 до 5000 см⁻¹ с разрешением 0,005 см⁻¹. Выполнен вращательный анализ для семи $\Sigma_u^+ - \Sigma_g^+$ переходов, шесть из которых имеют в качестве нижнего основное колебательное состояние и седьмой $2\gamma_7^0$ состояние. Определены молек. постоянные C₃O₂ для основного состояния в см⁻¹: $B = 0,07556255 \pm 118$, $D = (3,817 \pm 40) \times 10^{-8}$, $H = (6,019 \pm 415) \times 10^{-13}$ и для верхних состояний. Установлено, что состояние $2\gamma_7^0$ расположено выше основного колебательного состояния на $60,7022 \pm 0,0005$ см⁻¹.

С. Н. Мурзин

X. 1975. N 13

C_3O_2

*4-8384

1975

(Di; u.n.)

91806z High resolution vibration-rotation spectra of carbon suboxide. Molecular constants for the ground state and $2\nu^0$. Mantz, A. W.; Connes, P.; Guelachvili, G.; Amiot, C. (Lab. Aime Cotton, CNRS II, Orsay, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1975, 54(1), 43-53 (Eng). The ir spectrum of C_3O_2 was recorded with the vacuum Fourier transform interferometer at a resolu. of 0.005 cm^{-1} . The ground state mol. consts. were calcd. from lower state

combination relations in a simultaneous anal. of 6 ground state transitions situated in the region $3000\text{ to }5000\text{ cm}^{-1}$. Through the anal. of a difference band it was established that $2\nu^0$ is $60.7022 \pm 0.0005\text{ cm}^{-1}$ above the ground vibrational state. Accurate mol. constants were also detd. for this vibrational level.

C.A. 1975. 82. NY

Page 288



C₃O₂

(7 Д480) Двумерный ангармонический осциллятор. Деформационное колебание CCC в C₃O₂. Duckett J. A. Mills I. M., Robiette A. G. The two-dimensional anharmonic oscillator. The CCC bending mode of C₃O₂. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 63, № 2, 249—264 (англ.)

Предложена модель деформационных колебаний ν_7 группы CCC молекулы C₃O₂, в которой отклонения от линейности описываются двумерной координатой $0 = (\theta_x^2 + \theta_y^2)^{1/2}$, а состояния энергии — квантовыми числами u, l . В работе принят потенциал $V = A\theta^2 + B\theta^4$. По литературным данным о частотах полос в спектрах ИК-поглощения и комб. рас. определены параметры этого потенциала для основного состояния молекулы и возбужденных состояний $u_4=1$ и $u_2=1$. Для основного состояния минимум потенциала соответствует изгибу 24° и барьеру перехода через плоскую конфигурацию в 23 см^{-1} , для состояния $u_2=1$ барьер почти исчезает, а для $u_4=1$ барьер и угол увеличиваются. Вычислены эффективные вращательные постоянные молекулы при возбуждении колебания ν_7 и уточнена прежняя интерпретация спектров ИК-поглощения и комб. рас. Приведены силовые матрицы гармонич. и ангармонич. приближений молекулы C₃O₂.

М. Тонков

1976

#4-17261



(+1)

Евбу

И. С. С. И. И.

Чо

Ф. 1977. № 7

C₃O₂

45-17261

1976

13 Б232. Двухмерный аугармонический осциллятор. Деформационное колебание групп ССС в молекуле C₃O₂. Duckett J. A., Mills I. M., Robiette A. G. The two-dimensional anharmonic oscillator. The CCC bending mode of C₃O₂. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 63, № 2, 249—264 (англ.)

Выполнен теор. анализ лит. данных по колебательно-му и вращательному спектру молекулы C₃O₂. Потенциальная функция для колебания ν_7 группы ССС выбрана в виде $v = A\Theta^2 + B\Theta^4$. По эксперим. данным для частот колебательных переходов и для зависимости вращательной постоянной B_v и постоянной l -удвоения q_v от колебательного состояния вычислены значения коэф. потенциала: $A = -261,4$, $B = 730,1$ см⁻¹ (основное состояние); $A = -381,1$, $B = 726,7$ см⁻¹ (первое возбужденное состояние колебания ν_4); $A = -36,1$, $B = 727,8$ см⁻¹ (первое возбужденное состояние колебания ν_2); барьер при $\Theta = 0$ для этих состояний составляет 23, 50 и 1 см⁻¹, соответственно.

А. М. Пындык

Мин.

х.1977. №13

C₃O₂

* 4 - 17261

1976

M. R.

C. A., 1976.

85. v 22

85: 169264e The two-dimensional anharmonic oscillator. The CCC bending mode of carbon suboxide. Duckett, J. A.; Mills, I. M.; Robiette, A. G. (Dep. Chem., Univ. Reading, Reading, Engl.). *J. Mol. Spectrosc.* 1976, 63(2), 249-61 (Eng). Newly obsd. data on the rotational consts. of C₃O₂ in excited vibrational states of the low-waveno. bending vibration ν_7 were successfully interpreted in terms of the 2-dimensional anharmonic oscillator wave functions assocd. with this vibration. By combining these results with published ir and Raman spectra, the vibrational assignment was extended and a refined bending potential for ν_7 was derived: this has a min. at a bending angle of about 24° at the central C atom, with an energy max. at the linear configuration some 23 cm⁻¹ above the min. From similar data on the combination and hot bands of ν_7 with ν_4 (1587 cm⁻¹) and ν_2 (786 cm⁻¹), the effective ν_7 bending potential was also detd. in the 1-quantum excited states of ν_4 and ν_2 . The effective ν_7 potential shows significant changes from the ground vibrational state; the central hump in the ν_7 potential surface is increased to ~50 cm⁻¹ in the $\nu_4 = 1$ state, and decreased to about 1 cm⁻¹ in the $\nu_2 = 1$ state. Vibrational assignments are suggested for most obsd. bands in the ir and Raman spectra of C₃O₂.

86: 23959j Carbon suboxide as a quasilinear molecule with a large amplitude bending mode. Determination of the molecular constants and the ν_7 potential function. Weber, W. H.; Ford, G. W. (Phys. Dep., Ford Mot. Co., Dearborn, Mich.). *J. Mol. Spectrosc.* 1976, 63(3), 445-58 (Eng). The model of a quasilinear mol. with a large amplitude bending mode is used to treat C_3O_2 . The Hamiltonian operator, including the rotation-vibration interaction, is derived allowing only a single vibrational degree of freedom, i.e., the ν_7 mode corresponding to the bending at the central C atom. The C = C = O angle is constrained to be 180° . With this model the rotational energy levels and, thus, the mol. consts. can be computed for any ν_7 level once the ν_7 potential is specified. The l -doubling is included only for π states. The model contains 3 adjustable parameters: the rotational const. in the linear configuration and 2 terms in the potential function, and these are detd. by fitting 3 exptl. quantities: the rotational consts. in and the sepn. between the ground and $2\nu_7^0$ states. The resulting ν_7 potential has a 30.56 cm^{-1} barrier at $\alpha = 0$ with a min. at $\alpha = 11.04^\circ$, where 2α is the angular deviation from linearity. The model gives a good fit to the $2\nu_7$ Raman data and to the rotational and centrifugal distortion consts. in all of the $n\nu_7^1$ states which were analyzed. A similar anal. is applied with equal success to the states with ν_4 , the asymmetric C = C stretch mode at 1587 cm^{-1} , simultaneously excited with a ν_7 mode. The potential in this case has a 56.58 cm^{-1} barrier at $\alpha = 0$ with a min. at $\alpha = 13.02^\circ$.

1976

88071-58

See, C. A. 1977 2644

C.A. 1977 2644

C₃O₂

43-17088

1976

7 Д220. Недоокись углерода как квазилинейная молекула с большой амплитудой деформационного колебания. Определение молекулярных постоянных и потенциальной функции для колебания ν_7 . Weber W. H., Ford G. W. Carbon suboxide as a quasilinear molecule with a large amplitude bending mode. Determination of the molecular constants and the potential function. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 63, № 3, 445—458 (англ.)

М. П.

Модель с одним колебанием большой амплитуды применена для расчета энергии колебательно-вращательных уровней молекулы C₃O₂. Потенц. ф-ция для колебания ν_7 (деформационное колебание группы C=C=C) выбрана в виде $V = V_2 \sin^2 \alpha + V_4 \sin^4 \alpha$. Модель содержит всего 3 параметра (вращательная постоянная B и параметры V_2 и V_4 , см⁻¹), значения которых вычислены из эксперим. данных по ИК- и КР-спектрам: $B_0 = 0,0735$, $V_2 = -1666$, $V_4 = 2270$; барьер при $\alpha = 0$ составляет 30,5 см⁻¹ для основного состояния и 56,6 см⁻¹ для состояния $\nu_4 + \nu_7$.

М. Р. Алнев

Ф. 1977. № 7

C₃O₂

* US - 12429

1976

16 Б247. Анализ спектра ν_4 полосы $^{12}\text{C}_3^{16}\text{O}_2$ при помощи перестраиваемого диодного лазера. Webber W. H., Maker P. D., Peters C. W. Analysis of tunable diode laser spectra of the ν_4 band of $^{12}\text{C}_3^{16}\text{O}_2$. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 5, 2149—2158 (англ.)

Измерен спектр ν_4 основной полосы C_3O_2 в области частот от 1565 до 1610 см^{-1} при помощи непрерывно перестраиваемого диодного лазера. Используемый лазер на основе PbTe диода позволял производить непрерывную перестройку в пределах одной моды $\sim 2 \text{ см}^{-1}$ с теор. разрешающей способностью $\sim 10^{-4} \text{ см}^{-1}$. Спектр записан с разрешением $\sim 0,0024 \text{ см}^{-1}$, к-рое ограничивалось доплеровским уширением линий. Идентифицировано свыше 300 линий и определены вращательные постоянные для основной и пяти различных горячих полос ν_4 $^{12}\text{C}_3^{16}\text{O}_2$. Для основной полосы молек. постоянные в см^{-1} : $\nu_0 = 1587,390 \pm 0,002$, $B'' = 0,075573 \pm 0,00002$, $B' - B'' = (6,450 \pm 0,04) \cdot 10^{-4}$, $D'' = (4,183 \pm 0,4) \cdot 10^{-8}$, $D' - D'' = (1,928 \pm 0,3) \cdot 10^{-8}$, $H'' = (0,616 \pm 0,1) \cdot 10^{-12}$, $H' - H'' = (0,192 \pm 0,1) \cdot 10^{-12}$. Полученные результаты согласуются с лит. данными.

С. Н. Мурзин

В. И. М. И.

Х. 7976
N 16

Лит.-отдел - 69

№ 4 - 12429

1976

C_3O_2

8 Д481. Анализ полосы $\nu_4^{12}C_3^{16}O_2$, зарегистрированной с помощью диодного лазера. Weber W. H., Marker P. D., Peters C. W. Analysis of tunable diode laser spectra of the ν_4 band of $^{12}C_3^{16}O_2$. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 5, 2149—2158 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра и перестраиваемого диодного лазера получены спектры ИК-поглощения $^{12}C_3^{16}O_2$ в газовой фазе в области $1610-1530\text{ см}^{-1}$. Увеличение интенсивности НЧ-части спектра, полученного на фурье-спектрометре, при понижении т-ры до 193°K связано с уменьшением вклада горячих переходов с возбужденных уровней ν_7 . Лазерные спектры получены в трех интервалах и перекрывают 70% области $1565-1600\text{ см}^{-1}$. Абс. калибровка частот в этих спектрах выполнена по линиям H_2O и NH_3 , относитель-

Лит.-отдел-авт

ф. 1976. № 8

ная — с помощью эталона Фабри—Перо. Разрешение $\sim 0,0024$ ограничивалось доплеровской шириной линий. Приведены полученные спектры, частоты наблюдаемых линий, определенные с точностью 10^{-3} см^{-1} , и их отнесение к основной полосе ν_4 , двум компонентам полосы $\nu_4 + \nu_7 - \nu_7$ и трем компонентам полосы $\nu_4 + 2\nu_7 - 2\nu_7$. По наблюдаемым частотам вычислены колебательная частота основного перехода, вращательные постоянные B , D и H и их изменения при колебательном возбуждении. Отмечена незначительная величина изменения B при переходах между Δ -состояниями. Библи. 30.

C₃O₂

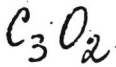
* 45-12429

1976

ADP - 7070 - XIV

84: 128347v Analysis of tunable diode laser spectra of the ν_4 band of carbon oxide ($^{12}\text{C}_3^{16}\text{O}_2$). Weber, W. H.; Maker, P. D.; Peters, C. W. (Eng. Res. Staff, Ford Mot. Co., Dearborn, Mich.). *J. Chem. Phys.* 1976, 64(5), 2149-58 (Eng). Current-tunable thin-film PbTe diode lasers were used to obtain Doppler-limited resolu. of the ν_4 asymmetric stretch band of C_3O_2 in the region 1565-1600 cm^{-1} . Roughly 70% of the interval was covered using different modes of 3 lasers, each mode giving a tuning range of 1-3 cm^{-1} . Abs. spectral calibration was obtained from NH_3 and H_2O , together with the channel spectrum of a 4-cm Ge etalon recorded simultaneously using a double beam technique. Rotational consts. were detd. for the ν_4 fundamental band and 5 different hot bands assocd. with the thermally excited low frequency bending mode ν_7 . The band origin for the ground state transition is $1587.390 \pm 0.002 \text{ cm}^{-1}$ and the ν_7 hot bands are shifted progressively to lower frequency. The systematic shift of the hot bands was verified independently with temp. difference spectra from a Fourier transform spectrometer.

C.A. 1476 84 N 18



параметр для
количественной
оценки.

X1976
N15

15 Б71. Параметр для количественной оценки молекулярной квазилинейности. Yamada Koichi, Winnewisser Manfred. A parameter to quantify molecular quasilinearity. «Z. Naturforsch.», 1976, 31a, № 2, 139—144 (англ.)

