

**История изучения явлений, связанных с внутренним вращением
в молекуле 1,2- дихлорэтана, методом газовой электронографии**

Левин Борис Анатольевич

аспирант

Институт истории естествознания и техники РАН, Москва, Россия

E-mail: levinan36@mail.ru

В начале тридцатых годов двадцатого века Weirl [1], используя визуальные данные по электронной дифракции, заключил, что 1,2-дихлорэтан состоял из цис- и транс-форм. Несколько позднее Beach и Palmer [2], пользуясь визуальными электронно-дифракционными данными, установили, что транс-конфигурация была основным положением равновесия.

В начале сороковых годов Glockler [3] показал, что Weirl [1] ошибочно приписал цис-форме расстояние, соответствовавшее гош-форме, и, следовательно, он открыл смесь гош- и транс-изомеров. Почти одновременно с ним японские ученые [4], используя визуальные электронографические данные, подтвердили, что транс-положение преобладает, и установили, что на гош-положение приходится примерно 20%.

Следующий шаг в исследовании явлений, связанных с внутренним вращением в молекуле 1,2-дихлорэтана, сделали J.Ainsworth и J.Karle [5] в 1952 году, применив для этой задачи метод дифракции электронов газами, основанный на количественных измерениях интенсивности.

Из кривой рассеяния была вычислена кривая радиального распределения $f(r)$, представлявшая собой Фурье-преобразование функции интенсивности рассеяния. Эта функция радиального распределения была разложена на индивидуальные пики для каждого межуатомного расстояния. Когда кривая Гаусса была подогнана насколько возможно к асимметричному транс-Cl-Cl пику, для средней амплитуды колебания получилось значение 0.66Å.

Согласно данным, полученным J.Ainsworth и J.Karle [5], наименее стабильным изомером является гош-форма. Гош- и транс-формы появляются на кривой радиального распределения, их соотношение измеряется площадями под соответствующими кривыми формулой, применение которой дало значение для гош-формы 25%.

Другой путь оценки количества гош-формы, который описали J.Ainsworth и J.Karle [5] в 1952 году, заключался в изучении кривых интенсивности. Было найдено, что высота между максимумом и минимумом при $s=3.2$ и $s=4.0$ очень чувствительна к относительным количествам транс- и гош-форм. Также обнаружилось, что состав, при котором на долю гош-формы приходится 27%, очень хорошо согласуется с экспериментом, тогда как пропуск гош-формы давал ошибку около 135 процентов кривой интенсивности. Процентная доля гош-формы в работе J.Ainsworth и J.Karle [5] составила 27 ± 5 % при 22°C , значение равновесного угла – $109 \pm 5^\circ$.

Литература

1. R. Weirl, (1932) Elektronenbeugung und Molekulaufbau // Ann. d. Physik 13, 453
2. J.Y. Beach and K.J. Palmer, (1938) Internal Rotation in Ethylene Chloride // The Journal of Chemical Physics, V 6, p. 639-634
3. G. Glockler, (1943) The Raman Effect // Revs. Modern Phys. 15, 155.
4. Yamaguchi, Morino, Watanabe and Mizushima, (1943) Sci. Papers Inst. Phys. Chem. Research (Tokyo) 40, p.417
5. J.Ainsworth and J. Karle (1952) The Structure and Internal Motion of 1,2 Dichloroethane // The Journal of Chemical Physics V. 20, № 3, p.425-427