

263  
MW $\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$ 

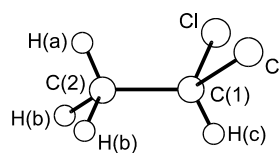
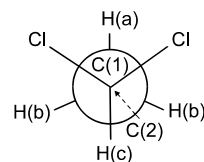
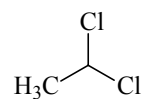
1,1-Dichloroethane

 $\text{C}_s$ 

$r_s$	$\text{\AA}$	$\theta_s$	deg
C–C	1.517(3)	C–C–Cl	110.8(2)
C–Cl	1.775(1)	C–C–H(a)	109.2(2)
C–H(a)	1.100(5)	C–C–H(b)	109.6(3)
C–H(b)	1.093(2)	C–C–H(c)	111.5(2)
C–H(c)	1.085(1)	Cl–C–H(c)	106.6(2)
		H(a)–C–H(b)	108.9(4)
		H(b)–C–H(b)	110.8(2)
		Cl–C–Cl	110.4(1)

$r_0$	$\text{\AA}$	$\theta_0$	deg
C–C	1.508(18)	C–C–Cl	111.1(4)
C–Cl	1.782(8)	C–C–H(a)	109.3(8)
C–H(a)	1.092(20)	C–C–H(b)	109.1(29)
C–H(b)	1.097(28)	C–C–H(c)	111.8(21)
C–H(c)	1.094(16)	Cl–C–H(c)	106.4(12)
		H(a)–C–H(b)	109.4(40)
		H(b)–C–H(b)	110.5(49)
		Cl–C–Cl	109.8(7)

Atom <sup>a)</sup>	$a_s [\text{\AA}]$	$b_s [\text{\AA}]$	$c_s [\text{\AA}]$
C(2)	0.00	1.8057	−0.1465
H(a)	0.00	1.7381	−1.2441
H(b)	±0.8995	2.3368	0.1747
C(1)	0.00	0.4057	0.4386
Cl	±1.4578	−0.4809	−0.0500
H(c)	0.00	0.4275	1.5234

<sup>a)</sup> See figure for the definition of atoms.Sugie, M., Kato, M., Matsumura, C., Takeo, H.: J. Mol. Struct. **413-414** (1997) 487.Replaces [II/25B\(3, 736\)](#)