Введен параметр γ_0 , количественно характеризующий квазилинейность молекул. Для произвольной трехатомной молекулы $\gamma_0 = 1 - 4\gamma$, где γ — отношение энергии низшего состояния с K (или l), равным 1 к энергии низшего возбужденного состояния с K (или l), равным 0, причем обе энергии отсчитываются от энергии основного состояния. Параметр γ_0 возникает естественным образом при рассмотрении корреляц. диаграммы «линейная молекула — нелинейная молекула». Он принимает значение $+1$ для нелинейных молекул и -1 для линейных. Изменение γ_0 от $+1$ до -1 соответствует переходу от вращательной степени свободы для нелинейной молекулы к колебательной для линейной. Для более чем 40 молекул вычислены значения γ . Показано, что наиболее типичными квазилинейными молекулами являются C_3O_2 , $HNCS$, $HCNO$. Проведен ряд модельных расчетов с целью связать значения параметра γ_0 с формой потенциала. В качестве модельного использован гармонич. потенциал, возмущенный барьером гауссовой формы.

Б. И. Жилинский

1976

ⓧ
Ⓢ2

C3O2

[* 48-12939]

1977

Mills J. M.

(non. vol)

Faraday discuss. 1977
N 62, 1-19. (discuss 47-58)

C_3O_2

BP-XIV-9453

1977

C_3S_2

87: 206768m Kinetic constants method for the vibrational analysis of carbon suboxide and carbon subsulfide molecules. Mohan, S. (Dep. Phys., Pres. Coll., Madras, India). *Proc. Indian Acad. Sci., Sect. A* 1977, 86A(3), 299-308 (Eng). The kinetic consts. method was applied to C_3O_2 and C_3S_2 to evaluate the mol. consts., the generalized mean square amplitudes of variation, the shrinkage consts., the Coriolis coupling consts., and the centrifugal distortion consts. by using recent vibrational frequencies. The mol. consts. evaluated by this procedure generally agree with obsd. and calcd. values. The Coriolis coupling consts. and the centrifugal distortion consts. for these mols. are reported for the 1st time.

M. N.

(+1) 

C. A., 1977, 87, 126

ВФ-ХIV-9453

1974

C₃O₂C₃S₂

14 Б206. Анализ колебаний молекул субокси углерода и субсульфида углерода методом кинетических постоянных. Mohan S. Kinetic constants method for the vibrational analysis of carbon suboxide and carbon subsulphide molecules. «Proc. Indian Acad. Sci.», 1977, А86, № 3, 299—308 (англ.)

Мет. кинетич. постоянных применен к расчету молек. постоянных молекул C₃O₂ и C₃S₂. Получен новый набор силовых постоянных (в 10⁵ дин/см): для C₃O₂ $f_d=13,0218$, $f_r=18,8971$, $f_{dd}=-1,7144$, $f_{rr}=4,1934$, $f_{rd}=7,4400$, $f'_{rd}=-1,9595$, $f_\alpha=0,4109$, $f_\beta=0,0260$, $f_{\alpha\alpha}=-0,0748$, $f_{\alpha\beta}=0,0153$; для C₃S₂ $f_d=9,8303$, $f_r=15,2022$, $f_{dd}=-3,7367$, $f_{rr}=2,5783$, $f_{rd}=-2,7170$, $f'_{rd}=-0,3429$, $f_\beta=0,0827$, $f_{\alpha\alpha}=-0,0104$, $f_{\alpha\beta}=0,0514$. Рассчитаны также квадратичные амплитуды колебаний, величины эффекта сокращения, постоянные кориолисова взаимодействия и постоянные центробежного растяжения. Во всех случаях получено хорошее согласие с имеющимися эксперим. величинами.

Л. В. Серебrenников

дин;
сил. пост.



2, 1978, N14

C_3O_2

Оттиски 5441

1974

2 Д355. ИК-спектр C_3O_2 . Взаимодействие между колебанием ν_7 и колебаниями ν_2 и ν_4 . Peters C. W., Weber W. H., Maker P. D. The infrared spectrum of C_3O_2 . The interaction between ν_7 and the ν_2 and ν_4 vibrations. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 66, № 1, 133—149 (англ.)

и.п.

С помощью фурье-спектрометра в области 800—2000 cm^{-1} с разрешением 0,04 cm^{-1} получены спектры ИК-поглощения C_3O_2 при давлении 0,2 мм рт. ст. в присутствии аргона, уширяющее действие которого использовано для подавления вторичных максимумов интерферограммы. Выполнен анализ спектров в области 6 мк с привлечением данных, полученных на лазерном спектрометре, а также для области 12 мк. В первом случае наблюдаемые колебательно-вращательные ли-

Ф. 1978 № 2

нии отнесены к полосе ν_4 , соответствующим ей горячим переходам с возбужденных уровней колебания ν_7 до седьмого и суммарной полосе $\nu_4 + 2\nu_7$ с соответствующими горячими переходами. Приведены частоты линий. Спектры в области 8 мк связаны с комбинационными полосами $\nu_2 \pm \nu_7$. В суммарных полосах, включая горячие переходы, наблюдается серия Q-ветвей, отсутствующая в разностных полосах. Определены вращательные постоянные молекул в возбужденных состояниях ν_7 , определены энергии уровней этих колебаний и восстановлена потенц. ф-ция соответствующей деформационной координаты. В возбужденном состоянии $\nu_2 = 1$ минимум потенциала соответствует изгибу $4,9^\circ$ с барьером 12 см^{-1} . Библиогр. 15.

C3O2

Cmmlen 5441

1977

 ν_7, ν_2, ν_4

87: 60246r The infrared spectrum of carbon suboxide. The interaction between ν_7 and the ν_2 and ν_4 vibrations. Peters, C. W.; Weber, W. H.; Maker, P. D. (Phys. Dep., Univ. Michigan, Ann Arbor, Mich.). *J. Mol. Spectrosc.* 1977, 66(1), 133-49 (Eng). The $3\nu_7$, $3\nu_2$, and $4\nu_4$ hot bands of the ν_4 fundamental of C₃O₂ in the 1580 cm⁻¹ region were analyzed from tunable diode laser spectra and the ground state to $\nu_4 + 2\nu_7$ band at 1644 cm⁻¹ from Fourier transform spectra (FTS). The mol. consts. for all of the $\nu_4 1 \leftarrow 0$ bands as well as the intensity of the $\nu_4 + 2\nu_7$ sum band relative to the ν_4 fundamental were in agreement with the predictions of the model of W. H. Weber and G. W. Ford (1976). FTS spectra at 0.05 cm⁻¹ resolu. were obtained of the sum and difference bands of ν_2 with ν_7 in the 750, 900 cm⁻¹ region. Sharp Q branches occur for each ν_7 state in the sum bands, but only a no. of R branch bandheads and no recognizable Q branches in the difference bands. Assignments of the sum band Q branches through $\nu_7 = 6$ were made and mol. consts. were detd. for the $\nu_2 + \nu_7 \leftarrow 0$ transition at 819.7 cm⁻¹. The ν_7 potential function in the $\nu_2 = 1$ state has a 1.2 cm⁻¹ barrier with a min. at $\alpha = 4.9^\circ$, where 2α is the angular deviation from linearity. The Q-branch positions predicted from the calcd. energy level fit those obsd. within several cm⁻¹.

C. A. 1977

87 N 8

C₃O₂

литиса 5441

1977

1 Б207. Инфракрасный спектр C₃O₂. Взаимодействие колебания ν_7 с ν_2 и ν_4 . Peters C. W., Weber W. H., Maker P. D. The infrared spectrum of C₃O₂. The interaction between ν_7 and the ν_2 and ν_4 vibrations. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 66, № 1, 133—149 (англ.)

С использованием перестраиваемого диодного лазера изучены полосы горячих переходов в области полосы основного колебания ν_4 C₃O₂ в области 1580 см⁻¹ с участием частот $3\nu_7^1$, $3\nu_7^3$ и $4\nu_7^0$. В области 1644 см⁻¹ получены основные состояния до $\nu_4 + 2\nu_7^0$ с использованием техники фурье-спектроскопии. Молек. постоянные для всех полос ν_4 типа 1←0 и интенсивность полосы $\nu_4 + 2\nu_7^0$ по отношению к основной полосе ν_4 хорошо согласуются с предсказанными на основе модели Вебера и Форда. В области 750—900 см⁻¹ методом спектроскопии Фурье с разрешением 0,05 см⁻¹ получены полосы суммарных и разностных переходов ν_2 с ν_7 .

В. М. М.

24.1978 №1

Для полос суммарных частот каждого состояния ν_7 наблюдались острые Q-ветви и только несколько R-ветвей. Для разностных полос не обнаружено отчетливых Q-ветвей. Проведено отнесение Q-ветвей полос суммарных переходов вплоть до $\nu_7=6$. Определены молек. постоянные для перехода $\nu_2+\nu_7^1 \leftarrow 0$ при $819,7 \text{ см}^{-1}$. Для потенциальной ф-ции ν_7 в состоянии $\nu_2=1$ определен барьер, равный $1,2 \text{ см}^{-1}$ с минимумом при угле $\alpha=4,9^\circ$, где 2α — угол, характеризующий отклонение молекулы от линейной структуры. Эксперим. значения измеренных частот сопоставлены с теоретически вычисленными.

С. Б.

C3O₂

ammue 5792

1974

maBue
Ji

Shimanochi T.

J. Phys. Chem. and Ref. Data,
1977, 6, 993-1102.

C₃O₂

12 Д441. Спектры Q-ветвей полосы $\nu_2 + \nu_7$ молекулы C₃O₂ в области 12 мк с высоким разрешением. Webster W. H., Aldridge J. P., Flicker H., Nergeson N. G., Filip H., Reisfeld M. J. High-resolution Q-branch spectra of the $\nu_2 + \nu_7$ bands of C₃O₂ in the 12 μm region. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 65, № 3, 474—481 (англ.)

J.

С использованием перестраиваемого диодного лазера на Pb_{0,96}Sn_{0,04}Se (ширина линии генерации 10^{-4} см⁻¹) исследована структура Q-ветвей полосы $\nu_2 + \nu_7$ и соответствующих «горячих» полос молекулы C₃O₂ в области 820—850 см⁻¹ при давлениях 1—3 мм рт. ст. Идентифицированы линии Q-ветвей различных *l*-компонент полос $\nu_2 + \nu_7$ и $\nu_2 + 2\nu_7 - \nu_7$. Определены значения разностей вращательной и кватеричной и секстичной центробежных постоянных основного и возбужденных состояний. Для константы *l*-удвоения получены значения $4,16 \cdot 10^{-4}$ ($\nu_7 = 1$) и $2,96 \cdot 10^{-4}$ см⁻¹ ($\nu_2 = \nu_7 = 1$).

М. Р. Алиев

C3O2

Оптисек 5429

1974

24 В258. Спектры высокого разрешения Q-ветвей
полос $\nu_2 + \nu_7$ C_3O_2 в области 12 мкм. Weber W. H.,
Aldridge J. P., Flicker H., Nereson N. G.,
Filip H., Reisfeld M. J. High-resolution Q-branch
spectra of the $\nu_2 + \nu_7$ bands of C_3O_2 in the 12 μm re-
gion. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 65, № 3, 474—481
(англ.)

И.И.

Исследована область 820—850 cm^{-1} спектра ИК-по-
глощения C_3O_2 , где поглощение определяется Q-ветвя-
ми составных полос $\nu_2 + \nu_7$. Спектры измеряли при по-
мощи перестраиваемых лазерных диодов на основе
 $Pb_{0.96}Sm_{0.04}Se$, ширина линии генерации $\sim 10^{-4}$ cm^{-1} ,
область непрерывной перестройки 1—2 cm^{-1} , разреше-
ние на спектре $2,4 \cdot 10^{-3}$ cm^{-1} . Рассчитаны значения
молек. постоянных для основного состояния
(819,69 cm^{-1}) и первых двух «горячих» полос. Опреде-
лены константы l-удвоения состояний ν_7^1 и $\nu_2 + \nu_7^1$.
Сдвиг «горячих» полос в коротковолновую область ука-
зывает на то, что потенциал, определяющий частоту ко-
лебания ν_7 , в возбужденном состоянии ближе к гармо-
ническому, чем в основном состоянии. А. В. Бобров

X. 1974

N 24

C₃O₂

omni 5429

1977

M.N.

87: 13787h High-resolution Q-branch spectra of the $\nu_2 + \nu_7$ bands of carbon suboxide in the 12 μm region. Weber, W. H.; Aldridge, J. P.; Flicker, H.; Nereson, N. G.; Filip, H.; Reisfeld, M. J. (Phys. Dep., Ford Mot. Co., Dearborn, Mich.). *J. Mol. Spectrosc.* 1977, 65(3), 474-81 (Eng). Tunable diode laser spectra are obtained of several Q branches in the $\nu_2 + \nu_7$ sum bands at $^{12}\text{C}_3^{16}\text{O}_2$ at 820-850 cm^{-1} . Mol. consts. are detd. for the ground-state transition at 819.69 cm^{-1} and for the 1st 2 hot bands, which are shifted to higher frequency. The l -doubling const. in the ν_7^1 state was $4.16 \pm 0.06 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$, and in the $\nu_2 + \nu_7^1$ state $2.96 \pm 0.04 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$.

C.A. 1977 87 N2

CO_2 (n.n.)

1978

Brodersen S.

✓

Proc. Int. Conf. Raman Spectrosc.,
6th 1978, 1, 215-18.

High-resolution rotational-vibrational
Raman spectroscopy.

CA 1980, 93, w2, 16025+



C3O2

22 Б221. Определение молекулярной симметрии квазилинейных молекул. Durig J. R., Kalasinsky V. F. Determination of the molecular symmetry of quasi-linear molecules. «J. Mol. Struct.», 1978, 46, 1—28 (англ.)

1978

состав
мол. формул,
геометрия

Измерены низкочастотные спектры КР и спектры поглощения в длинноволновой ИК-области ряда «квазилинейных» молекул: C_3O_2 (I), $(SiH_3)_2O$ (II) и D_3-II , SiH_3NCS (III) и D_3-III , SiH_3NCO (IV) и др. в газ. фазе и идентифицированы полосы скелетных деф. кол. На основании исследования обусловленной горячими переходами тонкой структуры Q-ветви низкочастотного деф. кол. для каждой молекулы определена потенциальная функция деф. кол. типа $V=Aq^4+Bq^2$, построен профиль потенциальной поверхности, найдена высота барьера и рассчитана равновесная величина соотв.щего валентного угла. Показано, что молекула I линейна в основном колебательном состоянии, II и IV нелинейны, а скелетное деф. кол. III является почти гармоническим. Сделан вывод, что предложенный метод исследования может быть успешно применен для определения строения молекул подобного типа и объяснения разногласий между данными электронно-дифракц. и спектроскопич. анализа.

