

**Zeitschrift:** Archives des sciences [1948-1980]  
**Herausgeber:** Société de Physique et d'Histoire Naturelle de Genève  
**Band:** 12 (1959)  
**Heft:** 8: Colloque Ampère : Maxwell-Ampère conference

**Artikel:** Molecular motion in dichloroethane  
**Autor:** Ragle, J.L.  
**DOI:** <https://doi.org/10.5169/seals-739116>

### **Nutzungsbedingungen**

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. [Mehr erfahren](#)

### **Conditions d'utilisation**

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. [En savoir plus](#)

### **Terms of use**

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. [Find out more](#)

**Download PDF:** 04.04.2026

**ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>**

# Molecular Motion in Dichloroethane

by J. L. RAGLE

University of Massachusetts, Amherst, Massachusetts, U.S.A.

---

## *Résumé.*

L'examen de la relation avec la température du spectre de résonance quadrupolaire pure du dichloroéthane 1-2 est présenté et discuté en relation avec les observations faites sur ce produit par d'autres méthodes. Dans l'intervalle de température, 77° K-238° K, la fréquence de résonance quadrupolaire passe de 34,4 Mc/s à 29,9 Mc/s. Si on admet que des réorientations aléatoires rapides de la molécule ont lieu autour de l'axe Cl-Cl aux hautes températures, on obtient une fréquence limite de 28,9 Mc/s. Ce résultat ne tient pas compte des autres mouvements moléculaires ni des effets du champ cristallin, ni des effets de torsion au point zéro.

Qualitativement, on s'attend à ce qu'un déplacement de fréquence se produise quand la vitesse moyenne de réorientation est de l'ordre de grandeur de la fréquence de Larmor. Comme on observe une transition dans la largeur de raie du proton dans la zone 165-180° K, l'activation du mouvement moléculaire doit se produire d'une manière qui ne peut s'interpréter par une expression exponentielle d'Arrhenius. Pour illustrer ce fait: avec une énergie d'activation de 2,5 kcal mole<sup>-1</sup> et une fréquence de collision de 10<sup>11</sup> sec<sup>-1</sup>, le point milieu du déplacement de la fréquence quadrupolaire se produit à environ 177° K, tandis que la transition de la largeur de raie du proton se produit au-dessous de 100° K. Avec une énergie d'activation de 6 kcal mole<sup>-1</sup> et une fréquence de collision convenable, l'amincissement de la raie du proton se produit à 110° K.

Ainsi, les résultats obtenus par la résonance quadrupolaire reliés aux résultats de résonance magnétique nucléaire de Gutowsky et Pake, s'accordent pour suggérer que la réorientation se produit sensiblement autour de l'axe Cl-Cl. Ces données font penser que la réorientation est rapidement activée sur un étroit domaine de température et que la vitesse de réorientation est supérieure à 10<sup>8</sup> sec<sup>-1</sup> à 177° K.

Observations on the temperature dependence of the pure quadrupole spectrum of 1,2-dichloroethane were reported and discussed in conjunction with observations made by other means on this compound. In the temperature range 77° K to 238° K the quadrupole spectrum undergoes a change in frequency from 34.4 mcps to 29.9 mcps. If it is assumed that rapid random reorientations of the molecule as a whole occur about the chlorine-chlorine axis at high temperatures, one obtains a limiting frequency

of 28.9 mcps. This figure neglects other molecular motions, as well as crystalline field effects and effects of zero-point torsion.

Qualitatively, one expects quadrupole frequency shifts to occur when the mean rate of reorientation approximates the Larmour frequency. Since a transition is observed in the proton line width over the range 165° K to 180° K the activation of molecular motion must take place in a manner which is inconsistent with an Arrhenius exponential expression. To illustrate this fact: For an activation energy of 2.5 kcal mole<sup>-1</sup> and a collision frequency of 10<sup>11</sup> sec<sup>-1</sup> the midpoint of the quadrupole frequency shift occurs at roughly 177° K while the proton line width transition occurs at less than 100° K. If one takes an activation energy of 6 kcal mole<sup>-1</sup> together with an appropriate collision frequency, proton line narrowing occurs at 110° K.

Thus the quadrupole data, in conjunction with the NMR data of Gutowsky and Pake, support the suggestion that reorientation occurs about approximately the chlorine-chlorine axis. These data suggest that the reorientation is rapidly activated over a narrow temperature range and that the rate of reorientation exceeds 10<sup>8</sup> sec<sup>-1</sup> at 177° K.

---