2206-1/1X

□

2-1978, N22

М. Комарова

C_3O_2 $43H$ Durig J.R., et al. 1978
(SiH_3)₂O J. Mol. Struct., 1978, 46, 1-28
XIV-9030

SiH_3NCS
 SiH_3NCO

Determination of the molecular symmetry of quasi-linear molecules. «J. Mol. Struct.», 1978, 46, 1—28 (англ.)

В области $0-150\text{ см}^{-1}$ получены спектры комб. рас. недоокиси углерода, дисилоксана, дисилоксана- d_6 и силилизоцианата. Наблюдаемые полосы отнесены к $2\nu_7=120\text{ см}^{-1}$; $2\nu_{11}=76$ и 67 см^{-1} и $2\nu_{10}=63\text{ см}^{-1}$. В результате анализа вращательной структуры определены и интерпретированы 26, 16, 16 и 49 вращательных уровней энергии. Теоретич. исследование деф. кол. квазилинейных молекул выполнено в предположении, что их можно рассматривать отдельно от других колебаний. Потенц. ф-ция зависит от двух вырожденных безразмерных координат $q_1=q\cos\varphi$ и $q_2=q\sin\varphi$, может иметь один или два минимума и записывается в виде $V=Aq^4+Bq^2$. Постоянные A и B равны (см^{-1}).

ⓧ

Р.1979, N1

0,728; 1,07; 0,973 и 0,858 и —6,40; —21,9; —19,2 и —12,5. Углы, характеризующие отклонение от линейности, равны $10,2^\circ$; 149° и $>152^\circ$. Получены спектр комб. рас. и далекий ИК-спектр силилизотиоцианата, не имеющий вращательной структуры. Частота деф. кол. равна 66 см^{-1} , а частота обертона — 131 см^{-1} . Анггармоничность отсутствует, и скелет Si—Ni—C является линейным. М. А. Ковнер

C3O2

ammun 6347

1978.

дискр.
сигнатура,
гросс.
дискр

Ginsberg A. P., et al.

J. Chem. Phys., 1978,
68 (11), 5231-43

C3O2

1978

378

89: 823.1c Diode laser analyses of the $3\nu_7^{1f} + \nu_2 \leftarrow 2\nu_7^0$ and $4\nu_7^0 + \nu_2 \leftarrow 3\nu_7^{1f}$ Q branches of carbon suboxide. Jennings, D. E.; Hillman, J. J.; Weber, W. H. (Goddard Space Flight Cent., NASA, Greenbelt, Md.). *Opt. Lett.* 1978, 2(6), 157-9 (Eng). Doppler-resoln.-limited diode-laser spectra were obtained of 2 Q branches in the $\nu_2 + \nu_7$ hot-band series of C₃O₂: the $3\nu_7^{1f} + \nu_2 \leftarrow 2\nu_7^0$ transition at 849.81 cm⁻¹ and the $4\nu_7^0 + \nu_2 \leftarrow 3\nu_7^{1f}$ transition at 865.85 cm⁻¹. Anal. of the latter indicates an anomalous neg. centrifugal distortion term for the $4\nu_7^0 + \nu_2$ state, that leads to a band head in the Q branch. Obsd. and calcd. mol. consts. are compared for 8 transitions in the ν_2 region of C₃O₂.

M. N.

C.A. 1978, 22, N10

1978

C₃O₂

M.N.

XIV-9222

89: 171422f The ν_2 , $\nu_2 + 2\nu_7^0$, and $2\nu_7^0$ Raman band-accumulations of carbon suboxide. Lolck, Jens Erik; Brodersen, Svend (Dep. Chem., Aarhus Univ., Aarhus, Den.). *J. Mol. Spectrosc.* 1978, 72(3), 445-62 (Eng). The $\nu_2, \nu_2 + 2\nu_7^0$ Raman band-accumulations of C₃O₂ were photographed with a resolu. of 0.25 cm⁻¹, using 50 torr sample pressure without serious polymn. Each of the 3 bands is accompanied by series of hot bands, as expected $\nu_2 + \nu_7, \nu_2 + 2\nu_7$, due to the extremely low, highly anharmonic ν_7 fundamental vibration, forming a complex band-accumulation. The unresolved Q-branches in the ν_2 and $\nu_2 + 2\nu_7^0$ band-accumulations were assigned and utilized, in conjunction with IR and microwave data, to det. the ν_7 energy levels in the ground state and in the ν_2

state. The Q-branch of the ν_2 fundamental band was resolved and analyzed, yielding $\nu_2 = 787.72 \pm 0.05$ cm⁻¹. The results obtained are in excellent agreement with theor. predictions by W. H. Weber (1977).

C. A. 1978, 29, N20

С₃О₂

9 Б213. Скопления полос ν_2 , $\nu_2+2\nu_7^0$ и $2\nu^0$ комбинационного рассеяния света С₃О₂. LolckJens-Erik, Brodersen Svend. The ν_2 , $\nu_2+2\nu_7^0$, and $2\nu_7^0$ Raman band-accumulations of С₃О₂. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 72, № 3, 445—462 (англ.)

Измерен в области частот от 50 до 1010 см⁻¹ с разрешением 0,25 см⁻¹ спектр КР С₃О₂ вблизи колебательных полос ν_2 , $\nu_2+2\nu_7^0$ и $2\nu_7^0$. В дополнение к этим полосам найдены также колебательные полосы КР ν_1 , $\nu_2-2\nu_7^0$, ν_5^1 , $2\nu_5^0$ и $2\nu_8^0$. На полосы ν_2 , $\nu_2+2\nu_7^0$ и $2\nu_7^0$ наложены серии горячих полос, связанных с низким по частоте высокоангармоничным основным колебанием ν_7 . Из анализа хорошо разрешенной структуры полосы ν_2 определена частота $\nu_2=787,72(3)$ см⁻¹ и разности вращательных постоянных $\Delta B=-8,40(15) \cdot 10^{-4}$ см⁻¹ и постоянных центробежного искажения $\Delta D=-1,75(20) \cdot 10^{-8}$ см⁻¹. Полученные данные находятся в хорошем согласии с величинами, недавно вычисленными на основе теор. представлений.

С. Н. Мурзин

Ж. 1979, № 9

1978
XIV-9222

1978

C₃O₂

м.п.; Л.

XIV-9229

6 Д456. Сложные полосы комбинационного рассеяния ν_2 , $\nu_2+2\nu_7$ и $2\nu_7$ C₃O₂. Lolck Jens-Erik, Brodersen Svend. The ν_2 , $\nu_2+2\nu_7$, and $2\nu_7$ Raman band-accumulations of C₃O₂. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 72, № 3, 445—462 (англ.)

С использованием фотографич. регистрации получены спектры комб. рас. газообразной C₃O₂ в области колебаний ν_2 и $2\nu_7$ с разрешением 0,25 см⁻¹. Исследования проведены при оптимальном с точки зрения величины сигнала и отсутствия полимеризации давл. 50 мм рт. ст. Приведены спектры и частоты наблюдаемых компонент сложной структуры. В области ν_2 спектры связаны с комбинацией этого колебания с переходами между уровнями колебания ν_7 при ν_7 , l_7 от 0 до 11 и изменением $\Delta\nu_7=0,2$. В области 50—180 см⁻¹ структура полосы связана с горячими переходами, ко-

9.1979, № 6

ления $2\nu_7$ такого же происхождения. Для интерпретации спектра использован гамильтониан, включающий вращательное движение и колебания ν_7 одновременно. Из анализа колебательной и вращательной структур с использованием данных по микроволн. и ИК-спектрам найдены колебательные частоты переходов и изменения вращательных постоянных B и D при колебательном возбуждении. Величины ΔB и ΔD хорошо согласуются с теоретич. предсказаниями. Рассчитаны энергетич. уровни колебания ν_7 в основном состоянии и при возбуждении ν_2 . Библ. 20.

М. Тонков

63112

Оттиски 6730

1978

21 Б55. Изоцианат циана и дициановый эфир: неэмпирическое изучение геометрий и электронных структур. Rosenberg Heidi, Olsen John F., Howell James M. Cyanogen isocyanate and dicyanoether: ab initio studies of geometries and electronic structures. «J. Mol. Struct.», 1978, 48, № 2, 249—258 (англ.)

переслать.

Δ E



Выполнены неэмпирич. расчеты в миним. гауссовом базисе ОСТ-3ГФ молекулы изоцианата циана NCNCO (I) и ее изомера — дицианового эфира NCOCN (II), а также изоэлектронной молекулы недоокиси углерода C_3O_2 (III). Проведена полная оптимизация геометрий I—III в предположении планарности этих молекул. Согласно расчету, равновесная конфигурация III линейна, а I — W-образна с длинами связей $R(\text{N}-\text{C}) = 1,16 \text{ \AA}$, $R(\text{C}-\text{N}') = 1,384 \text{ \AA}$, $R(\text{N}'-\text{C}') = 1,256 \text{ \AA}$, $R(\text{C}-\text{O}) = 1,176 \text{ \AA}$ и углами $\text{NCN}' = 176^\circ,1$, $\text{CN}'\text{C}' = 123^\circ$, $\text{N}'\text{C}'\text{O} = 168^\circ,7$. Барьер инверсии центрального азота составляет ~ 5 ккал/моль, причем инверсия сильно связана с изгибом фрагментов OCN и NCN . Расчетная равновесная конфигурация II аналогична таковой I и

Х. 1978, № 21

характеризуется параметрами $R(N-C)=1,159$ А, $R(C-O)=1,366$ А, $\angle OCN=175^{\circ},7$, $\angle OSC=111^{\circ},8$. Однако в отличие от довольно гибкой молекулы I II — весьма жесткая частица: барьер инверсии кислорода найден равным ≈ 50 ккал/моль, хотя, по всей вероятности, эта цифра преувеличена главным образом из-за дефектов, присущих миним. базису. Энергия изомеризации $\Delta E = E_{II} - E_I$ найдена равной ~ 7 ккал/моль. Приводятся орбитальные энергии (ОЭ) и результаты анализа заселенностей по Малликену для равновесной и линейной конфигураций I и II. Высшей занятой МО как I, так и II является МО π -типа с ОЭ 9,4 эв (I) и 11,0 эв (II). Расчетные дипольные моменты молекул I и II в их равновесных конфигурациях равны соотв. 2,38 и 1,42 D.

В. Я. Беспалов

ия
енно

$C_3O_2(nc)$

оттиск 7446

1978

структ. фактор,
длина связи
метод нейтрон.
дифракции

Walford L., et al.

Mol. Phys., 1978,
36 (6), 1581-1600.

C_3O_2

1979

Asbrink L, et al.

Int. J. Mass. Spectrom. and
Ion Phys. 1979, 32, N2, 93-6.

A.P.

coll. N2-111

отпис 8712

1979

 C_3O_2

6 Б204. Микроволновое наблюдение колебательно-вращательного спектра неполярной молекулы C_3O_2 . Вигенин А. В., Корякин Е. Н., Крупнов А. Ф., Шапин С. М. Microwave observation of the vibration-rotation spectrum of the nonpolar C_3O_2 molecule. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 78, № 1, 181—184 (англ.)

На МВ-спектрометре с акустич. детектором измерен в области частот 545—595 Гц спектр колебательно-вращательной полосы $00000^{000}K_1-00000^{000}0^0$ молекулы C_3O_2 в газовой фазе. Выполнено отнесение для линий Q- и R-ветвей перехода ν_7 . Относит. точность измерения частот равна приблизительно 10^{-7} . Анализ вращательной структуры спектра выполнен с учетом и центробежного искажения. Получены след. значения молекулярных постоянных $\nu_0-B'-D'-H=545007,524$ (32) Мгц, $B'-B''+2D'+3H'=28,55016$ (26) Мгц, $D'-D''+3H'=-27,54$ (58) гц, $H-H''=-0,00649$ (37) гц. С. Н. Мурзин

м.п. геолог-
рих-модуль

6026-9209
XIV-11X

2-1980. №6

Chemica

8712

1979

C₃O₂

11.11.11

91: 114892b Microwave observation of the vibration-rotation spectrum of the nonpolar carbon suboxide (C₃O₂) molecule. Burenin, A. V.; Karyakin, E. N.; Krupnov, A. F.; Shapin, S. M. (Inst. Appl. Phys., Gorky, USSR). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 78(1), 181-4 (Eng). The vibration-rotation band 0000000011←0 of C₃O₂ was directly obsd. for the 1st time in the microwave spectrum (545-595 GHz) studied by using a submm microwave spectrometer with a backward-wave oscillator and an acoustic detector. The spectrum was recorded at room temp. and at a pressure in the absorbing cell of ≈1 torr. Assignments are given for the Q- and R-branch lines of the transition 17. Rotation and centrifuged consts. are given.

6026-1117



CA, 1979, 9, 114

C₃O₂

М. Н.

1.979
3 Д426. Наблюдение колебательно-вращательного спектра неполярной молекулы C₃O₂ в микроволновой области. Microwave observation of the vibration-rotation spectrum of the nonpolar C₃O₂ molecule. Burenin A. V., Karyakin E. N., Kurnov A. F., Shapin S. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 78, № 1, 181—184 (англ.)

С помощью радиоспектрометра с лампой обратной волны и акустич. детектором исследован спектр молекулы C₃O₂ в диапазоне 545—595 ГГц. Идентифицированы линии Q-ветви с $J \leq 32$ колебательной полосы деформационного колебания ν_7 (≈ 18 см⁻¹). Определены значения вращательной и центробежных постоянных.
М. Р. Алиев

Оттиск 8712
XIV-9209

Ф. 1980. N3

отмечен 8265

1979

C_3O_2

(μ, ν, ν_i)

1. Д374. Высокора разрешенный ИК-спектр недоокиси углерода. $\nu_4 + 2\nu_7^0$ и $\nu_4 + 3\nu_7^1 - \nu_7^1$ полессы. High-resolution infrared spectrum of carbon suboxide. The $\nu_4 + 2\nu_7^1$ and $\nu_4 + 3\nu_7^1 - \nu_7^1$ bands. Cabana Aldee, Laplante P. Y. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 3, 440—446 (англ.)

Изучен ИК-спектр полос $\nu_4 + 2\nu_7^0 \leftarrow 0$ и $\nu_4 + 3\nu_7^1 \leftarrow \nu_7^1$ газа C_3O_2 , полученный с разрешением $0,018 \text{ см}^{-1}$. Приведена таблица частот зарегистрированных линий. На основании анализа полученных данных определены положения центров указанных полос, найдены вращательные постоянные и постоянные центробежного растяжения для колебательных уровней $\nu_4 + 2\nu_7^0$, $\nu_4 + 3\nu_7^{1f}$ и $\nu_4 + 3\nu_7^{1e}$. С привлечением литер. данных вычислена частота перехода $3\nu_7^1 \leftarrow 0$, равная $97,22 \text{ см}^{-1}$. Библ. 11. Н. Филиппов

XIV-9080a

9.1980.14

химический 8265

1979

C₃O₂

24 Б253. Инфракрасные спектры высокого разрешения субоксида углерода. Полосы $\nu_4+2\nu_7^0$ и $\nu_4+3\nu_7^1-\nu_7^1$. Cabana Aldee, Lapiente P. Y. High-resolution infrared spectrum of carbon suboxide. The $\nu_4+2\nu_7^0$ and

$\nu_4+3\nu_7^1-\nu_7^1$ bands. «J. Mol. spectrosc.», 1979, 75, № 3, 440—446 (англ.)

Измерены ИК-спектры поглощения молекулы C₃O₂ в области 1691—1630 см⁻¹ с высоким разрешением (0,018 см⁻¹). В области 1644 см⁻¹ идентифицирована полоса $\nu_4+2\nu_7^0$ и проведен ее анализ. Центры полос 1647,64 и 1648,80 см⁻¹ отнесены к e- и f-компонентам перехода $\nu_4+3\nu_7^1-\nu_7^1$. Рассчитаны молек. постоянные для каждого состояния. Соотв-щие центры полос равны: 1644, 1491(32) см⁻¹ для $\nu_4+2\nu_7^0$, 1654, 9594(68) см⁻¹ для $\nu_4+3\nu_7^1-\nu_7^1$ (e) и 1654, 9608(10) для $\nu_4+3\nu_7^1-\nu_7^1$ (f). Из полученного значения для центра полосы $\nu_4+3\nu_7^1-\nu_7^1$ и лит. данных найдено значение ν_0 для перехода $3\nu_7^1 \leq 0$, равное 97,220 см⁻¹. Аналогичный расчет проведен для полосы $2\nu_7^0$ ($\nu_0=60,716$ см⁻¹). Результаты обсуждены в сравнении с лит. данными.

С. Б. Осин

и.к. спектр
24-м.п.

20806-11X

X1979, N24

C₃O₂

ammonia 8265

1979

91: 11576x High-resolution infrared spectrum of carbon suboxide: the $\nu_4 + 2\nu_7^0$ and $\nu_4 + 3\nu_7^1 - \nu_7^1$ bands. Cabana, Aldee; Laplante, P. Y. (Dep. Chim., Univ. Sherbrooke, Sherbrooke, PQ Can. J1K 2R1). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 75(3), 440-6 (Eng). The IR spectrum of the $\nu_4 + 2\nu_7$ progression of C₃O₂ was recorded with a resolu. of ~ 0.018 cm⁻¹. Two bands of the progression were completely analyzed. The band centers obtained establish, when combined with previously published exptl. results, that $3\nu_7^1$ is 97.22 cm⁻¹ above the ground.

XIV-9080W

C. A. 1979, 91, N2

C₃O₂

summa 8324

1979

Кв. лех,
расчет

E

Castro E.A.

Int. J. Quant. Chem.,
1979, 15, 355-358.

C3O2

XIV-9229

10-76

12 Д355. Некоторые полосы комбинационного рассеяния C₃O₂. Some raman bands of C₃O₂. Lolck Jens-Erik, Brødersen Svend. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 2, 234—244 (англ.).

Получены спектры комб. рас. закиси углерода C₃O₂ при давл. 50 мм рт. ст. в области колебательных полос ν_1 , ν_5 , $2\nu_5$, $2\nu_6$ с разрешением 0,2—0,3 см⁻¹. Использование фотоаппар. регистрации с экспозициями до 100 ч и периодич. обновлением образца дало возможность отождествить структуру полос, связанную с присутствием горячих переходов и в ряде случаев выполнить отнесение вращательных переходов, частоты соответствующих колебательно-вращательных линий приведены. Определены колебательные частоты и некоторые вращательные постоянные.

М. Тонков

(di)

ф. 1042, к. 12

XIV-9229

1979

C3O2

22 Б211. Некоторые полосы комбинационного рассеяния C_3O_2 . Lolck J. - E., Brodersen S. Some Raman Bands of C_3O_2 . «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 2, 234—244 (англ.)

В спектре КР газ. недокси углерода C_3O_2 с высоким разрешением ($0,2-0,3 \text{ см}^{-1}$) изучены полосы ν_1 ($2196,9 \pm \pm 0,1 \text{ см}^{-1}$), ν_5 ($580,2 \pm 0,5 \text{ см}^{-1}$), $2 \cdot \nu_5$ и $2 \cdot \nu_6$. В области каждой полосы обнаружено много «горячих» полос, объясненных высокой ангармоничностью нормального колебания ν_7 . Более детально измерена изученная ранее полоса $\nu_2 + 2\nu_0$.

О. Г. Гаркуша

01; 11.17

X. 1979, № 22

C_3O_2

ommueu 4917.

1979.

(Di)

Nicolaisen F. M.
et al.

J. Mol. Struct., 1979,
52, 157 - 162.

(ver. C_3O_5 ; III)

1949

C₃O₂

И. К. Смирнов

12 Д375. Температурная зависимость ИК-спектров поглощения с преимущественным акцентом на дальнюю ИК-область. Примеры для C₃O₂ (20—100 см⁻¹) и анилина (20—60 см⁻¹). Nicolaisen Flemming M., Hansen E. Lykke. The temperature dependence of infrared absorption spectra, with special attention to the far-infrared region. Examples for carbon suboxide (20—100 cm⁻¹) and aniline (20—60 cm⁻¹). «Infrared Phys.», 1979, 19, № 2, 231—241 (англ.)

Изложена теория интенсивностей ~~линий~~ ИК-поглощения. Рассмотрена температурная зависимость суммарных интенсивностей полос и интенсивностей линий, соответствующих отдельным переходам. Особое внимание уделено дальней ИК-области, в которой выполняется условие $h\nu \approx kT$, где ν — текущая частота. Общие положения теории применены для анализа температурной зависимости колебательно-вращательных спектров, в частности, для анализа интенсивностей Q-ветвей колебательно-вращательных полос. Библ. 14. Н. Филиппов

ф. 1949/112

C₃O₂

U.K. Calkin

1979

91: 46821a The temperature dependence of infrared absorption spectra, with special attention to the far-infrared region. Examples for carbon suboxide (20-100 cm⁻¹) and aniline (20-60 cm⁻¹). Nicolaisen, Flemming M.; Hansen, E. Lykke (H. C. Orsted Inst., Univ. Copenhagen, Copenhagen, DK-2100 Den.). *Infrared Phys.* 1979, 19(2), 231-41 (Eng). The theory of the intensity of IR absorption lines is summarized. The temp. dependence of individual transitions and integrated band intensities are discussed, with special attention to the far-IR region, and a new integral theorem for pure rotational transitions is presented. Formulas for integrated Q-branch intensities are given, and the influence of temp. and anharmonicity is discussed. Finally the influence of temp. on authentic far-IR spectra of C₃O₂ (20-100 cm⁻¹) and PhNH₂ (20-60 cm⁻¹) is presented and discussed.

C.A. 1979, 9, 196

C3 O2

Оттиски 8594

1579

2 Д184. Теоретическое изучение фотодиссоциации C_3O_2 . A theoretical study on the photodissociation of C_3O_2 . Osamura Yoshihiro, Nishimoto Kichisuke, Yamabe Shinichi, Minato Tsutomu. «Theor. chim. acta», 1979, 52, № 4, 257—265 (англ.)

Обобщенным ограниченным методом Хартри-Фока в неэмпирич. приближении рассчитаны основное и ряд нижних возбужденных состояний молекулы C_3O_2 . Применялся миним. базис типа СТО-3ГФ. Возбужденные состояния описывались в рамках однократно возбужденных конфигураций. Фотодиссоциация происходит из второго возбужденного состояния Δ_u . Рассчитано сечение потенц. поверхности по пути распада на фрагменты $C_2O(^3\Sigma^-)$ и CO. Установлено, что фрагментация осуществляется путем изгиба линейной в основном состоянии молекулы.

Е. П. Смирнов

фрэнк-
диссоц

М. П.

Холестерис

9246-114

ар. 1980. N2

C₃O₂

Оттиски 8594
2 Б30. Теоретическое изучение фотодиссоциации
C₃O₂. Osamura Yoshihiro, Nishimoto Kichi-
suke, Yamabe Shinichi, Minato Tsutomu.
A theoretical study on the photodissociation of C₃O₂.
«Theor. chim. acta», 1979, 52, № 4, 257—265 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе
ОСТ-3ГФ с частичным учетом взаимодействия одновоз-
бужденных конфигураций рассчитаны сечения потен-

*фото-
диссоциации*



1973

0186-11X

Р.1380.112

циальной поверхности фотодиссоциации C_3O_2 с образованием C_2O и CO в трех нижних возбужденных состояниях $^3\Sigma_u^+$, $^3\Delta_u$ и $^1\Sigma_u^-$. Показано, что р-ция идет из 2-го возбужденного триплетного состояния $^3\Delta_u$. В ходе р-ции молекула C_3O_2 становится нелинейной, первоначально изменяется угол между связью $\text{C}=\text{O}$ и связью $\text{C}=\text{C}$, к-рая разрывается в результате реакции (φ), а потом и угол между валентными связями $\text{C}=\text{C}$ (θ). В равновесной геометрии для состояния $^3\Delta_u$ длина R связи $\text{C}=\text{C}$, к-рая разрывается в результате реакции, увеличивается до 1,5 Å (в основном состоянии 1,365 Å), $\theta = 164^\circ$, $\varphi = 130^\circ$, в переходном состоянии $R = 1,75$ Å, $\theta = 128^\circ$, $\varphi = 125^\circ$. Энергия переходного состояния превышает энергию равновесной конформации для состояния $^3\Delta_u$ на 12 ккал/моль. В результате реакции C_2O образуется в триплетном $^3\Sigma^-$ состоянии и является весьма активным интермедиатом, в частности, $\text{C}_2\text{O}(^3\Sigma^-)$ может реагировать с олефинами, в результате этой р-ции образуются аллены.

К. Я. Бурштейн

C302

Lammuea 87801

1979

Szentpály L.

(7)

Theor. Chim. Acta, 1979

52, 277-301.

Molecular Model Potentials:
Combination of Atomic Boxes

C₃O₂

Ommeck 844-j

1979

2
6

91:46813z Analysis of the P branch of the ν_6 fundamental of carbon suboxide. Weber, W. H.; Maker, P. D.; Peters, C. W. (Phys. Dep., Ford Motor Co., Dearborn, MI 48121 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 77(1), 139-42 (Eng). An anal. is presented of the ν_6 (π_u) band of C₃O₂. In the Fourier transform spectrum of the ν_6 region at a resolu. of 0.04 cm⁻¹ the peak absorption occurs near 550 cm⁻¹, which was the value reported for ν_6 in previous studies of this region. The high resolu. spectrum shows a series of Q branches beginning at 540 cm⁻¹ and extending to higher frequency. The peak near 540 cm⁻¹ is the ground state transition and the structure at higher frequency is due to hot bands. In an expanded plot of the region below the 1st Q branch, the series of nearly uniformly spaced lines is undoubtedly the P branch from the ground state transition. The J values can be unambiguously assigned by constraining the ground state consts. and requiring the band origin to be consistent with the position and shape of the unresolved Q branch.

C. A. 1979, 91, N6

C₃O₂

(11081)

отмечены 8441

2.1980.113

3 Б185. Анализ *P*-ветви фундаментальной полосы ν_6 недоокиси углерода. Weber W. H., Makor P. D., Peters C. W. Analysis of the *P* branch of the ν_6 fundamental of carbon suboxide. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 77, № 1, 139—142 (англ.)

На фурье-спектрометре с разрешением $0,04 \text{ см}^{-1}$ в области $530\text{--}570 \text{ см}^{-1}$ получен спектр C_3O_2 , приготовленной разложением малоновой к-ты. Начиная с 540 см^{-1} в сторону высоких частот идет серия четких *Q*-полос, самая низкочастотная из к-рых отнесена к основному переходу. Ряд линий с большей длиной волны отнесен к *P*-ветви ν_6 . Их обработка велась с учетом кубич. члена разложения и позволила выполнить отнесение по *J*. Отклонения расчетных волновых чисел от эксперимента в пределах $0,008 \text{ см}^{-1}$. Соотв-щие молек. постоянные $\nu_0 = 540,2365 \pm 0,0086$, $B' - B'' = (-1,739 \pm 0,123) \times 10^{-4}$, $D' - D'' = (-0,987 \pm 0,448) \times 10^{-8}$ и $H' - H'' = (-4,2 \pm 4,6) \times 10^{-1} \text{ см}^{-1}$. Отмечается, что полученное отриц. значение $B' - B''$, указывающее на увеличение момента инерции в верхнем состоянии, аномально для полосы перпендикулярного типа. Это объясняется изменением вида потенциальной функции при возбуждении колебаний ν_6 .

Л. В. Серебренников

C_3O_2

От 10 060

1980

1 Д386. Нежесткие деформации в субокиси углерода. Carbon suboxide, as a semirigid bender. Bunker P. R. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 80, № 2, 422—437 (англ.)

Развита модель деформационных колебаний молекулы C_3O_2 , в которой в отличие от предыдущих при изменении угла $C=C=C$ допускается возможность изменения длины связей $C=C$ и углов $C=C=O$. Описан гамильтониан, использованный для расчетов уровней колебательно-вращательной энергии молекулы при одновременном возбуждении НЧ-колебания деформаций группы $C=C=C$ ν_7 и других колебаний молекулы. Сравнением с эксперим. данными, полученными из ИК-спектров поглощения, определены параметры модели и барьер перехода через линейную конфигурацию. Показано, что возбуждение колебаний ν_1 и ν_5 не влияет на величину барьера, в то время как возбуждение ν_6 понижает его на 10—15 cm^{-1} . Равновесная конфигурация молекулы оказывается нелинейной с углом $C=C=C$ 157° и соответствующим барьером 33 cm^{-1} . Библ. 17. М. Т.

$Li; Mo$

Ф. 1984 N 1

C3O2

От 10060

1980

23 Б190. Субокись углерода как молекула с полужесткой деформацией. Bunker P. R. Carbon suboxide as a semirigid bender. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 80, № 2, 422—437 (англ.)

С использованием гамильтониана для модели с полужесткой деформацией (Bunker P. R., Lansberg B. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 67, 374) в предположении о том, что вместе с деформацией угла CCC меняется длина связи C—C и угол CCO, уточнены значения колебательно-вращательных уровней молекулы субокиси углерода C₃O₂. Расчет дал хорошее согласие с экспериментом, в частности, для значений вращательной постоянной B в зависимости от возбуждения деф. кол. CCC (ν_7), лучшее, чем при использовании модели с жесткой деформацией. Определена зависимость эффективной потенциальной ф-ции колебания ν_7 от возбужде-

молекул.
геометрия,
Барьер
минимумов
и

Х. 1980 № 23

ния колебаний ν_2 , ν_3 и ν_4 и показано, что возбуждение ν_3 и ν_4 увеличивает барьер перехода через линейную конфигурацию, тогда как возбуждение ν_2 уменьшает его. При возбуждении только колебания ν_7 барьер линейности равен 28 см^{-1} . Для истолкования этих фактов рассмотрена зависимость деформации угла ССС от элементов матрицы кинематич. коэф. G. Согласно сделанной оценке барьер линейности в истинной потенциальной ф-ции равен $33 \pm 5 \text{ см}^{-1}$. При этом равновесная конфигурация является изогнутой на центральном атоме углерода и равновесный угол ССС 157° .

А. Н. Курский

C₃O₂

uncert.
cm⁻¹

93: 15862b Carbon suboxide as a semirigid bender. Bunker, P. R. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 80(2), 422-37 (Eng). The semirigid bender Hamiltonian developed by B. and B. M. Landsberg (1977) is used to fit the rotation-vibration energy level sepns. in C₃O₂. The CC bond lengths and CCO bond angles are allowed to change with the CCC bending angle ρ . A very good fit to the energy levels is obtained and, in particular, the B values are systematically fitted better than when the rigid bender is used. The dependence of the effective CCC bending potential function on the vibration, ν_2 , ν_3 , and ν_4 is detd., and excitation of ν_3 or ν_4 raises the barrier to linearity whereas excitation of ν_2 lowers it. These results can be understood by considering the ρ dependence of the G -matrix elements. The barrier to CCC linearity in the zero-point vibrational state is 28 cm⁻¹ but until more data are available for the ν_1 , ν_5 , and ν_6 vibrations the true barrier cannot be precisely detd. However, it has been previously shown that the barrier is little affected by excitation of ν_1 or ν_5 , and that it is reduced by 10-15 cm⁻¹ by excitation of ν_6 . From these results the barrier to CCC linearity in the true bending potential function is 33 cm⁻¹ with an uncertainty of ~5 cm⁻¹. Thus the equil. structure is bent at the central C atom; the equil. CCC angle is 157°.

CA 1980 93 v2

1980
10060
[Carnegie]

C_3O_2

1980
4 Д86. Модификация энергий возбуждения для $\pi\pi^*$ -переходов в линейных молекулах, рассчитанных методом НАМ/3. Modification of HAM/3 excitation energies for $\pi\pi^*$ transitions of linear molecules. Chong Dela-но Р. «Can. J. Chem.», 1980, 58, № 16, 1687—1690 (англ.; рез. франц.)

Энергии возбуждения, рассчитанные на основе процедуры НАМ/3 для $\pi\pi^*$ -переходов в линейных молекулах, могут внутренне не согласовываться в пределах $\pm 0,6$ эв. В работе Асбринке и др. (Asbrink I. et al. «Chem. Phys.», 1978, 27, 169) эта погрешность исправлялась с помощью соотношений Рекнагеля (Recknagel A. «Z. Phys.», 1934, 87, 375) и требования соответствующего усреднения энергии $\pi\pi^*$ -возбуждения. В данной работе, основываясь на теории НАМ/3, получены аналитич. выражения для поправок к энергии, а также найдены поправки к ф-лам Рекнагеля. В качестве примера численно рассчитаны все семь линейных молекул, исследованных Асбринком и др. Точные выражения для поправок позволяют провести расчет возбужденных состояний с учетом конфигурац. взаимодействий, что продемонстрировано на примере молекулы C_3O_2 .

Ю. Л. Малинkevич

м.п.
расчет.

Ф.1581 N 4

1980

 C_3O_2

расчет

ЭН. ЭЛ. переход

(у)

5 Б84. Модификация энергий возбуждения для $\pi\pi^*$ -переходов в линейных молекулах, рассчитанных методом ВМ/3. Chong Delano P. Modification of HAM/3 excitation energies for $\pi\pi^*$ transitions of linear molecules. «Can. J. Chem.», 1980, 58, № 16, 1687—1690 (англ.; рез. франц.)

Проанализированы основы метода ВМ/3 (см. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 52, 63 и 1977, 52, 69) и получено выражение для расчета энергий $\pi-\pi^*$ электронных переходов в линейных многоатомных молекулах. Показано, что предложенная методика приводит к однозначным результатам, в то время как в стандартном методе ВМ/3 энергии электронных переходов определяются неоднозначно. Рассчитаны электронные спектры поглощения ряда молекул, а также с учетом конфигурац. взаимодействия рассчитаны энергии электронных переходов и вертикальные потенциалы ионизации для C_3O_2 . Получено хорошее колич. согласие с экспериментом.

К. Я. Бурштейн

x. 1981. N5

C3O2

ommuca 9070

1980

92: 101610d Carbon suboxide: the vibrational dependence of the ν_7 bending potential function. Fusina, L.; Mills, I. M. (Dep. Chem., Univ. Reading, Reading, Engl. RG6 2AD). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 79(1), 123-31 (Eng). Data on the vibrational energy levels and rotational consts. of C₃O₂ for the low-wavenumber bending mode ν_7 are reviewed, in the ground-state manifold, and in the ν_2^- , ν_3^- , ν_4^- , and $\nu_2 + \nu_4$ -state manifolds. Following the procedure developed by J. A. Duckett (1976), the data were inverted to give the effective bending potential in ν_7 for each of these 5 states. Values were obtained for various other parameters in the effective vibration-rotation Hamiltonian. The potential and rotational consts. in $\nu_2 + \nu_4$ are given to a close approxn. by linear extrapolation from the ground state through the ν_2 and ν_4 states.

2
7
P. H. 1980. 92, N12

C₃O₂

(*v_i*)

оттиски 9070 1980

12 Б229. Субокись углерода. Зависимость потенциальной функции от деформационного колебания ν_7 . Fusina L., Mills I. M. Carbon suboxide: the vibrational dependence of the ν_7 bending potential function. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 79, № 1, 123—131 (англ.)

На основе новых данных по спектрам сверхвысокого разрешения для полос ν_3 и $\nu_2 + \nu_4$ субокиси углерода, C₃O₂ (Fusina L. и др., «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 79, 101) и известных спектроскопич. данных для др. состояний определена зависимость энергий колебательных уровней, вращательных постоянных и постоянных

2-1980.1112

l -удвоения низкочастотного деф. кол. ν_7 от квантовых чисел ν_7 и l_7 при $\nu_i=0$ в $\nu_3=1$ и в состояниях $\nu_2=\nu_4=1$. Из анализа полученных результатов определена потенциальная ф-ция колебания ν_7 в основном состоянии и в состояниях ν_2 , ν_4 и ν_3 . Установленные зависимости значительно отличаются для различных колебательных состояний и для колебаний с большой амплитудой имеют необычный вид. Для всех состояний вычислены параметры потенциальной ф-ции и вращательные постоянные. Полученные данные согласуются с данными, полученными на основе модели жестких изгибных колебаний.

С. Н. Мурзин

7 Д408. Субокись углерода: зависимость потенциальной функции колебания ν_7 от колебательного возбуждения. Carbon suboxide. The vibrational dependence of the ν_7 bending potential function. Fusina L., Mills I. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 79, № 1, 123—131 (англ.)

Выполнен обзор данных по энергии колебательных уровней $\nu_7 = n$ и значениям вращательных постоянных молекулы C_3O_2 в этих состояниях при одновременном возбуждении колебаний ν_2 , ν_3 , ν_4 и $\nu_2 + \nu_4$, найденных из исследований ИК-спектров высокого разрешения и микроволн. измерений. Приведены таблицы этих величин. Предложенным ранее методом (Duckett J. A. et al «J. Mol. Spectr.», 1976, 63, 249) с потенциалом четвертой степени проведено численное решение уравнения Шредингера для деформационных колебаний ν_7 при возбуждении других колебаний. Сравнением с опытными данными определены параметр потенциала. Для всех колебательных состояний потенц. функция имеет барьер для перехода через линейную конфигурацию, высота которого существенно зависит от типа возбужденного колебания и меняется от 0,1 до 65,3 см⁻¹. Расхождение рассчитанных частот колебания ν_7 с эксперим. данными связано с несовершенством модели. Библ. 15. М. Т.

М. П. J.

Ф. 1980. №

1980

Оттиск 9040

Commun 9069

1980

C₃O₂

92: 101824b Carbon suboxide: the infrared spectrum from 1800 to 2600 cm⁻¹. Fusina, L.; Mills, I. M.; Guelachvili, G. (Dep. Chem., Univ. Reading, Reading, Engl. RG6 2AD). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 79(1), 101-22 (Eng). The IR spectrum of C₃O₂ was recorded from 1800 to 2600 cm⁻¹ at a resolu. of 0.003 cm⁻¹. About 7% of the ~40,000 lines obsd. were assigned and analyzed and belonged to 36 different bands. Most of these are assocd. with the fundamental ν_3 , at 2289.80 cm⁻¹, and the combination band $\nu_2 + \nu_4$, at 2386.61 cm⁻¹, each of which give rise to a system of sum bands, difference bands, and hot bands involving the low-wave no. fundamental ν_1 at 18 cm⁻¹. A few other tentative assignments were made. The bands were analyzed for vibrational and rotational const.

u.n; ν_1

@ A. 1980. 92 N/12

C₃O₂

(vi)

2.1380.11/2

12 Б230. Субокись углерода. Инфракрасный спектр от 1800 до 2600 см⁻¹. Fusina L., Mills I. M., Guelachvili G. Carbon suboxide. The infrared spectrum from 1800 to 2600 cm⁻¹. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 79, № 1, 101—122 (англ.)

1980

На фурье-интерферометре в области частот от 1800 до 2600 см⁻¹ с разрешением около 0,003 см⁻¹ измерен ИК-спектр субокиси углерода, C₃O₂. Анализ спектра выполнен с учетом квартичных и секстичных эффектов центробежного искажения и *l*-удвоения. Из 40 000 зарегистрированных линий идентифицировано около 3000, они отнесены к 36 различным колебательным полосам. Большая часть линий приписана основному колебанию ν_3 около 2289,80 см⁻¹ и составной полосе $\nu_2 + \nu_4$ около 2386,61 см⁻¹. Спектр содержит суммарные, разностные и горячие полосы с участием низкочастотного деформационного колебания ν_7 (18,256 см⁻¹). На основе полученных данных для всех полос определены вращательные постоянные, квартичные и секстичные постоянные центробежного искажения при различных значениях квантового числа колебания ν_7 . Определены эффективные постоянные *l*-удвоения для различных колебательных состояний.

С. Н. Мурзин

C₃O₂

Оттиск 9069

1980

7 Д407. Субокись углерода: ИК-спектр от 1800 до 2600 см⁻¹. Carbon suboxide. The infrared spectrum from 1800 to 2600 cm⁻¹. Fusina L., Mills I. M., Gue-lachvili G. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 79, № 1, 101—122 (англ.)

м.п.; Л.

С помощью фурье-спектрометра получены спектры ИК-поглощения газообразной C₃O₂ в области 1800—2600 см⁻¹ с разрешением 0,003 см⁻¹. Измерены частоты и выполнена интерпретация нескольких тысяч колебательно-вращательных линий полос ν_3 , $\nu_2 + \nu_4$ и сопутствующих им комбинаций с НЧ-колебанием ν_7 с частотой 18 см⁻¹. Приведены частоты линий. Из анализа частот линии найдены колебательные частоты и вращательные константы молекулы в основном и возбужденных колебательных состояниях. Определены константы l-удвоения, отмечены случаи локальных резонансов, обусловленных высшими членами гамильтониана. Ряд линий отнесен предположительно к полосам $\nu_1 + \nu_7$, $\nu_2 + \nu_5 + \nu_6$ и др. Библ. 17. М. Т.

ф. 1980. № 7

C_3O_2

1980

Harris F.E., et al

Chem. Phys., Lett., 1980,
72, N2, 315-18.

кв. мех.
раств
жл. соед.



1cm C_2H_5N) III

1980

C_3O_2

гуг. R.

Theor. chim. acta, 1980, 57,
N2, 107-30

номер.
м. связи
(у)



сст. R2-III

C₃O₂

XIV - 9041

1980

14 Б212. ν_7 колебательные состояния C₃O₂. Уточнение по методу наименьших квадратов энергий и вращательных постоянных $\nu_7\nu_7^{17}$ с использованием модели с жесткой деформацией. Weber W. H. The ν_7 vibrational states of C₃O₂. A least-squares fit of the rigid-bender model to the $\nu_7\nu_7^{17}$ energies and rotational constants. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 79, № 2, 396—415 (англ.)

2i

Модель с жесткой деформацией использована для анализа низкочастотного деф. кол. большой амплитуды ν_7 молекулы C₃O₂ (I). Рассмотрены различные параметризации потенциальной функции колебания ν_7 . Найдено, что лучшую сходимость дает простой двухчленный степенной ряд. С этой параметризацией, используя уточненные по методу НК значения энергий и постоянных В вращательных переходах, определена потенциальная функция ν_7 для основного состояния, а также для состояний, в к-рых возбуждены колебания ν_2 , ν_3 , ν_4 , ν_6 , $2\nu_6$, $\nu_1+\nu_3$, $\nu_1+\nu_4$, $\nu_2+\nu_3$, $2\nu_2+\nu_4$. Показано, что воз-

№ 1980 N14

возбуждение этих колебаний оказывает в нек-рых случаях сильное влияние на потенциал v_7 . В основном состоянии этот потенциал имеет барьер 29 см^{-1} при линейной конфигурации I, при возбуждении $v_1 + v_3$ барьер возрастает до 79 см^{-1} , тогда как при возбуждении $2v_2 + v_4$ барьер исчезает. Равновесный потенциал с барьером $35,6 \text{ см}^{-1}$ и минимумом при $\alpha = 11,4^\circ$, где 2α — угловое отклонение от линейности, определен корректировкой потенциала основного состояния на эффекты движения нулевой точки нормальных колебаний $v_1 \dots v_6$. Выбранная модель точно предсказывала термы центробежного искажения четвертого и шестого порядка для низколежащих состояний $v_7 v_7$. В расчеты терма четвертого порядка включено перекрывание I-типа второго порядка. Эффект этого перекрывания, наиболее существенный для состояний $v_7 \geq 2$, объясняет известное отриц. значение терма D для состояния $v_2 + 4v_7^0$. А. Н. Курский

C₃O₂

(ν_7)

1705-11X

92: 101786r The ν_7 vibrational states of carbon suboxide (C₃O₂). A least squares fit of the rigid-bender model to the ν_7 energies and rotational constants. Weber, Willes H. (Phys. Dep., Ford Motor Co., Dearborn, MI 48121 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 79(2), 396-415 (Eng). The rigid-bender model is used to treat the large-amplitude, low-frequency, bending vibration ν_7 of C₃O₂. Different parameterizations of the bending potential function are considered, and a simple 2-term power series gives the best fit. With this parameterization, using a least-squares fit to energies and B values, the ν_7 potential function is detd. for the ground state as well as for the states in which ν_2 , ν_3 , ν_4 , ν_6 , $\nu_1 + \nu_3$, $\nu_1 + \nu_4$, $\nu_2 + \nu_3$, and $2\nu_2 + \nu_4$ are excited. The excitation of other vibrations has in some cases a drastic effect on the ν_7 potential. In the ground state the potential has a 29 cm⁻¹ barrier at the linear position, in $\nu_1 + \nu_3$ the barrier increases to 79 cm⁻¹, while in $2\nu_2 + \nu_4$ the barrier vanishes. An equil. potential is detd. by correcting the ground state potential for the effects of zero-point motion of the normal vibrations $\nu_1, \dots, \nu_6$. This potential has a 35.6-cm⁻¹ barrier with a min. at $\alpha = 11.14^\circ$, where 2α is the angular deviation from linearity. Second-order l -type coupling is included in the calens. of the quartic terms. The effects of this coupling, which are most pronounced for the $\nu_7 \geq 2$ states, adequately explain the neg. D term recently reported for the $\nu_2 + 4\nu_7^0$ state.

1980

C.A.-1980. 92, N12

C₃O₂

J₇

nomer. res.
no cm

C.A. 1980. 22
N8

92: 66954v The v_7 vibrational states of carbon suboxide (C₃O₂). A least squares fit of the rigid bender model to the v_7 energies and rotational constants. Weber, Willes H. (Phys. Dep., Ford Motor Co., Dearborn, MI 48121 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1989, 79(2), 396-415 (Eng). The rigid-bender model was used to treat the large-amplitude, low-frequency, bending vibration v_7 of C₃O₂. Different parameterizations of the bending potential function are considered, and a simple 2 term power series gives the best fit. With this parameterization, using a least-squares fit to energies and B values, the v_7 potential function is detd. for the ground state as well as for the states in which v_2 , v_3 , v_4 , v_6 , $2v_6$, $v_1 + v_3$, $v_1 + v_4$, $v_2 + v_3$, and $2v_2 + v_4$ are excited. The excitation of other vibrations has, in some cases, a drastic effect on the v_7 potential. In the ground state, the potential has a 29 cm⁻¹ barrier at the linear position, in $v_1 + v_3$ the barrier increases to 79 cm⁻¹, while in $2v_2 + v_4$ the barrier vanishes. An equil. potential was detd. by correcting the ground state potential for the effects of zero-point motion of the normal vibrations v_1 , ..., v_6 . This potential has a 35.6-cm⁻¹ barrier with a min. at $\alpha = 11.14^\circ$, where 2α is angular deviation from linearity. The model accurately predicts the quartic and sextic centrifugal distortion terms for the low-lying v_7v_7 states. Second-order l -type coupling is included in the calcs. of the quartic terms. The effects of this coupling, which are most pronounced for the $v_7 \geq 2$ states, adequately explain the neg. D term recently reported for the $v_7 + 4v_7^0$ state.

1980

1306-11X

C3O2

XIV-9041

1980

8 Д351. Колебательные состояния ν_7 C_3O_2 . Определение параметров модели жесткой деформации из энергии уровней $\nu_7\nu_7'$ и вращательных постоянных методом наименьших квадратов. The ν_7 vibrational states of C_3O_2 . A least-squares fit of the rigid-bender model to the $\nu_7\nu_7'$ energies and rotational constants. Weber Willes H. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 79, № 2, 396—415 (англ.)

м.п.; д.; №.

С использованием модели жесткой деформации рассмотрены НЧ-колебания ν_7 молекулы C_3O_2 . В адиабатич. приближении эти колебания рассмотрены также при условии возбуждения остальных колебаний молекулы. Потенц. ф-ция колебаний ν_7 задана в виде двучленного ряда или лоренцевского и гауссовского барьера с членом отталкивания 4-й степени. Получены

Ф 1980 к 8

параметрич. выражения, связывающие молекулярные параметры со степенью возбуждения колебания ν_7 . По литературным спектроскопич. данным рассчитаны параметры потенциальных кривых колебания ν_7 в основном состоянии молекулы и при возбуждении других колебаний, отмечено сильное влияние последних на форму кривой. В основном состоянии барьер составляет 29 см^{-1} , в состоянии $\nu_1 + \nu_3$ 79 см^{-1} , в состоянии $2\nu_2 + \nu_4$ барьер равен нулю. Для равновесной конфигурации барьер составляет $35,6 \text{ см}^{-1}$; минимум потенц. энергии соответствует $5,57^\circ$ отклонения от линейности. Развита модель - хорошо описывает зависимость вращательной постоянной B от колебательного возбуждения и центробежные эффекты. Библ. 26. М. Т.

C₃O₂

Оттиск 12334 1981

5 Б326. Колебательные эффекты Реннера — Теллера в инфракрасном спектре субоксида углерода. Halonen L., Mills I. M., Kauppinen J. Vibrational Renner—Teller effects in the infrared spectrum of carbon suboxide. «Mol. Phys.», 1981, 43, № 4, 913—931 (англ.)

Измерены ИК-спектры субоксида углерода C₃O₂ с разрешением 0,01 см⁻¹ в области 400—700 см⁻¹. В спектре наблюдается полоса параллельного типа в интервале 580—650 см⁻¹ с центром при 597,66 см⁻¹ и кантом *P*-ветви при 590,49 см⁻¹. Полоса отнесена к колебанию $\nu_5 + \nu_7$ ($\nu_7 = 18$ см⁻¹) молекулы C₃O₂ полученное из анализа вращательной структуры значение B_u для основного состояния, равное 0,075551(15) см⁻¹ очень хорошо согласуется с лит. данными. В той же области спектра идентифицирован ряд горячих полос с центрами 607,82; 614,47; 615,73 и 619,55 см⁻¹, проанализирована их вращательная структура и рассчитаны вращательные постоянные для верхних состояний. Из анализа полосы $\nu_5 + \nu_7$ рассчитан эффективный

ν_i , мл;

X. 1982, 19, 15.

деформац. Пт ν_7 в состоянии ν_5 . Обнаружено расщепление Пт, аналогичное эффекту Реннера — Теллера в электронной спектроскопии, связанное с движением большой амплитуды по координате g_7 и взаимодействием колебаний ν_5 и ν_7 . Отмечено, что вид усредненного Пт в состоянии ν_5 подобен потенциалу ν_7 в основном состоянии, а расщепление для классич. точек возврата достигает 4 см^{-1} . В области $530\text{—}570 \text{ см}^{-1}$ измерена система полос ν_6 , из к-рых проанализирована лишь основная полоса $\nu_6(\Pi_u)$ с центром при $540,221 \text{ см}^{-1}$.

С. Б. Осин

C_3O_2

Оттиск 12384

1981

3 Д412. Колебательные эффекты Реннера—Теллера в ИК-спектре субокси углерода. Vibrational Renner—Teller effects in the infrared spectrum of carbon suboxide. Halonen L., Mills I. M., Kauppinen J. «Mol. Phys.», 1981, 43, № 4, 913—931 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра получены спектры ИК-поглощения паров C_3O_2 при давл. 0,2—2,5 мм рт. ст. в области 400—700 cm^{-1} с разрешением 0,01 cm^{-1} . Приведены определенные с точностью $\sim 10^{-3}$ cm^{-1} частоты колебательно-вращательных линий полосы ν_6 и наблюдаемой в комбинации с нечетным числом квантов колебания ν_7 полосы ν_5 . Описано взаимодействие колебаний ν_5 и ν_7 , приводящее к расщеплению ν_5 , аналогичному эффекту Реннера—Теллера в электронных спектрах, и влияние l -удвоения на вращательную структуру полос ν_5 и ν_6 . С использованием микроволн. данных для основного состояния и состояния с возбуждением ν_7 определены колебательные частоты и изменения вращатель-

ν_i

ср 1982, 18, № 3.

ных постоянных при возбуждении в состояния ν_6 и $\nu_5 + n\nu_7$ ($n=1\div 4$). Восстановлен эффективный потенциал деформационных колебаний ν_7 при возбуждении колебания ν_5 . Его форма близка к потенциалу в основном состоянии, если не учитывать колебательного эффекта Реннера—Теллера, приводящего к расщеплению состояний Σ_u^+ и Σ_u^- . Библ. 14. М. В. Т.

C_3O_2

Оттиск 11857

1981

11 Д62. О потенциале деформационных колебаний (ν_7) субоксида углерода. On the carbon suboxide bending potential (ν_7). Lozes Richard L., Sabin John R., Odderhede Jens. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 86, № 2, 357—364 (англ.)

geom; E,
Luo, M. A.

В приближении МО ЛКАО исследована возможность неэмпирич. получения достоверных расчетных данных о структуре молекулы C_3O_2 и ее энергии на основе предложенного авторами потенциала $V(\alpha)$, обладающего хорошей асимптотикой. Найдены два минимума потенциала с барьером $71,1 \text{ см}^{-1}$, что находится в хорошем согласии со спектроскопич. значениями. Полученные данные по геометрии сравниваются с результатами других авторов. В. В. Росихин

ф. 1981, 18, N 11.

Оптика 11857 1981

C₃O₂

(деформационный потенциал (v₇))

22 Б96. Деформационный потенциал (v₇) для недо-
киси углерода. Lozes Richard L., Sabin
John R., Oddershede Jens. On the carbon sub-
oxide bending potential (v₇). «J. Mol. Spectrosc.», 1981,
86, № 2, 357—364 (англ.)

Ограниченным методом Хартри—Фока рассчитан Пт
деф. кол. v₇ молекулы C₃O₂. Использован ~~базис~~ из
сгруппированных гауссовых ф-ций с включением поля-
ризац. d-ф-ций на каждом атоме. Геометрич. парамет-
ры первоначально оптимизированы для линейной кон-
фигурации; найденные параметры далее были фикси-
рованы при варьировании валентного угла α. Показа-
но, что деформац. Пт в зависимости от угла α
обладает минимумом при α=149°. Величина потенци-
ального барьера при α=180° составляет 71 см⁻¹. Пред-
ложено аналитич. представление деформац. Пт с пра-
вильным асимптотич. поведением. Рассчитанные высота
и ширина барьера слегка превышают величины, опре-
деленные по спектроскопич. данным. Обсуждены воз-
можные причины этих отклонений. Проведено сравне-
ние с результатами др. неэмпирич. расчетов.

Б. И. Жилинский

X.1981/22,19АБ

C3 O2

omitted 11857

1981

94: 147676z On the carbon suboxide bending potential (ν_7).
Lozes, Richard L.; Sabin, John R.; Oddershede, Jens (Quantum
Theory Project, Univ. Florida, Gainesville, FL 32611 USA). *J.*
Mol. Spectrosc. 1981, 86(2), 357-64 (Eng). An ab initio
LCAO-MO-SCF calcn. of the ν_7 bending potential of C₃O₂ is
presented. The potential has a double min. with a barrier of
71.1 cm⁻¹, and min. energy at a bending angle of 15.5°, in
reasonable agreement with results obtained from spectroscopic
measurements.

kb, max,
pacer
✓

C. A. 1981. 92 N 18

C_3O_2

1981

Winnewisser M.

спектр
гомогенная Faraday Discuss.
Chem. Soc., 1981,
N 71, 31-55.

(см. KCN; III)

C_3O_2

1981

Winnewisser M., et al.

V. i. u. n. Z. Naturforsch., 1981,
A 36, N 8, 819-830.

● (ср. C_3OS ; III).

C_3O_2

/ommuck 16011/

1982

лазерный
спектр

Eng R.S., Ku R.T.,

Spectrosc. Lett., 1982,

15, N10-11, 803-929.

C₃O₂

DM. 14818

1982

1 Д506. Исследование микроволнового колебательно-вращательного спектра недоокиси углерода (C₃O₂) в диапазоне 300—1000 ГГц. Microwave study of vibration-rotation spectrum of carbon suboxide C₃O₂ in the 300- to 1000-GHz frequency range. Karyakin E. N., Крупнов А. Ф., Шапин С. М. «J. Mol. spectrosc.», 1982, 94, № 2, 283—301 (англ.)

В диапазоне 300—1000 ГГц исследован микроволновый спектр молекулы C₃O₂. Идентифицирована вращательная структура колебательных полос ν_7 , $2\nu_7-\nu_7$, $3\nu_7-2\nu_7$ и $4\nu_7-3\nu_7$ с центрами при 547 295, 834 919, 1 034 639 и 1 191 642 ГГц. Из частот 256 линий для модели линейной молекулы определены значения 41 параметра, включая значения вращательных постоянных, постоянных квартичного, секстичного и октичного центробежного искажений, постоянной l -удвоения и ее зависимости от колебательно-вращательного состояния. Приведена матрица корреляции для постоянных. М. Р. Алиев

М. П.

ср. 148.3, 18, м1

C_3O_2

Оттиск 14818

1982

5 Б288. Микроволновое исследование колебательно-вращательного спектра недоокиси углерода C_3O_2 в области частот от 300 до 1000 ГГц. Microwave study of vibration-rotation spectrum of carbon suboxide C_3O_2 in the 300- to 1000-GHz frequency range. Karyakin E. N., Krupnov A. F., Shapin S. M. «J. Mol. spectrosc.», 1982, 94, № 2, 283—301 (англ.)

На МВ-спектрометре РАД измерен в области частот 300—1000 ГГц колебательно-вращательный спектр по лос $\nu_7^1 \leftarrow 0$, $2\nu_7^2 \leftarrow \nu_7^1$, $3\nu_7^3 \leftarrow 2\nu_7^2$ и $4\nu_7^4 \leftarrow 3\nu_7^3$ недоокиси углерода, C_3O_2 . На основе частотных данных для 256 переходов с учетом эффектов центробежного искажения и l -расщепления определены спектроскопич. постоянные в основном и четырех возбужденных колебательных состояниях ν_7 . Для всех постоянных определена корреляционная матрица. Вращательные постоянные в основном и возбужденных колебательных

ν_i, m, n

Х. 1983, 19, 15.

состояниях $\nu_7^1, 2\nu_7^2, 3\nu_7^3, 4\nu_7^4$ соотв., равны: $B =$
 $= 2265,358915(302), 2287,777323(303), 2306,596033(308),$
 $2323,52361(33)$ и $2339,2146(15)$ МГц, а колебательные
частоты возбужденных состояний соотв. равны $\nu_0 =$
 $= 547295,3332(69), 834919,4061(81), 1034639,296(27)$ и
 $1191642,9(14)$ МГц. С. Н. Мурзин

C₃O₂

Ommuck 14818.

1982

97: 153254p Microwave study of vibration-rotation spectrum of carbon suboxide C₃O₂ in the 300 to 1000 GHz frequency range. Karyakin, E. N.; Krupnov, A. F.; Shapin, S. M. (Inst. Appl. Phys., Gorkiy, USSR). *J. Mol. Spectrosc.* 1982, 94(2), 283-301 (Eng). The submillimeter wave spectrum of the C₃O₂ mol. was investigated within the 300- to 1000-GHz range. The measured frequencies include 256 lines belonging to the ground vibrational state and to 4 excited vibrational states of ν_7 . Rotational and centrifugal consts. and consts. of l splitting for the ground and excited states ν_7^1 , $2\nu_7^2$, $3\nu_7^3$, $4\nu_7^4$ as well as frequencies of purely vibrational transitions $\nu_7^1 \leftarrow 0$; $2\nu_7^2 \leftarrow \nu_7^1$; $3\nu_7^3 \leftarrow 2\nu_7^2$; $4\nu_7^4 \leftarrow 3\nu_7^3$ together with their correlation matrix were detd.

mm cmkmp

C. A. 1982, 97, N 18.

C₃O₂

1982

98: 24807t The force field of carbon suboxide. Murthy, A. S. N.; Ranganathan, Shoba (Dep. Chem., Indian Inst. Technol., New Delhi, 110016 India). *THEOCHEM* 1982, 7(3-4), 219-26 (Eng). The complete force field for C₃O₂ was evaluated. The optimum geometry, stretching and interaction force consts. were obtained from a combination of the CNDO/force MO method and the compliance const. formalism.

Chem. no cm-

C. A. 1983, 98, N4.

C_3O_2

1982

4 Д44. Силовое поле недоокиси углерода. The force field of carbon suboxide. Murthy A. S. N., Ranganathan Shoba. «J. Mol. Struct.», 1982, 90, № 3—4, Suppl.: «Theochem.», 7, № 3—4, 219—226 (англ.)

Из эксперим. данных по частотам колебаний вычислены гармонические силовые постоянные и коэф. влияния для молекулы C_3O_2 . Расчет этих величин выполнен также полуэмпирическим квантовохимич. методом ППДП. Результаты двух расчетов согласуются между собой.

М. Р. Алиев

Сил. пост.

№ 1983, 18, № 4.

C_3O_2

1982

7 Б101. Силовое поле молекулы C_3O_2 . The force field of carbon suboxide. Murthy A. S. N., Ranganathan Shoba. «J. Mol. Struct.», 1982, 90, № 3—4, 219—226 (англ.)

Для молекулы C_3O_2 выполнен полный расчет силового поля. Оптим. геометрия и силовые постоянные равновесной конфигурации рассчитаны станд. методом ППДП/2. Представлены оптим. геометрич. параметры ($C—C$ 1,287 Å, $C—O$ 1,234 Å, CCC 180°), внутреннего валентного силового поля, наблюдаемых и рассчитанных частот колебаний, а также распределения потенциальной энергии через вычисл. симметризованные коэф. влияния C_{ii} (матрица $C=F^{-1}$, где F — матрица силовых постоянных).

С. Долин

сил. пост.,
геометр.,
структура

х. 1983, 19, № 7

C₃O₂

1982

10 Б1310. Фотолиз C₃O₂ светом 193 нм УФ-лазера. Испускание света электронновозбужденными фрагментами C, CO и C₂. UV laser photolysis of C₃O₂ at 193 nm: emission from electronically excited C, CO and C₂. Umemoto M., Shinohara H., Nishi N., Shimada R. «J. Photochem.», 1982, 20, № 4, 277—286 (англ.)

Исследованы спектры флуоресценции (Фл) электронно-возбужденных фрагментов CO и C, возникающих при фотодиссоциации (ФД) C₃O₂ при давл. 0,70 Торр в проточных условиях сфокусированным светом 193 нм импульсного лазера на Ar [спектральная ширина ~170 см⁻¹, длительность импульса 10 нс, энергия ~100 мДж, поток фотонов в фокусном пятне ~10²⁵ фотон/(см²·с)]. Масс-спектрометрич. анализ конечных продуктов фотолиза C₃O₂ в статич. условиях при давл. 1 Торр (облучение 3000 импульсов) обнару-

фотолиз

Ж. 1983, 19, №10

живает полное разл. C_3O_2 до CO и углеродсодержащего осадка на стенках фотохим. реактора. В спектре Фл 4-я положит. система $\text{CO}(A^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+)$ при 200—250 нм обусловлена образованием колебательно-возбужденного фрагмента $\text{CO}(X^1\Sigma^+)$, к-рый далее резонансно возбуждается светом 193 нм в состояние $A^1\Pi$ ($v'=1, 4, 7$). Эмиссионная линия $\text{C}(3^1P^0 \rightarrow 2^1S)$ при 248 нм приписана двухступенчатому процессу. Сначала происходит двухфотонное образование $\text{C}(2^1D)$, к-рый затем резонансно возбуждается в состояние $\text{C}(3^1P^0)$. Наблюдалась также полоса Свана $\text{C}_2(d^3\Pi_g \rightarrow a^3\Pi_u)$, приписанная индуцированной столкновениями р-ции между фрагментами C и C_2O .

В. Е. Скурат

C3O2

[Dmmuck 15494] 1982

Winnewisser M., Peau W.

Vi.

Chem. Phys., 1982,
71, N3, 377-387.

C_3O_2

1983

Bunker P. R.

Annu. Rev. Phys.

Chem. 1983, 34, 59-78.

расчёт
колебаний
вращения
уровней
(обзор)

(см. CH_2 ; III)

C₃O₂

[Om. 17428]

1983

Электро-
Нограср.
газные

Luytsarev V. S., Spirido-
nov V. P., et al.,
J. Mol. Struct., 1983,
101, 11-2, 173-182.

C_3O_2

[om. 19659]

1983

Miller F. A.,

Proc. Indian Acad.
Sci. (Chem. Sci.), 1983,
92, N6, 563-587.

ангарм.
колеб.,
потенц.
ф-ция,
торзион.
колебан.

C3O2

1011. 172721

1983

колебат.
вращат.
гамма-
токиан
с внут-
ренней
вращением

Wierzbicki A., Koput J.,
et al.,

J. Mol. Spectrosc., 1983,
99, 102-115.



C_3O_2

1984

22 Б1095. Структура и гармонические частоты колебаний молекулы недоокиси углерода, найденные методами аналитического дифференцирования. Structure and harmonic vibrational frequencies of the carbon suboxide molecule using analytic derivative methods. Amos R. D. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 108, № 4, 347—352 (англ.)

Дано краткое описание эффективного метода организации аналитич. расчета первых и вторых пр-ных молек. интегралов по координатам ядер. Метод применен к расчету молекулы C_3O_2 в приближении ССП в базисах гауссовых орбиталей типов 6—31*-ГФ и 5s3p1d. Найдено, что равновесная конфигурация ядер линейной системы $O-C-C-C-O$ устойчива по отношению к малым смещениям из положения равновесия всех типов. Оценки геометрич. характеристик равновесной конфигурации и частот норм. кол. близки к экспериментально найденным в пределах точности приближения ССП.

В. И. Пупышев

расчет
колебл.

Х. 1984, 19, № 22

C₃O₂

1984

11 Д84. Расчет структуры и гармонических колебательных частот молекулы недоокиси углерода аналитическими методами производных. Structure and harmonic vibrational frequencies of the carbon suboxide molecule using analytic derivative methods. A m o s. R. D. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 108, № 4, 347—352 (англ.)

Изложен аналитич. вариант метода ССП МО ЛКАО, основанный на вычислении первых и вторых производных энергии по параметрам. Метод применен для расчета структурных параметров и гармонич. частот колебаний.

*Vi, м.п., геометр,
стр., расчет*

ср. 1984, 18, N 11

баний молекулы OCCSO с использованием двух базисов ($6-31 \text{ ГФ}^*$ и $5s3p1d$). Полученные значения для связей $\text{CC}=1,2691$ и $\text{CO}=1,1353 \text{ \AA}$ согласуются с эксперим. данными $\text{CC}=1,279$ и $\text{CO}=1,16 \text{ \AA}$. Однако вычисленные значения частот колебаний значительно ниже измеренных (расхождение достигает 280 см^{-1} для частоты 2197 см^{-1}), хотя расчеты подтверждают наличие очень низкой частоты изгибного колебания ($18,18 \text{ см}^{-1}$; изм.): расчет в базисе $5s3p1d$ для этой частоты дает величину $14,4 \text{ см}^{-1}$. Расчеты в обоих базисах дают наименьшую энергию для линейной конфигурации молекулы OCCSO , хотя из спектроскопич. данных известно, что равновесная конфигурация OCCSO является нелинейной ($\text{CCC}=160^\circ$). М. Р. Алиев

C_3O_2

[Om. 18311]

1984

лакунный
фотому

Bauer W., Meiser R.,
Becker K.H.,

J. Photochem., 1984,
24, N1, 99-102.

C_3O_2

Ом. 19186 1984

11 Д85. Полу жесткая деформационная модель для C_3O_2 . Вырожденное состояние ν_5 . C_3O_2 as a semirigid bender. The degenerate ν_5 state. Jensen Per. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 104, № 1, 59—71 (англ.)

Проведено обобщение полужесткого деформационного гамильтониана, предложенного для молекулы C_3O_2 Банкером (J. Mol. Spectrosc., 1980, 80, 422), с целью описания НЧ-колебаний ν_7 (деформационные колебания фрагмента ССС) при одновременном возбуждении ВЧ-колебаний ν_5 и ν_6 , описывающих деформацию фрагмента ССО. Модельный гамильтониан применен к описанию вращения и деформационных ν_7 колебаний в колебательно-возбужденном состоянии ν_5 молекулы $^{12}C_3^{16}O_2$. Получены оценки для параметров деформационного потенциала ССС в колебательном состоянии ν_5 . Е. А. Ж.

Jensen;

ср. 1984, 18, № 11

C_3O_2

От. 19186

1984

21 Б1190. C_3O_2 в полужесткой модели деформаций. Вырожденное состояние ν_5 . C_3O_2 as a semirigid bend: the degenerate ν_5 state. Jensen Per. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 104, № 1, 59—71 (англ.)

Полужесткая модель деф. кол. применена для построения гамильтониана, описывающего колебания молекулы C_3O_2 . Учтено влияние на колебат. движение большой амплитуды фрагмента ССС (ν_7) возбужденных состояний, связанных с колебаниями фрагментов ССО (вырожденные колебания ν_5). Анализ проведен в рамках группы молек. симметрии C_{2v} (M). На основе построенной модели по эксперим. данным подобраны параметры потенциальной ф-ции, описывающей деформ. колебания ССС. Из-за недостаточного объема эксперим. результатов полностью восстановить Пт не удастся, поэтому рассмотрены два предельных частных случая связи колебаний ν_5 и ν_7 . А. В. Немухин

$\nu_i, M.N;$

X. 1984, 19, ~21

C₃O₂

(Am. 19186) 1984

100: 128933g Carbon suboxide (C₃O₂) as a semirigid bender: the degenerate ν_5 state. Jensen, Per (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Mol. Spectrosc.* 1984, 104(1), 59-71 (Eng). The semirigid bender Hamiltonian for C₃O₂ was extended in a manner similar to the extension previously described for HCNO [P. Jensen, (1983)]. The extended Hamiltonian describes the manifold of large-amplitude vibrational states (due to the ν_7 CCC bending mode) superimposed on a high-frequency vibrational state involving excited quanta of the CCO bending modes ν_5 and ν_6 . The extended model was used to fit CCC bending and rotation energy level sepns. for ¹²C₃¹⁶O₂ superimposed on the ν_5 fundamental level. Due to the severely limited exptl. data it is not possible to unambiguously det. the effective CCC bending potential energy function in the ν_5 state, but ests. of the potential energy parameters are obtained by detg. them in 2 limiting cases.

(v₅)

C.A. 1984, 100, N 16

C3O2

[Dm. 21586]

1985

Sipachev V. A.,

неопре-
пачен

г. Мол. Стрел., 1985,
121, N 4, 143-151.

C₃O₂

Ommeck 20828

1985

Winnewisser M.

уровни
жерни

J. Mol. Struct., 1985,
126, 41-66.

C3O₂

(Dm. 26258)

1986

Jensen P., Johns G.W.C.,

UK energy

J. Mol. Spectrosc.,

1986, 118, N1, 248-

266. ●

C3O2

1986

2 Б1282. Инфракрасный спектр недоокиси углерода в области частот основного колебания ν_6 : измерения спектра и его анализ по полужесткой изгибно-вращательной модели. The infrared spectrum of carbon suboxide in the ν_6 fundamental region: experimental observation and semirigid bender analysis. Jensen Per, Johns J. W. C. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 118, № 1, 248—266. (англ.). Место хранения. ГПНТБ СССР

На фурье-спектрометре с разрешением $0,002 \text{ см}^{-1}$ после деконволюции в обл. $500\text{—}600 \text{ см}^{-1}$ исследован ИК-спектр поглощения квазилинейной молекулы C_3O_2 . Идентифицирована вращат. структура полосы ν_6 и «горячих» полос $\nu_6 + n\nu_7 - n\nu_7$ ($n=1, 2, 3$). Анализ спектра выполнен по полужесткой изгибно-вращат. модели, в к-рой изгиб группы ССС рассматривается как колебание с большой амплитудой, а потенц. ф-ция изгиба описывается квадратично-квартичной ф-цией. Определе-

М.П.

Х. 1987, 19, №2

ны значения колебательно-вращат. постоянных и параметров потенциальной ф-ции изгибного колебания. Равновесный угол ССС составляет 156° , а барьер, препятствующий линейной конфигурации молекулы, равен 28 см^{-1} . Е. В. Алиева



C3O2

1986

2 Л152. ИК-спектр недоокиси углерода в области основной полосы ν_6 . Экспериментальное наблюдение и полужесткий деформационный анализ. The infrared spectrum of carbon suboxide in the ν_6 fundamental region: experimental observation and semirigid bender analysis. Jensen Per, Johns J. W. C. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 118, № 1, 248—266 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Методом фурье-спектроскопии в области 500—600 см^{-1} исследован ИК-спектр поглощения C_3O_2 . Для колебательно-вращательной полосы ν_6 и 6 горячих полос $\nu_6 + n\nu_7 - n\nu_7$ приведены значения частот колебательно-вращательных переходов, измеренных с точностью $\sim 3 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$. С привлечением литер. данных по отношению линий в полосе ν_6 предложена интерпретация наблюдаемых вращательных структур и на основании первичного анализа подобраны эффективные значения разностей молекулярных постоянных вида $(B' - B'')$

(М.П.)

ср. 1987, 18, № 2

и т. п. В приближении модели нежесткой деформации рассчитаны параметры ф-ции потенц. энергии деформационного $C-C-C$ колебания. Показано, что равновесная конфигурация C_3O_2 является изогнутой с $\angle CCC = 156^\circ$ и барьером между изогнутой и линейной конфигурациями 28 см^{-1} . Библ. 27. . В. К.



C₃O₂

[Ommick N9]

1984

Jensen P.,

J. Mol. Spectrosc., 1984,
104, 59-71.

(см. короб● ку с оммисками
Herzberg G.)

C3 O2

1986

ν_i , cm⁻¹ ν_0

105: 32129b The infrared spectrum of carbon suboxide in the ν_6 fundamental region: experimental observation and semirigid bender analysis. Jensen, Per; Johns, J. W. C. (Phys. Chem. Inst., Justus Liebig Univ., D-6300 Giessen, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 118(1), 248-66. (Eng). The IR spectrum of C₃O₂ was measured at high resolu. at 500-600 cm⁻¹. The spectrum was recorded with a Bomem interferometer at a resolu. of ~ 0.004 cm⁻¹; after deconvolution a resolu. of ~ 0.002 cm⁻¹ was attained. Seven bands were identified and assigned to rovibrational transitions of ¹²C₃¹⁶O₂. These consist of the ν_6 fundamental band and some of the hot bands assocd. with the ν_7 , $2\nu_7$, and $3\nu_7$ states. The data obtained on the $\nu_6 + n\nu_7$ states were used as input for a semirigid bender fit yielding the effective CCC bending potential energy function in the ν_6 state together with a no. of related parameters. From the results of the present work together with the results of previous semirigid bender fits; C₃O₂ is bent at equil. with an equil. CCC bond angle of 156° and a barrier to linearity of 28 cm⁻¹.

C.A. 1986, 105, N4

C_3O_2

1986

✓ 1 Б4418. Динамика фотофрагментации субоксида углерода. Photofragmentation dynamics of carbon suboxide.

Weiner Brad R., Rosenfeld Robert N. «J. Phys. Chem.», 1986, 90, № 17, 4037—4043 (англ.)

Методом разрешенной во времени абсорбц. спектроскопии с использованием перестраиваемого лазера на СО непрерывного действия измерены начальные колебат. распределения фотофрагмента СО, получающегося при фотодиссоциации (ФД) C_3O_2 при давл. 2—100 мТорр в среде буферных газов (He, Ar, SF_6) под действием импульсного света 193 нм и 249 нм лазеров на ArF и RgF соотв. (длительность импульсов 15 нс, интегральные потоки 1—10 и 5—20 мДж/см² соотв.). Получены след. результаты. 1. Хотя поглощение света 193 или 249 нм сопровождается возбуждением различных электронных состояний C_3O_2 , диссоциация с образованием СО происходит из одного и того же электронного состояния, скорее всего основного, заселяемого в

спектр, &c.

Х. 1987, 19, № 1.

результате внутр. конверсии. 2. Фрагментация C_3O_2 на C_2O и CO является главным перв. процессом. Продуктами является $CO(X^1\Sigma^+)$ и, по всей вероятности, $C_2O(a^1\Delta)$. Образование $C(^3P) + 2 CO$, энергетически возможное при 193 нм, не обнаруживается. 3. Начальные колебат. распределения по уровням $v'=0-5$ и $v'=0-3$ при 193 и 249 нм соотв. являются больцмановскими. Обнаружено вращат. возбуждение CO . 4. Изучены две модели распределения энергии при ФД C_3O_2 . С эксперим. данными согласуется статистич. модель, согласно к-рой избыточная энергия (46 и 22 ккал/моль при 193 и 249 нм соотв.) может распределяться по всем степеням свободы расходящихся фрагментов. Модель Франка — Кондона для ФД не способна объяснить наблюдаемые колебат. распределения. 5. C_2O быстро реагирует с C_3O_2 , давая CO (константа скорости $(2,24 \pm 0,56) \cdot 10^3 \text{ Торр}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$).

В. Е. Скурат

$C_3O_2^+$

[om. 30490]

1988

Jacob M. E.,

Ti, Vi;

J. Phys. and Chem. Ref.

Data, 1988, 17, N 2, 446.

$C_2O^{2-}(CCO^-)$ | om. 30490 | 1988

Jacoxe M.E.,

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

316.

C3O2

Qm: 30552

1988

109: 216445r Molecular structure and large-amplitude bending vibration of carbon suboxide as studied by electron-diffraction and spectroscopic data. Ohshima, Yasuhiro; Yamamoto, Satoshi; Kuchitsu, Kozo (Fac. Sci., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan 113). *Acta Chem. Scand., Ser. A* 1988, A42(6-7), 307-17 (Eng). The geometrical structure of C₃O₂ was reinvestigated by electron diffraction. The r_g distances for the C:O and C:C bonds were determined to be 1.164(2) Å and 1.286(4) Å, resp., where the uncertainties represent estd. limits of error. Available spectroscopic data such as the energy-level intervals and the rotational consts. were also taken into the anal. of the large-amplitude CCC bending vibration with a model which allows the C:C bond lengths and the CCO bond angles to vary with the bending displacement, ρ ($= 180^\circ - \angle CCC$). The effective bending potential function detd. for the vibrational ground state has a barrier of 27(16) cm⁻¹ and a min. at $\rho = 20(2)^\circ$. The bond lengths corresponding to the linear configuration, averaged over the small-amplitude vibrations, are detd. to be $r_{C-O}^{lin} = 1.1602(1)$ Å and $r_{C-C}^{lin} = 1.2761(12)$ Å. The present anal. shows that the C:O bonds are slightly stretched by the CCC bending, and the CCO angles are slightly bend in the direction of the CCC bending. The model resolved the reported discrepancy between the obsd. rotational const. and that calcd. using the structure derived from electron diffraction.

M.A.

ЗНАКОМСТВО.
 ГИДРОГРАФ. И
 ЧЕРТЕЖНИК.

C.A. 1988, 109, 424

C₃O₂

От 30552

1988

3 Б1138. Молекулярная структура и деформационное колебание большой амплитуды недокиси углерода, изученные по данным электронографии и спектроскопии. Molecular structure and large-amplitude bending vibration of carbon suboxide as studied by electron-diffraction and spectroscopic data / Ohshima Y., Yamamoto S., Kuchitsu K. // Acta chem. scand. A.— 1988.— 42, № 6—7. С. 307—317.— Англ.

Методом газовой электронографии повторно изучена структура молекулы C₃O₂. Найдены след. значения межъядерных расстояний r_g (А): C=O 1,164(2), C=C 1,286(4). Для анализа деформац. колебания ССС большой амплитуды была принята модель, в к-рой длины связей C=C и углы ССО зависят от деформац. смещения ρ ($=180^\circ - \angle \text{ССС}$) и использованы спектральные данные для энергетич. интервалов и вращат. постоянных. Для эффективной потенциальной ф-ции де-

11.11.

Х. 1989, №3

формац. колебания найдены значение барьера $27(16) \text{ см}^{-1}$ и минимум при значении $\rho = 20(2)^\circ$. Определены также след. значения длин связей, соотв. линейной конфигурации и усредненных по колебаниям малой амплитуды: $r_{\text{CO}}^{\text{лин}} = 1,1602(5) \text{ \AA}$, и $r_{\text{CC}}^{\text{лин}} = 1,2761(12) \text{ \AA}$. Из результатов анализа следует, что связи $\text{C}=\text{C}$ растягиваются при деформации угла ССС , а углы ССО уменьшаются. Эта модель колебаний объясняет несоответствие между спектральным значением вращат. постоянной и рассчитанным с помощью структурных параметров, определенных электронографич. методом. Библ. 35. В. П. Спиридонов



C₃O₂

1991

115: 145319p The far infrared spectrum of carbon suboxide (C₃O₂). Vander Auwera, J.; Johns, J. W. C.; Polyanskii, O. L. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Chem. Phys.* 1991, 95(4), 2299-316 (Eng). The far IR spectrum of carbon suboxide, ¹²C₃¹⁶O₂, was recorded at a resolu. of 0.003 cm⁻¹ in the region from 15 to 130 cm⁻¹ with a Bomem interferometer. Altogether 18 bands involving the excitation of up to 8 quanta in the low frequency quasilinear bending mode ν_7 were analyzed rotationally. A total of 1320 far IR lines together with 231 microwave lines taken from E.N. Karyakin et al. (1982) were fitted to an effective model. Improved effective consts. were obtained for all the l sublevels of $\nu = 0$ to 4 and for $l = 1$ of $\nu = 5$. Consts. were obtained for the first time for the levels 5⁺ and 5⁻ and some of the l sublevels of $\nu = 6, 7$, and 8. Data for the lower lying levels were fitted to a realistic linear model and some data were also fitted to a bend model.

UK-crcmp,

M.A.

C.A. 1991, 115, N14

C₃O₂

1994

120: 176707w The ν_6 band system of C₃O₂ near 540 cm⁻¹.
Vander Auwera, J.; Holland, J. K.; Jensen, P.; Johns, J. W. C.
(Lab. Chim. Phys. Mol., Univ. Libre Bruxelles, 1050 Brussels, Belg.).
J. Mol. Spectrosc. 1994, 163(2), 529-40 (Eng). The IR spectrum of
the ν_6 band system of carbon suboxide, C₃O₂, has been recorded
between 500 and 600 cm⁻¹ at a resolu. of 0.002 cm⁻¹. Altogether 23
bands have been assigned.

(ν_6)

C.A. 1994, 120, N14

1999

F: C302

P: 3

131:9835 An ab initio study on the structure of
the ground state of the C302 molecule. Miyoshi,
Eisaku; Shida, Norihiro (Institute for Molecular
Science, Okazaki 444-8585, Japan). Chem. Phys. Lett.,
303(1,2), 50-56 (English) 1999

C.A. 2000

~~... ground state~~ RHF and single-ref. coupled-pair approxn. (SRCPA) calcns. were performed for the ground state of the C3O2 mol. The SRCPA calcns. revealed that C3O2 is quasi-linear with a global min. in a W-shaped structure (C2v symmetry) with .angle.C-C-C=153.6.degree. and .angle.C-C-O=176.4.degree.. The obsd. very low frequency of 18.2 cm-1 is not a fundamental vibrational frequency along the .nu.7 mode, but should rather be assigned to the transition between two vibrational states which are split by the interaction of two ground vibrational states in the double min. ~~... ground state~~

C₃O₂

[Om 402 49]

2000

Jack Loput,

Chem. Phys. Lett., 2000,
320, N3-4, 237-244.

An ab initio study on the
equilibrium structure and CCC
tending energy levels

of carbon suboxide.

C₃O₂

2001

модем.
падем
смыкал.,
М.Н.

C.A. 2001, 135, N10

135: 142479t A density functional theory study of structure and molecular spectroscopy of carbon suboxide. Chen, Wen-Kai; Yang, Ying-Chun; Lu, Chun-Hai; Xu, Jiao (Department of Chemistry, Ningbo University, Ningbo, Zhejiang, Peop. Rep. China 315211). *Jiegou Huaxue* 2001, 20(4), 294-298 (Ch), Jiegou Huaxue Bianji Weiyuanhui. The optimized geometries of mol. carbon suboxide (C₃O₂) were obtained by using B3LYP calcn. of d. functional theory (DFT) with the 6-31G(d) and 6-311G(2d) basis sets. The normal vibrational frequencies of the two typical configurations were calcd. at the B3LYP/6-31G(d) level and the scaled vibrational frequencies were compared with expts. Good agreement is obtained between the computed and exptl. obsd. properties. The results show that the mol. C₃O₂ has a W-shape bent form (C_{2v} symmetry). The calcd. bond angles of C-C-C and C-C-O with B3LYP/6-31G(d) are 162.3° and 178.8°, resp.